

1. Ein physikalisches System besitze nur zwei mögliche Mikrozustände mit den jeweiligen Energieniveaus ϵ_0 und $\epsilon_1 = \epsilon_0 + \Delta\epsilon$. Ein solches sogenanntes Zweiniveausystem wäre z.B. ein einzelnes magnetisches Moment in einem Magnetfeld. Das System soll sich nun in einem Wärmebad befinden, d.h. es unterliegt dem kanonischen Ensemble. Gemäß Vorlesung lautet in diesem Ensemble die Wahrscheinlichkeit p_i des i -ten Mikrozustandes

$$p_i = \frac{e^{-\beta\epsilon_i}}{\sum_i e^{-\beta\epsilon_i}},$$

wobei der Lagrange-Parameter β physikalisch als $\beta = 1/(k_B T)$ interpretiert wird. Hier bedeuten k_B die Boltzmann-Konstante und T die Temperatur des Wärmebads.

- (a) Wie lauten die Wahrscheinlichkeiten p_0 und p_1 sowie die mittlere Energie $\langle\epsilon\rangle$ für das kanonische Ensemble? Berechnen Sie die Wärmekapazität $C = \partial\langle\epsilon\rangle/\partial T$.
- (b) Diskutieren Sie für alle oben berechnete Größen die Grenzfälle $k_B T \ll \Delta\epsilon$ und $k_B T \gg \Delta\epsilon$.
2. Das in Aufgabe 2 des 6. Übungsblattes betrachtete System aus zwei wechselwirkungsfreien, räumlich fixierten (d.h. unterscheidbaren) Spin-1/2-Teilchen soll sich in einem äußeren Magnetfeld B befinden. Diese Situation wird durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{2\mu_B B}{\hbar}(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) \quad \text{mit } \mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \quad (\text{Bohr'sches Magneton})$$

beschrieben.

- (a) Überzeugen Sie sich, dass die Basiszustände $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$ (vgl. Aufgabe 2 des 6. Übungsblattes) Eigenzustände von $\hat{H}$ sind. Finden Sie die zugehörigen Eigenwerte der Gesamtenergie $E_{\uparrow\uparrow}$, $E_{\downarrow\uparrow}$, $E_{\uparrow\downarrow}$ und $E_{\downarrow\downarrow}$.
- (b) Formulieren Sie die Dichtematrix $\hat{\rho}_{\text{mikrokan.}}$ für ein *mikrokanonisches* Ensemble zur niedrigsten möglichen Gesamtenergie (Grundzustand).
- (c) Formulieren Sie die Dichtematrix $\hat{\rho}_{\text{mikrokan.}}$ für ein *mikrokanonisches* Ensemble zur Gesamtenergie $E = 0$.
- (d) Formulieren Sie die Dichtematrix $\hat{\rho}_{\text{kanonisch}}$ für das *kanonische* Ensemble mit einem gegebenen Parameter $\beta = 1/(k_B T)$.
- (e) Diskutieren Sie das Verhalten der kanonischen Verteilung für die Grenzfälle sehr hoher und sehr niedriger Temperaturen, $\beta \rightarrow 0$ bzw. $\beta \rightarrow \infty$. Für welchen Grenzfall von β geht das kanonische Ensemble in eines der mikrokanonischen Ensembles aus (b) oder (c) über?

3. Ein starrer Körper, welcher sich um eine feste Achse dreht, soll quantenmechanisch beschrieben werden. In Analogie zur Translationsbewegung kann der Hamilton-Operator in der Form

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\Theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad (\varphi - \text{Drehwinkel}, \Theta - \text{Trägheitsmoment})$$

geschrieben werden. Die zugehörigen Eigenwerte lauten $E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2\Theta}$ mit $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Der starre Körper befinde sich im Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T , d.h. die Eigenzustände E_n unterliegen dem kanonischen Ensemble mit dem Parameter $\beta = 1/(k_B T)$.

- (a) Zeigen Sie, dass die quantenmechanische Zustandssumme $Z = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\beta E_n}$ der kanonischen Verteilung für *hohe* Temperaturen näherungsweise den Wert

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\beta E_n} \approx \sqrt{\frac{2\pi\Theta}{\beta\hbar^2}}$$

annimmt, indem Sie die Summe durch ein Integral annähern. Zeigen Sie ferner, dass diese Vorgehensweise nur für $T \gg \frac{\hbar^2}{k_B \Theta}$ erlaubt ist.

- (b) Zeigen Sie, dass für ein kanonisches Ensemble die quantenmechanische Zustandssumme Z mit der mittleren Energie $\langle E \rangle$ folgendermaßen zusammenhängt,

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z.$$

- (c) Bestimmen Sie aus dem Resultat für Z von (a) und aus dem Zusammenhang in (b) die mittlere Energie $\langle E \rangle$ und die Wärmekapazität $C = \partial \langle E \rangle / \partial T$ im Grenzfall hoher Temperaturen.
- (d) Diskutieren Sie Z , $\langle E \rangle$, C im Fall *tiefer* Temperaturen, indem Sie in Z nur die beiden größten Summanden berücksichtigen.
- (e) Skizzieren Sie den Verlauf von $C(T)$. Für welche T ist die Rotation eingefroren?