Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Übungen zur Theoretischen Physik Fb SS 18

Prof. Dr. A. Shnirman

PD Dr. B. Narozhny

Blatt 2

Lösungsvorschlag

---

1. Thermodynamik von Phononen:

(a) Bewegungsgleichungen:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{u}_n} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial u_n} \quad , \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{s}_n} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial s_n} \quad , \quad T = \frac{1}{2}m\sum_n [\,(\dot{u}_n)^2 + (\dot{s}_n)^2\,]$$

$$\Rightarrow \quad \begin{array}{rcl} m\ddot{u}_n &=& -K(u_n - s_n) - G(u_n - s_{n-1}) \\ m\ddot{s}_n &=& -K(s_n - u_n) - G(s_n - u_{n+1}) \end{array}$$

Ansatz:

$$\begin{array}{rcl} u_n(t) &=& u\, e^{i(kx-\omega t)} \\ s_n(t) &=& s\, e^{i(kx-\omega t)} \end{array} \quad , \quad x = n\,a$$

Periodische Randbedingungen:

$$u_{n+N} = u_n \quad \Rightarrow \quad e^{ikNa} = 1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{k = \frac{2\pi}{a}\frac{m}{N} \quad , \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots}$$

Eindeutigkeit der Lösung: Der Phasenfaktor e^{ikna} ist für zwei k , die sich um $G = \frac{2\pi}{a}l$ unterscheiden, gleich:

$$e^{ikna} = e^{i(k+G)na} \quad , \quad G = \frac{2\pi}{a}l \quad , \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Daher muß k eingeschränkt werden auf

$$k = \frac{2\pi}{a}\frac{m}{N} \quad , \quad m = 0, 1, 2, \ldots, (N-1)$$

oder alternativ:

$$m = (-N/2+1), (-N/2+2), \ldots, -1, 0, 1, \ldots, (N/2) \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}}$$

(b) Ansatz in Bewegungsgleichungen einsetzen:

$$\begin{array}{rcl} [\,m\omega^2 - (K+G)\,]u + [\,K + G\,e^{-ika}\,]s &=& 0 \\ [\,K + G\,e^{ika}\,]u + [\,m\omega^2 - (K+G)\,]s &=& 0 \end{array}$$

Nichttriviale Lösung für

$$[\,m\omega^2 - (K+G)\,]^2 - (K + Ge^{-ika})(K + Ge^{ika}) = 0$$

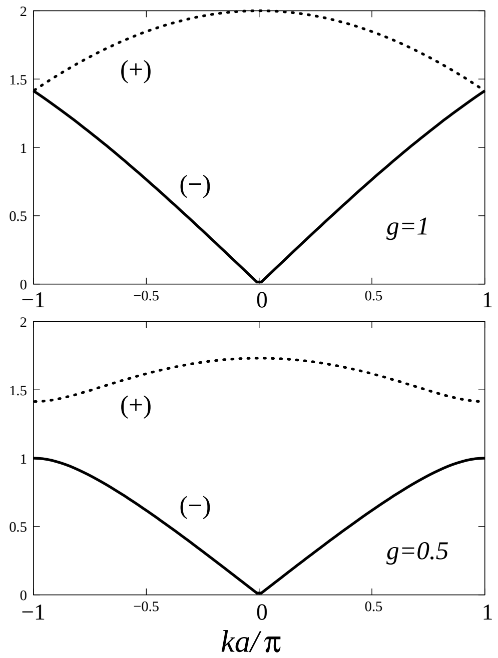

Abbildung 1: Die Dispersion von optischer (+) und akustischer (−) Mode für unterschiedliche Federn $G = 0.5\,K$ (unten) und identische Federn $G = K$ (oben). Für $K = G$ verschwindet die optische Mode bzw. geht in die zurückgefaltete akustische über.

$$\Rightarrow \quad \boxed{m\omega^2 = (K+G) \pm \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG\cos(ka)}}$$

Die zugehörigen Moden werden bestimmt durch die Lösung des Gleichungssystems:

$$\Rightarrow \quad \frac{s}{u} = \frac{-[\,K + Ge^{ika}\,]}{m\omega^2 - (K+G)} = \mp \frac{[\,K + Ge^{ika}\,]}{\sqrt{K^2 + G^2 + 2KG\cos(ka)}}$$

Interessant ist jetzt der Grenzfall $k \to 0$:

$$k \ll \pi/a \;: \quad \cos(ka) \simeq 1 - \frac{1}{2}(ka)^2$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad m\omega^2 &= (K+G) \pm \sqrt{(K+G)^2 - KG\,(ka)^2} \\ &= (K+G)\left[1 \pm \left(1 - \frac{KG}{2(K+G)^2}(ka)^2\right)\right] \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \omega_+ = \sqrt{\frac{2}{m}(K+G)} \;\;, \quad \omega_- = \sqrt{\frac{KG}{2(K+G)}}ka \equiv c\,k$$

und

$$\frac{s}{u} \simeq \mp \frac{(K+G)}{(K+G)(1 - \frac{KG}{2(K+G)^2}(ka)^2)} \simeq \mp 1$$

Für kleine k unterscheiden sich also deutlich die Moden:

$$ka \ll \pi \;: \quad \boxed{\begin{array}{lllll} (+) : & \omega_+ = const. & \dfrac{s}{u} = -1 & \text{gegenphasig (optisch)} \\ (-) : & \omega_- = c\,k & \dfrac{s}{u} = +1 & \text{gleichphasig (akustisch)} \end{array}}$$

Die Dispersion ist in Abb. 1 gezeigt, und zwar in der Form

$$\omega_\pm = \frac{K}{m}\left[(1+g) \pm \sqrt{1+g^2+2g\cos(ka)}\right]^{1/2} \quad , \quad g = \frac{G}{K} \ , \quad \frac{K}{m} \equiv 1$$

Anzahl der Moden: Die Anzahl der erlaubten k-Werte ist gerade N, also gibt es N optische und N akustische Moden. Die Gesamtzahl $2N$ der Moden entspricht der Anzahl der Massen in der Kette, denn jede Masse kann in einer Richtung (x-Richtung) um die Gleichgewichtslage schwingen, trägt also einen Freiheitsgrad bei.

(c) Our system is just a collection of harmonic oscillators. Every eigenstate of the complete system can be described by specifying the excitation level $n_{\lambda,k}$ of all the individual oscillators, i.e. by the number of phonons in each mode. The energy of the system is

$$E_{\{n_{\lambda,k}\}} = \sum_{\lambda=\pm}\sum_k \omega_\lambda(k) n_{\lambda,k}$$

and the partition function reads

$$Z = \sum_{n_{\lambda,k}} e^{-E_{\{n_{\lambda,k}\}}/T} = \prod_{\lambda=\pm}\prod_k \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\omega_{\lambda,k} n/T} = \prod_{\lambda=\pm}\prod_k \frac{1}{1-e^{-\omega_{\lambda,k}/T}}.$$

The free energy of the system (or the Ω-potential of the phonon gas) is given by

$$\Omega = TNa\sum_\lambda \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{2\pi} \ln\left[1-e^{-\omega_\lambda(k)/T}\right]$$

We compute now the free energy in each of the temperatures intervals.

At largest temperatures, $\omega_\lambda(k)/T \ll 1$ for all the modes. We can expand the expression under the integral and get

$$\Omega = TNa\sum_\lambda \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{2\pi} \ln\frac{\omega_\lambda(k)}{T}$$

The heat capacity is given by

$$C_V = -T\partial_T^2\Omega = Na\sum_\lambda \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{2\pi} = 2N$$

This is in full agreement with the equidistribution theorem.

At higher temperatures the optical phonons are are frozen away and

$$\Omega = TNa \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{2\pi} \ln\frac{\omega_-(k)}{T} \qquad \Rightarrow \qquad C_V = N$$

At the lowest temperatures we only the low-lying bosonic modes matter so that we can linearize the bosonic spectrum (optical phonons are fully out)

$$\omega_-(k) = c|k|, \qquad c = \sqrt{\frac{KG}{2(K+G)}}a.$$

Thus,

$$\Omega = 2TNa\int\limits_0^\infty \frac{dk}{2\pi}\ln\left[1-e^{-ck/T}\right] = -\frac{\pi N a T^2}{6c} \qquad \Rightarrow \qquad C_V \propto T.$$

(d) In D spacial spacial dimensions there are D acoustic modes. They all contribute to to the low temperature behavior of C_V. We have just like in the previous exercise

$$\Omega = T\sum_i \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D}\ln\left[1-e^{-c_i(\hat{k})|k|/T}\right] = T\sum_i \int\limits_0^\infty \frac{k^{D-1}dk}{(2\pi)^D}\int d\hat{n}\ln\left[1-e^{-c_i(\hat{k})|k|/T}\right] \propto T^{D+1}.$$

Correspondingly,

$$C_V \propto T^D.$$

2. Korrelatoren im 1D-Ising-Modell:

(a) Korrelator $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle$: Wir wiederholen kurz die in der Vorlesung diskutierte Transfermatrixmethode. Die Eigenwerte der Transfermatrix und die Zustandssumme wurden in der Vorlesung berechnet. Zunächst betrachten wir die Zustandssumme:

$$\begin{aligned}
Z = \operatorname{Tr} e^{-\mathcal{H}/T} &= \sum_{\{\sigma_l\}} e^{-\mathcal{H}[\{\sigma_l\}]/T}, \qquad\qquad g = \frac{J}{4T}, \qquad h = \frac{\gamma B}{2T} \\
&= \sum_{\sigma_1}^{\pm 1}\cdots\sum_{\sigma_N}^{\pm 1}\exp\left\{\frac{J}{4T}\sum_{i=1}^N \sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{\gamma B}{2T}\sum_{i=1}^N \sigma_i\right\} \\
&= \sum_{\sigma_1}^{\pm 1}\cdots\sum_{\sigma_N}^{\pm 1}\exp\left\{g\sum_{i=1}^N \sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{h}{2}\sum_{i=1}^N (\sigma_i+\sigma_{i+1})\right\} \\
&= \prod_{i=1}^N \sum_{\sigma_1}^{\pm 1}\cdots\sum_{\sigma_N}^{\pm 1}\exp\left\{g\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{h}{2}(\sigma_i+\sigma_{i+1})\right\}.
\end{aligned}$$

Die Summen über $\sigma_i = \pm 1$ können in Matrixform geschrieben werden, um das zu sehen sollte man einfach mal die Möglichkeiten z.B. für σ_i und σ_{i+1} durchprobieren. Wir führen also die Transfermatrix T ein und sehen, dass das Produkt wegen der periodischen Randbedingung gerade die Spur über die Matrizen bildet:

$$Z = \prod_{i=1}^N T_{i,i+1} = \operatorname{Tr} T^N, \qquad \text{mit} \qquad T = \begin{pmatrix} e^{g+h} & e^{-g} \\ e^{-g} & e^{g-h}\end{pmatrix}.$$

Wir können eine beliebige Basis wählen um die Zustandssumme auszurechnen. Hier bietet sich die Eigenbasis der Transfermatrix an. Aus $\det(T-\lambda) = 0$ finden wir nach Rechnung die Eigenwerte

$$\lambda_{1/2} = e^g\left(\cosh(h) \pm \sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4g}}\right),$$

die wir so wählen dass $\lambda_1 > \lambda_2$. Nach einem Basiswechsel in die Eigenbasis von T ist die Transfermatrix auf Diagonalform und die Zustandssumme

$$Z = \mathrm{Tr}\, T^N = \mathrm{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad \Rightarrow \quad Z = \lambda_1^N \quad \text{für} \quad N \to \infty.$$

Wir kommen zum gesuchten Korrelator. Dieser kann analog zur Zustandssumme durch Transfermatrizen ausgedrückt werden. Die zusätzlichen σ_i und σ_j wirken in der Matrixschreibweise wie Pauli-Matrizen σ^z, also

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{\mathrm{Tr}\,\{T_{1,2} \ldots T_{j-1,j} \sigma^z T_{j,j+1} \ldots T_{i-1,i} \sigma^z T_{i,i+1} \ldots T_{N-1,N} T_{N,1}\}}{Z}.$$

Diesen Erwartungswert können wir wieder in der Eigenbasis von T auswerten. Dazu müssen wir Faktoren der Art $\langle \alpha | \sigma^z | \alpha' \rangle$ berechnen, wobei $|\alpha\rangle, |\alpha'\rangle \in \{|1\rangle, |2\rangle\}$ mit normierten Eigenzustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ von T zu den Eigenwerten λ_1 und λ_2. Also

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\alpha,\alpha'}^{1,2} \lambda_\alpha^{j-1} \langle \alpha | \sigma^z | \alpha' \rangle \lambda_{\alpha'}^{i-j} \langle \alpha' | \sigma^z | \alpha \rangle \lambda_\alpha^{N+1-i} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\alpha,\alpha'}^{1,2} \lambda_\alpha^{j-i+N} \lambda_{\alpha'}^{i-j} \, \langle \alpha | \sigma^z | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \sigma^z | \alpha \rangle. \end{aligned}$$

Wir interessieren uns nur für die Abhängigkeit vom Abstand $(i-j)$ im thermodynamischen Limes $N \to \infty$ eines unendlich langen Rings, wobei der Abstand $(i-j)$ klein sein darf, $(i-j) \ll N$. In diesem Fall sind Terme mit $\alpha = 2$ mit

$$\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{j-i+N} \propto \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N$$

unterdrückt und deshalb im thermodynamischen Limes vernachlässigbar klein (beachte $Z = \lambda_1^N$). Es bleiben nur die zwei Terme mit $\alpha = 1$ übrig, also

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = (\langle 1 | \sigma^z | 1 \rangle)^2 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{i-j} |\langle 1 | \sigma^z | 2 \rangle|^2.$$

Um die beiden Faktoren $\langle \alpha | \sigma^z | \alpha' \rangle$ zu berechnen bestimmen wir die normierten Eigenvektoren $|1\rangle$ und $|2\rangle$ in der $\pm$-Basis aus den Gleichungen

$$T|\alpha\rangle = \lambda_\alpha |\alpha\rangle.$$

Wir finden

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1 + e^{2g}(\lambda_1 - e^{g-h})^2}} \begin{pmatrix} e^g(\lambda_1 - e^{g-h}) \\ 1 \end{pmatrix}, \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1 + e^{2g}(\lambda_2 - e^{g-h})^2}} \begin{pmatrix} e^g(\lambda_2 - e^{g-h}) \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und mit den expliziten Eigenwerten (siehe oben)

$$
\begin{aligned}
|\langle 1|\sigma^z|1\rangle|^2 &= \left(\frac{e^{2g}(\lambda_1 - e^{g-h})^2 - 1}{1 + e^{2g}(\lambda_1 - e^{g-h})^2}\right)^2 = \dots \\
&= \frac{\sinh^2(h)}{\sinh^2(h) + e^{-4g}} \\
|\langle 1|\sigma^z|2\rangle|^2 &= \left(\frac{e^{2g}(\lambda_1 - e^{g-h})(\lambda_2 - e^{g-h}) - 1}{\sqrt{1 + e^{2g}(\lambda_1 - e^{g-h})^2}\sqrt{1 + e^{2g}(\lambda_2 - e^{g-h})^2}}\right)^2 = \dots \\
&= \frac{e^{-4g}}{\sinh^2(h) + e^{-4g}}.
\end{aligned}
$$

Der Korrelator ist also

$$
\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{\sinh^2(h)}{\sinh^2(h) + e^{-4g}} + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{i-j} \frac{e^{-4g}}{\sinh^2(h) + e^{-4g}}.
$$

Für $(i-j) \to \infty$ bleibt nur der erste Term übrig. Der erste Term wird durch den endlichen Wert von $\langle 1|\sigma^z|1\rangle$ erzeugt, was nichts anderes ist als die Magnetisierung. Der Term verschwindet im Limes $h \to 0$, wie man es von der Magnetisierung erwarten würde. Für $g \to 0$ ist der erste Term gerade $\tanh^2 h$, was dem Quadrat der Magnetisierung unabhängiger Spins entspricht.

(b) Der Fall $B = 0$ bzw. $h = 0$: Die Eigenwerte sind dann

$$
\lambda_{1/2} = e^g \pm e^{-g}
$$

und die Eigenvektoren vereinfachen sich zu

$$
|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.
$$

Den 3er- und den 4er-Korrelator berechnen wir analog zu $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$, d.h. der 3er-Korrelator ist $(i > j > k)$

$$
\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left\{T_{1,2} \dots T_{k-1,k}\sigma^z T_{k,k+1} \dots T_{j-1,j}\sigma^z T_{j,j+1} \dots T_{i-1,i}\sigma^z T_{i,i+1} \dots T_{N-1,N}T_{N,1}\right\}}{Z},
$$

analog $\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \rangle$.

Im thermodynamischen Limes, $i, N-k \sim N$ bleibt nur ein Beitrag zum 3er-Korrelator, der im Fall von $h = 0$ verschwindet, wie man leicht mit den vereinfachten Eigenvektoren überprüfen kann:

$$
\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle = (\langle 1|\sigma^z|1\rangle)^3 = 0
$$

Wir wenden den thermodynamischen Limes auf den 4er-Korrelator $\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \rangle$ an und berücksichtigen $\langle 1|\sigma^z|1\rangle = 0$ (für $h = 0$, $i > j > k > l$):

$$
\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \rangle = \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{i-j} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{k-l} |\langle 1|\sigma^z|2\rangle|^4.
$$

Dieser Ausdruck hängt nur von den Abständen $(i-j)$ und $(k-l)$, aber nicht von $(j-k)$ usw. Der Vergleich mit dem 2er-Korrelator liefert deshalb den einfachen Zusammenhang

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \rangle = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \langle \sigma_k \sigma_l \rangle \ .$$

Diese Relation gilt auch für $h > 0$. Für $h = 0$ ist $|\langle 1|\sigma^z|2\rangle|^2 = 1$ und damit

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \rangle = \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{i-j} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{k-l} \ .$$

3. Suszeptibilität und Korrelatoren in Ising-Modellen:

Der Hamiltonoperator eines Ising-Modells in beliebigen Dimensionen (auch der Spin ist beliebig) hat die Form

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \gamma B \sum_i \hat{S}_i^z .$$

Die kanonische Zustandssumme ist $Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\mathcal{H}/T}$.

Wir betrachten zunächst die Magnetisierung:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial B} = T \frac{\partial}{\partial B} \ln Z = \frac{\gamma}{Z} \mathrm{Tr} \left\{ \sum_i \hat{S}_i^z e^{-\mathcal{H}/T} \right\} = \frac{\gamma}{Z} \sum_i \mathrm{Tr} \left\{ \hat{S}_i^z e^{-\mathcal{H}/T} \right\} = \gamma \sum_i \langle \hat{S}_i^z \rangle .$$

Dieser Ausdruck sollte bekannt sein und gilt völlig allgemein. Für die Suszeptibilität finden wir

$$\begin{aligned} \chi = \frac{\partial M}{\partial B} &= \frac{\gamma}{Z} \frac{\partial}{\partial B} \mathrm{Tr} \left\{ \sum_i \hat{S}_i^z e^{-\mathcal{H}/T} \right\} - \frac{\gamma}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial B} \right) \mathrm{Tr} \left\{ \sum_i \hat{S}_i^z e^{-\mathcal{H}/T} \right\} \\ &= \frac{\gamma^2}{TZ} \mathrm{Tr} \left\{ \sum_{i,j} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z e^{-\mathcal{H}/T} \right\} - \frac{\gamma^2}{TZ^2} \left(\mathrm{Tr} \left\{ \sum_i \hat{S}_i^z e^{-\mathcal{H}/T} \right\} \right)^2 . \end{aligned}$$

Das ist gerade das gesuchte Ergebnis

$$\chi = \frac{\gamma^2}{T} \left[\sum_{i,j} \langle \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \rangle - \left(\sum_i \langle \hat{S}_i^z \rangle \right)^2 \right] = \frac{1}{T} \left(\gamma^2 \sum_{i,j} \langle \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \rangle - M^2 \right) .$$