Gerhard Kahl & Florian Libisch

STATISTISCHE PHYSIK 1 (VU – 136.020)

7. Tutoriumstermin (20.5.2016)

T21. QUANTENMECHANISCHES 3-NIVEAU SYSTEM

Gegeben sind

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\rho}_2 = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

a). Reiner oder gemischter Zustand

Ist $\hat{\rho}$ einer reiner Zustand, gilt $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. Quadrieren der obigen Matrizen führt auf

$$\hat{\rho}_1^2 = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\rho}_2^2 = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5/4 & 1 \\ 0 & 1 & 5/4 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Wir lesen ab, dass $\hat{\rho}_1$ ist ein reiner, $\hat{\rho}_2$ einen gemischten Zustand beschreibt.

b). Ein Operator

Der Operator

$$\hat{A}\,|\Phi_1\rangle = |\Phi_3\rangle\,, \quad \hat{A}\,|\Phi_2\rangle = |\Phi_2\rangle\,, \quad \hat{A}\,|\Phi_3\rangle = |\Phi_1\rangle\,, \tag{3}$$

vertauscht die erste und dritte Zeile. In Matrixform lautet er

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

a. Erwartungswert

$$\langle \hat{A} \rangle_1 = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}_1 \hat{A}\right) = -\frac{1}{3} \tag{5}$$

$$\langle \hat{A} \rangle_2 = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}_2 \hat{A}\right) = \frac{1}{2} \tag{6}$$

b. Schwankung Die Schwankung berechnen wir über

$$\left(\Delta \hat{A}\right)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2. \tag{7}$$

Da $\hat{A}^2 = \mathbb{1}$, gilt für beide Dichteoperatoren $\langle \hat{A}^2 \rangle = 1$. Damit folgt

$$\Delta \hat{A}_1 = \sqrt{1 - \frac{1}{9}} = \frac{2\sqrt{2}}{3} \tag{8}$$

$$\Delta \hat{A}_2 = \sqrt{1 - \frac{1}{4}} = \frac{\sqrt{3}}{2}. \tag{9}$$

T22. ZUSTANDSDICHTE DES IDEALEN QUANTENGASES

a). 3D Quantengas

$$\psi = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\frac{n_x \pi}{L} \sin\frac{n_y \pi}{L} \sin\frac{n_z \pi}{L} \quad \text{with } n_x \in \mathbb{N}, n_y \in \mathbb{N}, n_z \in \mathbb{N} \tag{10}$$

Das Volumen eines Zustandes im k-Raum ist $\left(\frac{\pi}{L}\right)^3$ und die Anzahl der Zustände mit $|\mathbf{k}| < k$ ist daher

$$N(k) = \frac{\frac{1}{8}\frac{4k^3\pi}{3}}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^3} = k^3 \frac{L^3}{6\pi^2} \tag{11}$$

Die Zustandsdichte ist nun $\mathcal{D}(\epsilon_k) = \frac{dN}{d\epsilon}$ und lässt sich mittels der Dispersionsrelation (**??**) berechnen:

$$\mathcal{D}(\epsilon_k) = \frac{dN}{d\epsilon_k} = \frac{L^3}{4\pi^2}\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\right)^3 \sqrt{\epsilon_k} \tag{12}$$

$$\hat{\mathcal{D}}(\epsilon_k) = \int_0^{\epsilon} \mathcal{D}(\epsilon_k')\mathrm{d}\epsilon_k' = \frac{2}{3}\epsilon_k \mathcal{D}(\epsilon_k) \tag{13}$$

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \epsilon_k \mathcal{D}(\epsilon_k) f_x(\epsilon_k)\, \mathrm{d}\epsilon_k = \frac{3}{2}\int_0^\infty \hat{\mathcal{D}}(\epsilon_k) f_x(\epsilon_k)\, \mathrm{d}\epsilon_k = \frac{3}{2}PV \tag{14}$$

b). 2D Quantengas

$$\psi = \sqrt{\frac{4}{L^2}} \sin\frac{n_x \pi}{L} \sin\frac{n_y \pi}{L} \quad \text{with } n_x \in \mathbb{N}, n_y \in \mathbb{N} \tag{15}$$

Das Volumen eines Zustandes im k-Raum ist $\left(\frac{\pi}{L}\right)^2$ und die Anzahl der Zustände mit $|\mathbf{k}| < k$ ist daher

$$N(k) = \frac{\frac{1}{4}k^2\pi}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^2} = k^2 \frac{L^2}{4\pi} \tag{16}$$

Die Zustandsdichte ist nun $\mathcal{D}(\epsilon_k) = \frac{dN}{d\epsilon}$ und lässt sich mittels der Dispersionsrelation (**??**) berechnen:

$$\mathcal{D}(\epsilon_k) = \frac{dN}{d\epsilon_k} = \frac{L^2}{2\pi}\frac{m}{\hbar^2} = \text{const.} \tag{17}$$

$$\hat{\mathcal{D}}(\epsilon_k) = \int_0^{\epsilon} \mathcal{D}(\epsilon_k')\mathrm{d}\epsilon_k' = \epsilon_k \mathcal{D}(\epsilon_k) \tag{18}$$

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \epsilon_k \mathcal{D}(\epsilon_k) f_x(\epsilon_k)\, \mathrm{d}\epsilon_k = \int_0^\infty \hat{\mathcal{D}}(\epsilon_k) f_x(\epsilon_k)\, \mathrm{d}\epsilon_k = PV \tag{19}$$

c). 1D Quantengas

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_x \pi}{L} \quad \text{with } n_x \in \mathbb{N} \tag{20}$$

Das Volumen eines Zustandes im k-Raum ist $\frac{\pi}{L}$ und die Anzahl der Zustände mit $k_x < k$ ist daher

$$N(k) = \frac{k}{\frac{\pi}{L}} = k\frac{L}{\pi} \tag{21}$$

Die Zustandsdichte ist nun $\mathcal{D}(\epsilon_k) = \frac{dN}{d\epsilon}$ und lässt sich mittels der Dispersionsrelation (**??**) berechnen:

$$\mathcal{D}(\epsilon_k) = \frac{dN}{d\epsilon_k} = \frac{dN}{dk}\frac{dk}{d\epsilon_k} = \frac{L}{\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\epsilon_k}} \tag{22}$$

$$\hat{\mathcal{D}}(\epsilon_k) = \int_0^{\epsilon} \mathcal{D}(\epsilon_k')\mathrm{d}\epsilon_k' = 2\epsilon_k \mathcal{D}(\epsilon_k) \tag{23}$$

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \epsilon_k \mathcal{D}(\epsilon_k) f_x(\epsilon_k)\, \mathrm{d}\epsilon_k = \frac{1}{2}\int_0^\infty \hat{\mathcal{D}}(\epsilon_k) f_x(\epsilon_k)\, \mathrm{d}\epsilon_k = \frac{1}{2}PV \tag{24}$$

T23. EINSTEIN MODELL

a). Hamilton Operator und Hilbertraum

Der Hilbertraum des Systems setzt sich zusammen aus dem direkten Produkt der einteilchen Hilberträume des eindimensionalen harmonischen Oszillators,

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \otimes ... \otimes \mathcal{H}^{(3N)}. \tag{25}$$

In der Ortsdarstellung ist $\mathcal{H}^i = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, der quadratintegrablen Funktionen auf $\mathbb{R}$.
Der Hamilton Operator des Problems ist gegeben durch,

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=0}^{N} \frac{\hat{p}_{x,i}^2}{2m} + \frac{\hat{p}_{y,i}^2}{2m} + \frac{\hat{p}_{z,i}^2}{2m} + \frac{m\hat{x}_i^2 w^2}{2} + \frac{m\hat{y}_i^2 w^2}{2} + \frac{m\hat{z}_i^2 w^2}{2} \tag{26}$$

und lässt sich in Erzeugungs- und Annihilationsoperatoren schreiben als,

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^{3N} \hbar\omega\big(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2}\big) \tag{27}$$

b). kanonische Zustandssumme

$$Z_k = \mathrm{Tr}(e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}) = \sum_{n_1,n_2,\ldots,n_{3N}=0}^{\infty} \prod_{i=1}^{3N} e^{-\beta\hbar\omega(n_i+\frac{1}{2})} \tag{28}$$

$$Z_k = \prod_{i=1}^{3N}\sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n_i+\frac{1}{2})} = \prod_{i=1}^{3N} \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\hbar\beta\omega}} = \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\hbar\beta\omega}}\right)^{3N} \tag{29}$$

c). Wärmekapazität

$$\ln(Z_k) = 3N(\frac{-\beta\hbar\omega}{2} - \ln\bigl(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\bigr)) \tag{30}$$

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z_k) = 3N\hbar\omega(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}) \tag{31}$$

$$C_V = \frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T} = 3Nk_b\left(\frac{\hbar\omega}{k_bT}\right)^2 \frac{e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} \tag{32}$$

d). Interpretation

Für große Temperaturen $\frac{\omega\hbar}{k_\mathrm{B}T} \ll 1$,

$$C_V \approx 3Nk_b(\omega\hbar\beta)^2 \frac{1 + \mathcal{O}(\frac{1}{T})}{(1 + \beta\hbar\omega + \mathcal{O}(\frac{1}{2T^2}) - 1)^2} \approx 3Nk_b \qquad = \text{Dulong-Petit} \tag{33}$$

und für kleine Temperaturen, also $\frac{\omega\hbar}{k_\mathrm{B}T} \gg 1$,

$$C_V \approx 3Nk_b(\omega\hbar\beta)^2 \frac{e^{\beta\omega\hbar}}{(e^{\beta\omega\hbar})^2} \propto e^{-\frac{1}{T}} \qquad = \text{Hier stellt das Einstein Modell keine gute Näherung dar.} \tag{34}$$

Für große Temperaturen stellt das Einstein Modell eine gute Näherung dar. Für niedrige Temperaturen erhalten wir einen exponentiellen Abfall der spezifischen Wärmekapazität, dies passt nicht zu experimentell bestimmten Werten ($\propto T^3$) und kann erst durch das Debye Modell richtig beschrieben werden.