Institut für Theoretische Physik
TU Dresden

Prof. Dr. M. Vojta
PD Dr. M. Garst

Thermodynamik und Statistische Physik — Übung 13

Wintersemester 2018/19

Link: https://tu-dresden.de/mn/physik/itp/tfp/studium/lehre/ws18/tds

1. Bogoliubovsches Variationsverfahren (15 Punkte)

Wir betrachten einen anharmonischen Oszillator, der durch den folgenden Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 + \frac{\gamma m^2 \omega_0^3}{\hbar}x^4 \tag{1}$$

beschrieben wird.

a) Als Vergleichshamiltonoperator $\hat{H}_t$ benutzen wir einen harmonischen Oszillator

$$\hat{H}_t = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\lambda^2\omega_0^2 x^2, \tag{2}$$

mit dem dimensionslosen Variationsparameter λ. Schreiben Sie zunächst $\hat{H}_t$ mit Hilfe von Leiteroperatoren auf. Berechnen Sie zu diesem Operator die freie Energie F_t, die mittlere Besetzungszahl $\langle n\rangle_t$ und zeigen Sie, dass sich sowohl F_t als auch das zweite Moment der Besetzungszahl $\langle n^2\rangle_t$ durch die mittlere Besetzungszahl $\langle n\rangle_t$ ausdrücken lässt.

b) Drücken Sie $\hat{H}$ durch Leiteroperatoren aus.

c) Berechnen Sie den Erwartungswert von $\langle H - H_t\rangle_t$ bezüglich des Dichteoperators des Vergleichssystems $\hat{\rho}_t$.

d) Benutzen Sie die Resultate von **a)**, um $\tilde{F}(\lambda) = F_t + \langle H - H_t\rangle_t$ in die Form $\tilde{F}\big(\lambda, \langle n\rangle_t(\lambda)\big)$ zu bringen, und finden Sie damit die Bestimmungsgleichung für den minimierenden Variationsparameter λ. *Hinweis:* Die resultierende Gleichung ist transzendent und kann nur numerisch gelöst werden.

e) Skizzieren Sie das Verhalten der optimalen λ und $\tilde{F}(\lambda)$ als Funktion von γ.

2. Virialkoeffizient des Mie-Potentials (10 Punkte)

Wir betrachten ein einatomiges Gas und nehmen an, dass die Wechselwirkung zwischen den Atomen durch ein sogenanntes Mie-Potential beschrieben werden kann,

$$U(r) = U_0\left(\frac{x}{y-x}\left(\frac{r_M}{r}\right)^y - \frac{y}{y-x}\left(\frac{r_M}{r}\right)^x\right), \tag{3}$$

wobei U_0 eine Potentialkonstante, r_M eine charakteristische Länge und x und y mit $y > x > 3$ positive reelle Zahlen sind.

a) Edelgase werden in recht guter Näherung durch den Spezialfall $x = 6$ und $y = 12$ (Lennard-Jones-Potential) beschrieben. Skizzieren Sie das Potential in der Form $\frac{U(r)}{U_0} = f(\frac{r}{r_M})$ und machen Sie sich die Bedeutung von r_M klar. Wie sieht das Mie-Potential (3) im Limes $y \to \infty$ aus?

b) Berechnen Sie den Virialkoeffizienten $B(T)$ für das Potential (3) bis zur ersten Ordnung in $\frac{U_0}{k_B T}$. Bestimmen Sie damit die Parameter a und b in der van-der-Waals-Gleichung.