Universität Würzburg
Wintersemester 2024/25

Prof. Dr. Giorgio Sangiovanni
Linus Aliani, Alexander Baum,
Max Fischer, Jonathan Karl, Niklas Witt

8. Übung Statistische Mechanik und Thermodynamik

Bitte laden Sie Ihre Lösungen bis Donnerstag, den 12.12.2024 um 16:00 Uhr auf WueCampus hoch.
Die Blätter dürfen Sie dabei in Zweiergruppen abgeben.

Aufgabe 1 *Beispiele für matrizenwertige Funktionen* **4 P.**

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbb{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \mathbb{C} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathbb{D} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

a) Berechnen Sie die Funktionen: *2 P.*

$$e^{\mathbb{A}},\ e^{\mathbb{B}},\ e^{\mathbb{C}},\ e^{\mathbb{D}},\ \sin(\mathbb{A}),\ \cos(\mathbb{C}),\ \cosh(\mathbb{D})$$

b) Gilt: $e^{\mathbb{A}}e^{\mathbb{B}} = e^{\mathbb{A}+\mathbb{B}}$? *1 P.*

c) Kann man den Logarithmus einer Matrix angeben? *1 P.*

Aufgabe 2 *Modell eines einfachen Paramagneten* **6 P.**

Gegeben sind N identische, nicht-wechselwirkende Teilchen mit Spin $1/2$, auf welche das externe Magnetfeld $B = (0, 0, B_z)$ einwirkt. Jedes Teilchen hat dann die zwei möglichen Spin-Zustände Up oder Down mit einem Spin, der entweder parallel oder antiparallel zum Magnetfeld B liegt.:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} g\mu_{\mathrm{B}} \vec{B} \cdot \hat{\vec{S}}_i \tag{2}$$

a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme des Systems *2 P.*
Hinweis: Um die richtige Spur zur Berechnung der Zustandssume zu bilden, sollten Sie sich zuerst überlegen, welches die Basiszustände des Systems sind.

b) Berechnen Sie freie (F) und innere (U) Energie des Systems. *2 P.*

c) Berechnen Sie die durchschnittliche Magnetisierung $\langle M \rangle$ und die magnetische Suszeptibilität χ_M des Systems. Diese sind durch *1 P.*

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln(Z)}{\partial B}, \quad \chi_M = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \tag{3}$$

gegeben.

d) Betrachten Sie die Magnetisierung des Systems in den Grenzfällen: $\beta B \ll 1$ und $\beta B \gg 1$. *1 P.*

Aufgabe 3 *Beispiel für die Anwendung der Dichtematrix* **5 P.**

Betrachtet wird ein Quantensystem mit dem Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \epsilon \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \tag{4}$$

a) Lösen Sie die Schrödingergleichung als Eigenwertproblem und zeigen Sie, dass die Eigenwerte $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$ und dazugehörigen Eigenzustände $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle\}$ wie folgt lauten: *1 P.*

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_1 = 3\epsilon, \qquad \lambda_2 = \epsilon, \qquad \lambda_3 = 3\epsilon$$

b) Zeigen Sie, dasss die Dichtematrix $\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$ dieses Quantensystems in der Energiebasis $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle\}$ und mit $k_B = 1$ und $\beta = \frac{2}{\epsilon}$ gegeben ist durch: *2 P.*

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\epsilon^4 + 2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon^4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{5}$$

Hinweis: Nutzen Sie die Schrödingergleichung für die Eigenzustände, um die Dichtematrix durch die Energiezustände auszudrücken.

c) Benutzen Sie die Dichtematrix, um den Energieerwartungswert des Systems zu berechnen. *1 P.*

d) Berechnen Sie die Wahscheinlichkeit, mit der eine Messung den Wert 3ϵ für die Energie des Systems liefert. *1 P.*