6. Tutorium VU Statistische Physik I, 01.06.2018

1. **Vibrationen im Wasserstoffmolekül**

   Betrachten Sie eine Gas aus Wasserstoffmolekülen bei der Temperatur $T = 300$ K. Bei niedrigen Anregungsenergien kann die Bindung der beiden Wasserstoffatome im Wasserstoffmolekül durch ein harmonisches Potential $V(R) = \alpha(R - R_0)^2$ approximiert werden, wobei $R_0 = 0.074$ nm den Gleichgewichtsabstand bezeichnet und α die Stärke der Bindung beschreibt. Experimentell findet man eine Schwingungsfrequenz von $f = 130$ THz.

   a) Berechnen Sie die mittlere kinetische Energie pro Teilchen sowie die mittlere Schwingungsenergie pro Teilchen.

   b) Laut Quantenmechanik können die Schwingungszustände des Wasserstoffmoleküls nur diskrete Energien $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ annehmen. Die Wahrscheinlichkeit $w(E_n)$ den Schwingungszustand mit Energie E_n zu finden ist $w(E_n) \propto \exp(-\beta E_n)$. Berechnen Sie die mittlere Schwingungsenergie pro Teilchen erneut mithilfe der Quantenmechanik.

2. **Vagabundierender Planet im interstellaren Gas**

   Zwischen den Sternen einer Galaxie befindet sich interstellares Gas. Nehmen Sie an, dass es sich dabei um ideales Gas aus Wasserstoffatomen mit Masse m_p und Temperatur T handelt.

   a) Bestimmen Sie die kanonische Zustandssumme eines Teilchens Z_1 im leeren Raumvolumen V.

   b) Zeigen Sie, dass mit der Fugazität z die großkanonische Zustandssumme allgemein geschrieben werden kann als $Z_{\mathrm{GK}} = e^{zZ_1}$. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit N Teilchen im Raumvolumen V zu finden, sowie die mittlere Teilchenanzahl $\langle N \rangle$ in Abhängigkeit von Z_1 und z.

   c) Die Anwesenheit eines vagabundierenden Planeten im Raumvolumen V werde durch das einfache Gravitationspotential

   $$\phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} -\phi_p & \mathbf{r} \in V_p \\ 0 & \mathbf{r} \notin V_p \end{cases}$$

   beschrieben, wobei das Volumen $V_p \in V$ den Einflussbereich des Planeten beschreibt und ϕ_p eine Konstante ist. Berechnen Sie das Verhältnis $\langle N \rangle' / \langle N \rangle$ zwischen mittlere Teilchenanzahl im Raumvolumen V mit Planeten $\langle N \rangle'$ und ohne Planeten $\langle N \rangle$.

3. **Absorptionsstellen in Graphen**

   Die Elektronen in Graphen haben aufgrund der speziellen Bandstruktur eine lineare Energie-Impuls-Beziehung $E = v_\mathrm{F}|\mathbf{p}|$ und können daher als pseudo-relativistisches **zweidimensionales** Gas beschrieben werden, wobei die Fermi-Geschwindigkeit $v_\mathrm{F} \approx 10^6$ m/s an die Stelle der Lichtgeschwindigkeit tritt. Machen Sie die Annahme, dass es sich bei den Elektronen um klassische Teilchen handelt.

   a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme Z_1 eines Teilchens, das sich in der Fläche A bewegt, sowie die Fugazität z als Funktion der Temperatur T und der mittleren Teilchendichte $n = \langle N \rangle / A$.

   b) Innerhalb der Graphenflocke sei eine Absorptionsstelle an die sich ein Elektron mit Absorptionsenergie e_0 binden kann. Berechnen Sie die Besetzungswahrscheinlichkeit der Absorptionsstelle als Funktion der Temperatur T und der mittleren Teilchendichte n.
   Hinweis: Die Absorptionsstelle und das Elektronengas befinden sich im Gleichgewicht. Daher stimmt das chemische Potential und die Temperatur in beiden Systemen überein.

4. **Vorbereitung auf die Quantenstatistik**

   Gegeben sei die Dichtematrix

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 - a \\ 1/2 - a & 1/2 \end{pmatrix}$$

   eines Dipols in der Basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Der Dipole kann im Magnetfeld B nur die beiden diskreten Werte $\{+\mu, -\mu\}$ annehmen.

   a) Schreiben Sie die Matrix des Hamiltonoperators $\hat{H}$ in der $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ Basis an und berechnen Sie die Spur der Matrix $e^{-\beta H}$. Für welche Werte von a kommutieren H und ρ.

   b) Berechnen Sie den Erwartungswert der Energie $\langle E \rangle = \mathrm{Spur}\big(H\rho\big)$, sowie die Entropie $S = -k_B \mathrm{Spur}\big(\rho \ln \rho\big)$. Für welchen Wert von a wird die Entropie maximal? Zeigen Sie, dass es sich dabei um einen gemischten Zustand handelt.

Zu kreuzen (online im **TUWEL**-Kurs zur LVA): 1/2/3a/3b/4