Universität Bonn 21.12.2010
Physikalisches Institut
Prof. Dr. J. Kroha, K. Ballmann, R. Katzer
http://www.th.physik.uni-bonn.de/th/groups/kroha/teaching/StatMech_WS10/

Theoretische Physik IV — WS 2010/11

Übungsblatt 11

(Abgabe am 11. Januar, Besprechung vom 11. bis 13. Januar)

11.1 Thermodynamische Störungstheorie: Der anharmonische Oszillator (10 Punkte)
In einem zwei-atomigen Molekül seien die Atome durch das in Abbildung 1 gezeigte Potential U aneinander gebunden, wobei r den Abstand der Atome bezeichne. Außerdem sei das Molekül in ein Kristallgitter eingebunden, sodass keine Rotationsfreiheitsgrade auftreten. Für kleine Auslenkungen x aus der Ruhelage x_0 kann U um x_0 entwickelt werden. Das Molekül wird dann näherungsweise durch den folgenden Hamilton-Operator beschrieben:

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega_0^2 x^2 + \alpha x^3 \,,$$

mit der effektiven Masse M und der Eigenfrequenz ω_0. Der kubische Term soll im Folgenden als kleine Störung betrachtet werden. Der Ortsoperator x kann durch die Auf- und Absteige-operatoren a und $a^\dagger$ ausgedrückt werden.

(a) Zeige, dass für die freie Energie in zweiter Ordnung Störungstheorie allgemein gilt:

$$F = F_0 + \sum_n \langle n|V|n\rangle W_{c,n}^{(0)} + \frac{1}{2}\beta\left(\sum_n \langle n|V|n\rangle W_{c,n}^{(0)}\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_{n,m} |\langle n|V|m\rangle|^2 \frac{W_{c,n}^{(0)} - W_{c,m}^{(0)}}{\epsilon_n - \epsilon_m}$$

Hinweis: Berechne zunächst wie in der Vorlesung die Zustandssumme bis zur zweiten Ordnung und benutze dann $\ln(1+x) \approx x - \frac{1}{2}x^2$.

(b) Gib die Zustandssumme Z_0 und die freie Energie F_0 des ungestörten Systems an.

(c) Bestimme nun die Korrektur zur freien Enrgie bis zur zweiten Ordnung Störungstheorie. Es sollen nur tiefe Temperaturen betrachtet werden, d.h. bei der Auswertung sollen nur

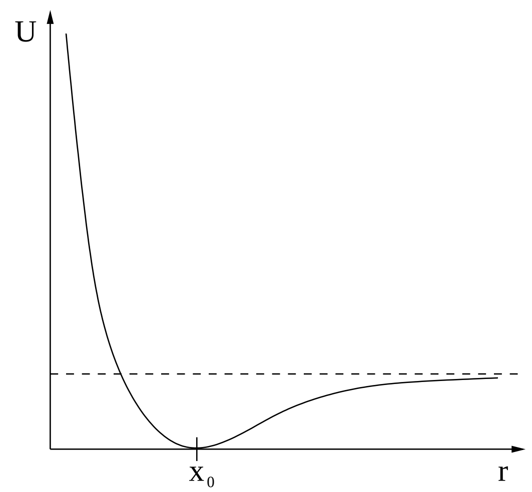

Abbildung 1: Potentielle Energie des anharmonischen Oszillators

die beide führenden Ordnungen in $\exp(\frac{-\hbar\omega_0}{k_B T})$ berücksichtigt werden. Berechne aus F die spezifische Wärme für $T \to 0$.

(d) Berechne den mittleren Abstand $(x_0 + \langle x \rangle)$ der Atome in erster Ordnung Störungstheorie.

<u>11.2 Liouville-Theorem</u> (10 Punkte)

Wir betrachten ein System aus N klassischen Teilchen, die den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen folgen,

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \text{und} \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{für} \quad i = 1, ..., 3N$$

mit der Hamiltonfunktion $H = H(q, p)$ und den generalisierten Impuls- bzw. Ortskoordinaten $p = (p_1, ..., p_{3N})$ und $q = (q_1, ..., q_{3N})$. Das Phasenraumvolumen zum Zeitpunkt t ist gegeben durch

$$\Gamma_t = \int d^{3N}\tilde{q}\; d^{3N}\tilde{p}\; \rho(\tilde{q}, \tilde{p}, t)$$

mit der Phasenraumdichte

$$\rho(\tilde{q}, \tilde{p}, t) = \int d^{3N}q_0\; d^{3N}p_0\; W(p_0, q_0) \prod_{i=1}^{3N} \delta(\tilde{q}_i - q_i(q_0, p_0, t))\delta(\tilde{p}_i - p_i(q_0, p_0, t)),$$

wobei q_0 und p_0 die Koordinaten der Teilchen zur Zeit $t = 0$ sind, welche einer Verteilung $W(q_0, p_0)$ folgen.

(a) Zeige, dass in einem mitbewegten Bezugssystem, $\tilde{q} = \tilde{q}(\tilde{q}_0, \tilde{p}_0, t)$ und $\tilde{p} = \tilde{p}(\tilde{q}_0, \tilde{p}_0, t)$ gemäß den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen, die Phasenraumdichte zeitlich konstant ist,

$$\frac{d}{dt}\rho(\tilde{q}(\tilde{q}_0, \tilde{p}_0, t), \tilde{p}(\tilde{q}_0, \tilde{p}_0, t), t) = 0 \;.$$

(b) Folgere daraus für das Phasenraumvolumen

$$\Gamma_t = \int d^{3N}\tilde{q}_0\; d^{3N}\tilde{p}_0\; \rho(\tilde{q}_0, \tilde{p}_0, t = 0) \det J^{t,0}$$

mit der Jacobi-Matrix $J^{t,0} = \left(\frac{\partial \tilde{\pi}_i(t)}{\partial \tilde{\pi}_k(0)}\right)_{i,k=1,...6N}$ und $\widetilde{\pi} = (\tilde{q}, \tilde{p})$. Beweise schließlich das Liouville-Theorem $\Gamma_t = \Gamma_0$, indem du zeigst, dass die Jacobi-Determinante zeitunabhängig ist und damit $\det J^{t,0} = 1$ gilt.
Hinweis: $\sum_{k=1}^{N} a_{ik} U_{jk} = \delta_{ij} \det A$ für eine $N \times N$-Matrix $A = (a_{ij})$ mit den Unterdeterminanten U_{jk}.

<u>11.3 Heisenberg-Modell und reduzierte Dichtematrix</u> (10 Punkte)

Wir betrachten das Heisenberg-Modell für zwei Spins $\mathbf{S}^1$ und $\mathbf{S}^2$ (S=1/2) mit antiferromagnetischer Kopplung,

$$\hat{H} = J\; \hat{\mathbf{S}}^1 \cdot \hat{\mathbf{S}}^2 \quad \text{mit} \quad J > 0 \;.$$

(a) Zeige, dass sich der Hamiltonian schreiben lässt als

$$\hat{H} = \frac{J}{2}(\mathbf{S})^2 + const. = \frac{J}{4}(S_+S_- + S_-S_+ + 2(S_z)^2) + const.,$$

wobei $S_\pm = S_\pm^1 + S_\pm^2$ der Auf- bzw. Absteigeoperator des Gesamtspins $\mathbf{S} = \mathbf{S}^1 + \mathbf{S}^2$ ist und $S_z = S_z^1 + S_z^2$. Berechne anschließend die Eigenzustände Ψ_i von $\hat{H}$,

$$\hat{H}|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle \quad \text{mit} \quad |\Psi_i\rangle = \sum_{S_z^1, S_z^2 = \pm 1/2} C_i(S_z^1, S_z^2)|S_z^1, S_z^2\rangle \;,$$

wobei du ein Singlett $|S = 0, S_z = 0\rangle$ und ein Triplett $|S = 1, S_z\rangle$, $S_z = 0, \pm 1$, erhalten solltest. Zeige schließlich, dass der Dichteoperator gegeben ist durch

$$W_c = \frac{1}{Z_c}\left(|0,0\rangle\langle 0,0| + e^{-\beta J} \sum_{S_z=0,\pm 1} |1, S_z\rangle\langle 1, S_z|\right) \quad \text{mit} \quad Z_c = 1 + 3e^{-\beta J} \; .$$

(b) Nehmen wir nun an, wir seien nur an Teilsystem $\mathbf{S}^1$ als Messgröße interessiert. Berechne die reduzierte Dichtematrix, indem du die Spur über die Freiheitsgrade von Spinsystem $\mathbf{S}^2$ bildest.

(c) Betrachte nun das System im Grenzfall $T \to 0$. Was ergibt sich für die volle und für die reduzierte Dichtematrix? Berechne zuletzt für beide Fälle die Entropie S.