Blatt №12

Dr. Vladislav Borisov <borisov@itp.uni-frankfurt.de>

Aufgabe 35 (*Koordinatenverteilung eines harmonischen Oszillators*) (10 Pkte.)

Wir betrachten einen harmonischen Oszillator in einer Dimension mit dem Hamilton Operator $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}$. Aus der Quantenmechanik wissen wir bereits, dass dieses System Energieniveaus $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ hat, die nicht entartet sind. Jede Eigenfunktion $\Psi_n(x)$ in Ortsdarstellung entspricht (bei $T = 0$) einer gewissen Wahrscheinlichkeitsverteilung der x-Koordinate. Bei endlicher Temperatur $T > 0$ kann sich der Oszillator in unterschiedlichen Quantenzuständen $\Psi_n(x)$ befinden. Die Wahrscheinlichkeiten dafür $p_n \sim e^{-\beta E_n}$ leiten sich aus dem kanonischen Ensemble her.

a) Schreiben Sie die Ortsdarstellung der Dichtematrix, die diesem gemischten Zustand entspricht. Drücken Sie das Ergebnis durch die Eigenenergien E_n und Eigenfunktionen $\Psi_n(x)$ des harmonischen Oszillators. *(1 Pkt.)*

Die diagonalen Elemente dieser Matrix ($x = x'$) beschreiben die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x)$ eines bestimmten x-Wertes. Um den expliziten Ausdruck für diese Funktion zu finden, verwenden wir einen Trick.

b) Werten Sie zuerst die x-Ableitung von $\rho(x)$ aus und zeigen Sie, dass sich das Ergebnis in folgender Form schreiben lässt: *(3 Pkte.)*

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}x} = \alpha\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\left(e^{-\beta\hbar\omega} - 1\right)\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}\sqrt{n+1}\,\Psi_n(x)\Psi_{n+1}(x), \tag{1}$$

wobei α eine Normierungskonstante ist.

c) Zeigen Sie jetzt, dass der Ausdruck für $\rho(x)x$ eine ähnliche Form hat: *(2 Pkte.)*

$$\rho(x)x = \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(e^{-\beta\hbar\omega} + 1\right)\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}\sqrt{n+1}\,\Psi_n(x)\Psi_{n+1}(x) \tag{2}$$

Hinweis: in ***b)*** *und* ***c)*** *verwenden Sie die Ortsdarstellung des Impulsoperators* $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ *und die Definition der Absteige- ($\hat{a}$) und Aufsteigeoperatoren ($\hat{a}^+$):*

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+), \quad \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^+)$$

d) Vergleichen Sie beide Ergebnisse (1) und (2) und stellen Sie eine Gleichung zur Bestimmung der Verteilung $\rho(x)$ auf. Mithilfe dieser Gleichung finden Sie den expliziten Ausdruck für $\rho(x)$. Normieren Sie anschließend diese Funktion auf dem ganzen Bereich $x \in (-\infty, \infty)$. *(2 Pkte.)*

e) Berechnen Sie die Grenzwerte von $\rho(x)$ für sehr hohe ($k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega$) und sehr tiefe ($k_\mathrm{B}T \ll \hbar\omega$) Temperaturen. Interpretieren Sie beide Ergebnisse. *(2 Pkte.)*

Aufgabe 36 (*Elektronengas in zwei Dimensionen*) (6 Pkte.)

Ein Quantengas freier nichtwechselwirkender Elektronen mit Spin $S = 1/2$ befinde sich in einem zweidimensionalen quadratischen Kasten mit der Seitenlänge L. Für die elektronische Wellenfunktion werden periodische Randbedingungen $\Psi(x+L, y) = \Psi(x, y)$ und $\Psi(x, y + L) = \Psi(x, y)$ angenommen.

a) Berechnen Sie die Zustandsdichte $D(E) = \Omega(E)/A$, wo $A = L^2$ die Gesamtfläche des Kastens ist. *(2 Pkte.)*

b) Wie skaliert die Fermienergie ϵ_F mit der Elektronendichte $n = N/L^2$ bei $T = 0$? *(1 Pkt.)*

c) Zeigen Sie, dass die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials durch $\mu(T) = \epsilon_\mathrm{F} + k_\mathrm{B}T \ln\left[1 - \exp\left(-\epsilon_\mathrm{F}/k_\mathrm{B}T\right)\right]$ gegeben ist. Skizzieren Sie den Temperaturverlauf von μ und interpretieren Sie das Ergebnis für $\mu(T)$ bei tiefen ($k_\mathrm{B}T \ll \epsilon_F$) und hohen ($k_\mathrm{B}T \gg \epsilon_F$) Temperaturen. *(3 Pkte.)*

Hinweis: verwenden Sie den Ausdruck für die Teilchenzahl:

$$N = L^2 \int_0^\infty \mathrm{d}E\, n(E) D(E),$$

wo $n(E)$ die Fermi-Dirac-Funktion ist.

Aufgabe 37 (*Dichtematrix eines harmonischen Oszillators*) (4 Pkte.)

Die Eigenwertgleichung eines harmonischen Oszillators $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ hat Eigenfunktionen $|n\rangle$ mit Energien $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$. Die Ortsdarstellung der ersten zwei Wellenfunktionen $|n\rangle$ hat folgende Form:

$$\Psi_0(x) = \langle x|0\rangle = \sqrt[1/4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

$$\Psi_1(x) = \langle x|1\rangle = \sqrt[1/4]{\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3}}\, x \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

a) Berechnen Sie die Dichtematrix $\hat{\rho}$ für den Fall, dass sich der Oszillator im Zustand $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ befindet. Schreiben Sie die Dichtematrix sowohl in der Basis der Energiezustände $|n\rangle$ als auch in der Ortsdarstellung: $\rho(x, x') = \langle x|\hat{\rho}|x'\rangle$. *(2 Pkte.)*

b) Schreiben Sie die Dichtematrix für ein Ensemble, bei dem die Hälfte aller Oszillatoren im Zustand $|0\rangle$ und der Rest im Zustand $|1\rangle$ ist. Verifizieren Sie, dass die Ortsdarstellung von $\hat{\rho}$ für diesen gemischten Zustand anders aussieht als die Dichtematrix für den reinen Zustand aus **a)**, obwohl die Wahrscheinlichkeiten die Zustände $|0\rangle$ und $|1\rangle$ zu messen in beiden Fällen **a)** und **b)** gleich sind ($p_0 = 1/2$, $p_1 = 1/2$). *(2 Pkte.)*