Aufgabenblatt 8

8.1 Least-Square-Fit (Hausaufgabe + Email an die Tutoren, Einsendeschluss Mitternacht vor der Übung)

In der Physik sind oft experimentelle Daten gegeben, an die eine Theorie angepasst werden muss. Die funktionale Form der Theorie sei dabei bekannt, lediglich die Werte einiger Parameter seien unbekannt. Bestimmen Sie diese Parameter mit einem von Ihnen geschriebenen Programm in einer Programmiersprache Ihrer Wahl.

1. In Theoretischer Physik III werden Sie die Zustandssumme für einen eindimensionalen quantenmechanischen harmonischen Oszillator im kanonischen Ensemble (also in Kontakt mit einem Wärmebad) kennen lernen. Sie können diese aber auch schon in früheren Semestern berechnen:

$$Z(T,\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left\{-\beta E_n\right\} \ , \quad \text{mit } E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \ . \tag{1}$$

   Diese Summe können Sie seit dem ersten Semester analytisch berechnen. Wie lautet das Ergebnis?

   $\beta = 1/(k_B T)$, wobei k_B die Boltzmann-Konstante ist.

2. Aus der Zustandssumme können Sie die Innere Energie sowie die Wärmekapazität durch Ableitung gewinnen:

$$U(T,\omega) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(Z(T,\omega)\right) \ , \quad C(T,\omega) = -\frac{\partial}{\partial T}U(T,\omega) \ . \tag{2}$$

   Überprüfen Sie, ob Ihr Ergebnis mit

$$C(T,\omega) = k_B\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)^2 \sinh^{-2}\left[\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right] \tag{3}$$

   übereinstimmt.

3. Wir betrachten jetzt ein fiktives zweidimensionales Material, dessen Atome in der Ebene wie unabhängige zweidimensionale Oszillatoren schwingen können. Für ihre Wärmekapazität gilt:

$$C(T,\omega_1,\omega_2) = C(T,\omega_1) + C(T,\omega_2) \ . \tag{4}$$

   Bestimmen Sie die beiden unbekannten Kreisfrequenzen, indem Sie den minimalen Abstand zwischen der theoretischen Funktion (4) und den gegebenen experimentellen Daten bestimmen. Ihre experimentelle Kollegin hat dankenswerterweise die Wärmekapazität gleich in Vielfachen von k_B angegeben. Sie können sich zusätzlich das Leben etwas leichter machen, indem Sie $\hbar$ und k_B aus der Rechnung heraushalten, indem Sie die Kreisfrequenzen geschickt umdefinieren. **Zusatz: Hessematrix**

8.2 Ritzverfahren (Hausaufgabe + Bearbeiten in den Übungen)

In Quantenmechanik lernen Sie hauptsächlich die Systeme kennen, bei denen man die Energieeigenwerte sowie die Eigenzustände analytisch bestimmen kann. Für realistische Systeme ist dies oft nicht mehr der Fall. Hier ist es nicht unüblich, Approximationen z.B. der Grundzustandswellenfunktion einfach zu raten. Diesen gibt man über Parameter noch eine gewisse Freiheit mit und bestimmt dann den approximativen Eigenzustand durch Energieminimierung bezüglich dieser Parameter.
Zur Lösung dieser Aufgabe können Sie gern Mathematica verwenden.

1. Wiederholen Sie oder erarbeiten Sie sich, was das Ritz-Verfahren beinhaltet.

2. Der erste zu untersuchende Hamiltonoperator habe in Ortsdarstellung die folgende Gestalt:

$$\underset{\sim}{H} = -\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{r} \;, \tag{5}$$

   wobei $r = |\vec{x}|$ Erkennen Sie diesen Hamiltonoperator wieder?

   Berechnen Sie jetzt den Energieerwartungswert für die folgende Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \langle\, \vec{x} \,|\, \phi(a,b)\,\rangle = \phi(\vec{x},a,b) &= \frac{1}{\sqrt{\langle\, \phi_0(a,b) \,|\, \phi_0(a,b)\,\rangle}}\phi_0(\vec{x},a,b) \\ \langle\, \vec{x} \,|\, \phi_0(a,b)\,\rangle = \phi_0(\vec{x},a,b) &= \mathrm{e}^{-ar-br^2} \;. \end{aligned} \tag{6}$$

   Der Energieerwartungswert

$$E(a,b) = \langle\, \phi(a,b) \,|\, \underset{\sim}{H} \,|\, \phi(a,b)\,\rangle = 4\pi\int_0^\infty r^2 \mathrm{d}r \phi(\vec{x},a,b)\underset{\sim}{H}\phi(\vec{x},a,b) \;. \tag{7}$$

   hängt von den beiden Parametern a und b ab. Berechnen Sie diesen formelmäßig mit Mathematica.

3. Programmieren Sie jetzt (in Ihrem Mathematica-Notebook) ein kleines Gradientenverfahren, um das Minimum (evtl. die Minima) von $E(a,b)$ zu finden. Verwenden Sie nicht die Mathematica-Funktion. Vielleicht ahnen Sie die Lösung schon (weil Sie diese kennen). Welches numerische Problem tritt hier auf?

4. Ersetzen Sie jetzt in (5) das Potential durch

$$V(r) = -\frac{1}{r} + r \tag{8}$$

   und bestimmen Sie die approximative Grundzustandswellenfunktion wie gehabt mit dem Ansatz (6).