# 8. Übung zur Statistischen Physik [Krüger, SS 2020]
**Ausgabe: 16.06.2020, Abgabe: 23.06.2020, 12 Uhr**

WWU

## Aufgabe 20: Quantenstatistik von harmonischen Oszillatoren [7 Punkte]

In einem einfachen Modell wird ein Festkörper durch ein System von $3\,N$ ungekoppelten harmonischen Oszillatoren beschrieben. Der Hamiltonoperator dieses Systems lautet:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{3\,N} \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2\,m} + \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\,x_i^2 \right) \; .$$

a) Betrachten Sie zunächst einen Oszillator und geben Sie den zugehörigen kanonischen Dichteoperator

$$\hat{\rho} = \sum_n w_n \, |\varphi_n\rangle \, \langle\varphi_n|$$

an. Berechnen Sie die Zustandssumme.

b) Geben Sie die Zustandssumme für $3\,N$ Oszillatoren an und berechnen Sie die freie Energie des Systems.

c) Bestimmen Sie den statistischen Erwartungswert $\langle \hat{H} \rangle$ der Energie.

d) Wie groß ist die Wärmekapazität $C_V$ des Systems?

e) Diskutieren Sie $Z$, $\langle \hat{H} \rangle$ und $C_V$ im Grenzfall hoher und tiefer Temperaturen. Skizzieren Sie $C_V\,(T)$.

## Aufgabe 21: Quantenstatistik von ungekoppelten magnetischen Momenten [7 Punkte]

Ein System aus $N$ Atomen mit magnetischen Momenten befinde sich in einem homogenen Magnetfeld $\vec{B} = (0,\,0,\,B)$. Der Hamiltonoperator des Systems lautet:

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{m}}_i \cdot \vec{B} = -\sum_{i=1}^{N} \frac{e}{2\,m_e}\,g\,\hat{\vec{J}}^{(i)} \cdot \vec{B} \; .$$

Dabei bezeichnet $g$ das gyromagnetische Verhältnis und $\hat{\vec{J}}^{(i)}$ ist der Gesamtdrehimpulsoperator des $i$-ten Atoms. Die Drehimpulsquantenzahl $j$ hat für alle Atome den gleichen Wert und es gilt

$$\hat{J}^{2\,(i)}\,|\varphi^{(i)}\rangle = \hbar^2\,j\cdot(j+1)\,|\varphi^{(i)}\rangle \;, \qquad \hat{J}_z^{(i)}\,|\varphi^{(i)}\rangle = \hbar\,m_j^{(i)}\,|\varphi^{(i)}\rangle \quad \text{mit} \quad -j \le m_j^{(i)} \le j \;,$$

wobei $|\varphi^{(i)}\rangle$ die Eigenfunktion des $i$-ten Atoms ist.

a) Berechnen Sie zunächst die Zustandssumme für ein Atom. Wie groß ist die Zustandssumme des Gesamtsystems?

b) Bestimmen Sie die Magnetisierung $M\,(T)$ in Abhängigkeit von der Drehimpulsquantenzahl $j$. Schreiben Sie Ihr Resultat in der Form

$$M\,(T) = \frac{N}{V}\,\tilde{m}\cdot\mathcal{B}_j\,(\beta\,\tilde{m}\,B) \qquad \text{mit} \qquad \tilde{m} = \frac{e}{2\,m_e}\,g\,\hbar\,j \; .$$

$\mathcal{B}$ ist die sogenannte Brillouin-Funktion. Skizzieren Sie $\mathcal{B}_j$ als Funktion von $\beta\,\tilde{m}\,B$ und $M$ als Funktion von $\frac{B}{T}$ für $j = \frac{1}{2}$, $j = 1$ und $j = \frac{3}{2}$. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem in der Vorlesung angegebenen Resultat der klassischen Statistik.

### Aufgabe 22: Beitrag von Rotationsfreiheitsgraden zur spezifischen Wärme [6 Punkte]

Gegeben sei ein Gas aus (unterscheidbaren) zweiatomigen heteronuklearen Molekülen, z. B. HCl. Bezüglich seiner Rotationsfreiheitsgrade wird ein solches Molekül durch den Hamiltonoperator eines starren Rotators beschrieben:

$$\hat{H} = \frac{1}{2\,I}\,\hat{L}^{\,2} = \frac{k_B\,\theta_{\mathrm{rot}}}{\hbar^2}\,\hat{\vec{L}}^{\,2}\,.$$

Dabei ist $I$ das Trägheitsmoment des Moleküls, $\theta_{\mathrm{rot}}$ ist die sogenannte Rotationstemperatur.

a) Geben Sie die Eigenwerte des obigen Hamiltonoperators und deren Entartungsgrad an.

b) Berechnen Sie $\theta_{\mathrm{rot}}$ für ein HCl-Molekül.

c) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme des Gesamtsystems. Für große Temperaturen ($T \gg \theta_{\mathrm{rot}}$) dürfen Sie die Summe in ein Integral umformen. Für kleine Temperaturen ($T \ll \theta_{\mathrm{rot}}$) reicht es aus, explizit die ersten Terme der Summe aufzusummieren.

d) Berechnen Sie für beide Temperaturbereiche die freie Energie $F$, die innere Energie $E$ und die Wärmekapazität $C_V$ des Systems. Skizzieren Sie die Wärmekapazität.

e) Was ändert sich an obiger Rechnung, wenn es sich um ein Gas aus homonuklearen Molekülen, d. h. Moleküle aus zwei gleichen Atomen, handelt?

**Bitte denken Sie daran, sich für die Veranstaltung „Statistische Physik“ im QISPOS anzumelden!**