INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. U. Motschmann
Dipl.-Phys. S. Simon

Thermodynamik und Statistische Mechanik — WS 2004/2005

21. Übungsblatt — Abgabe: Donnerstag, 17.02.05 (bis 11.25 Uhr)

Fragen zu den Übungsaufgaben: S. Simon, Raum A317, Tel. 391-5187, sven.simon@tu-bs.de

71. **Harmonischer Oszillator** **(Zusatzaufgabe; + 15 Punkte)**

Gegeben sei der Hamilton-Operator eines harmonischen Oszillators:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\left(P^2 + Q^2\right) \quad ,$$

wobei P und Q den Impuls- bzw. Ortsoperator bezeichnen ($m = \omega = 1$).

(a) Berechnen Sie den Mittelwert und die Varianz des Impulses als Funktion der Temperatur und vergleichen Sie das Ergebnis mit den entsprechenden Größen für die kanonische Gesamtheit eines klassischen harmonischen Oszillators mit der Hamilton-Funktion $H(p,q) = \frac{1}{2}\left(p^2 + q^2\right)$.

(b) Zeigen Sie: Die Dichtefunktion ρ_Q des Ortes in der kanonischen Gesamtheit, d.h.

$$\int \mathrm{d}x\, \rho_Q(x) f(x) = < f(Q) > \quad ,$$

ist eine Gauß-Funktion. Gehen Sie dabei wie folgt vor:

- Berechnen Sie $< f(Q) >$ für die Funktion $f(x) = \exp\left(2xy - y^2\right)$.
- Benutzen Sie dann die Eigenfunktionen von $\mathcal{H}$, welche durch

$$\phi_n(x) = \nu_n H_n(x) \exp\left(-x^2/2\right)$$

mit den Hermite-Polynomen $H_n(x)$ gegeben sind. In Formelsammlungen finden Sie:

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}x\, \exp\left(-(x-y)^2\right) H_n(x)^2 &= 2^n \sqrt{\pi} n!\, L_n\left(-2y^2\right) \quad ; \\ \sum_n z^n L_n(x) &= \frac{1}{1-z} \exp\left(\frac{xz}{z-1}\right) \quad . \end{aligned}$$

Mit L_n werden die Laguerre-Polynome bezeichnet, $L_n \equiv L_n^0$.
- Vergleichen Sie schließlich den Ausdruck, den Sie auf diese Weise erhalten, mit dem Integral

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int \mathrm{d}x\, \exp\left(\frac{-x^2}{2\sigma^2}\right) f(x) \quad .$$

Rückseite beachten! ⟶

72. **Ising-Streifen** **(Zusatzaufgabe; + 15 Punkte)**

Betrachten Sie zwei eindimensionale, ferromagnetische, geschlossene Ising-Ketten der Länge N, die parallel zueinander angeordnet sind. Die Wechselwirkungsenergie zwischen zwei benachbarten Spins der ersten und der zweiten Kette sei $-J$ für parallele und $+J$ für antiparallele Ausrichtung. Die Hamilton-Funktion ist damit

$$H\left(\underline{S}_1, \ldots, \underline{S}_N\right) = -\sum_{j=1}^{N} \left(S_{j,1}S_{j+1,1} + S_{j,2}S_{j+1,2}\right) - J\sum_{j=1}^{N} S_{j,1}S_{j,2} \quad ,$$

wobei $\underline{S}_j = (S_{j,1}, S_{j,2}) \in \{-1,+1\}^2$ die j-ten Spins der ersten und zweiten Kette bezeichnet und $\underline{S}_{N+1} = \underline{S}_1$ zu setzen ist. Betrachten Sie nun eine kanonische Gesamtheit und bestimmen Sie die Freie Energie pro Teilchen im thermodynamischen Limes $N \to \infty$. Plotten Sie das Ergebnis als Funktion von T und J.
Anleitung: Benutzen Sie die Transfermatrix-Methode. Machen Sie sich klar, daß im Grenzfall $N \to \infty$ ausschließlich der größte Eigenwert der Transfermatrix von Interesse ist.