Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Übungen zur Theoretischen Physik Fa WS 17/18

Prof. Dr. A. Shnirman

PD Dr. B. Narozhny

Blatt 1

Lösungsvorschlag

---

1. Nichtwechselwirkende Spins:

(a) Wir wählen die z-Achse längs der Richtung des Feldes. Dann, die Energie des Systems ist

$$E[\{\sigma_a^z\}] = -\mu \sum_a \sigma_a^z H.$$

Jeder Spin hat zwei mögliche Zustände, $\sigma_a^z = 2s_a^Z = \pm 1$. Die Zahl von Spins mit $\sigma_a^z = \pm 1$ bezeichnen wir $n_\pm$. Dann

$$E[\{\sigma_a^z\}] = -\mu(n_+ - n_-)H.$$

(b) Da $n_+ + n_- = N$, die Zahl der Zustände, die die Energie E haben ist

$$\Gamma(E) = C_N^{n_+} = \frac{N! n_+!}{(N - n_+)!}.$$

(c) Die Entropie des Systems ist

$$S = \ln \Gamma(E).$$

Die Magnetisierung ist

$$\boldsymbol{M} = M\boldsymbol{e}_z, \quad M = \mu(n_+ - n_-) = \mu(2n_+ - N).$$

Deswegen

$$n_+ = (M + \mu N)/(2\mu).$$

Jetzt können wir die Entropie als eine Funktion von M bestimmen:

$$S(M) = \ln \frac{N! n_+!}{(N - n_+)!} = N \ln 2N - \frac{1}{2}(N + M/\mu) \ln(N + M/\mu) - \frac{1}{2}(N - M/\mu) \ln(N - M/\mu).$$

Die Entropie als eine Funktion der Energie findet man mithilfe des Zusammenhangs zwischen M und E:

$$E = -MH.$$

(d) Die Temperatur ist durch die folgende Ableitung definiert:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_H = -\frac{1}{H}\frac{\partial S}{\partial M}.$$

Jetzt leiten wir die Entropie ab. Das Ergebnis ist

$$T = 2\mu H \left[\ln \frac{N + M/\mu}{N - M/\mu}\right]^{-1}.$$

(e) Jetzt kombiniern wir der obigen Ergebnisse:

$$S = N \ln\left(2\cosh\frac{\mu H}{T}\right) - \frac{\mu H N}{T}\tanh\frac{\mu H}{T},$$

$$E = -\mu H N \tanh\frac{\mu H}{T},$$

und letztendlich

$$F = E - TS = -NT\ln\left(2\cosh\frac{\mu H}{T}\right).$$

2. Dichtematrix für den Spin-1/2:

(a) Wenn das System nur aus einem reinen Zustand besteht, dann gilt für die Dichtematrix

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}.$$

Für einen Spin-1/2

$$\hat{\rho}^2 = \frac{1}{4}\left(1 + \hat{\mathbf{P}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)\left(1 + \hat{\mathbf{P}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) = \frac{1}{4}\left(1 + |\mathbf{P}|^2 + 2\hat{\mathbf{P}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) = \hat{\rho} + \frac{1}{4}\left(|\mathbf{P}|^2 - 1\right).$$

Es folgt dass wenn der Spin in einem reinen Zustand ist, dann $|\mathbf{P}| = 1$.

Weiterhin, kann man die Dichtematrix eines reinen Zustandes durch die Wellenfunktion des gleichen Zustandes ausdrücken

$$\rho_{\sigma\sigma'} = \Psi_\sigma \Psi^*_{\sigma'}.$$

Die allgemeine Wellenfunktion des Spins-1/2 ist

$$\Psi = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ e^{i\phi}\sin\theta/2 \end{pmatrix}.$$

Es erfolgt

$$\begin{aligned}
\Psi\Psi^* &= \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ e^{i\phi}\sin\theta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta/2 & e^{-i\phi}\sin\theta/2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} & \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\cos\theta & \sin\theta(\cos\phi - i\sin\phi) \\ \sin\theta(\cos\phi + i\sin\phi) & 1-\cos\theta \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\left[1 + \cos\theta\;\hat{\sigma}_z + \sin\theta\cos\phi\;\hat{\sigma}_x + \sin\theta\sin\phi\;\hat{\sigma}_y\right] = \frac{1}{2}\left(1 + \hat{\mathbf{P}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right),
\end{aligned}$$

wobei

$$\mathbf{P} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta); \quad |\mathbf{P}| = 1.$$

(b) Laut definition

$$(\rho_1)_{\sigma\sigma'} = \mathrm{Tr}_2\hat{\rho} = \sum_{\sigma_2} \Psi_{S,S^z}(\sigma,\sigma_2)\Psi^*_{S,S^z}(\sigma',\sigma_2).$$

Hier $\Psi_{S,S^z}(\sigma,\sigma_2)$ ist die Wellenfunktion des Systems im Zustand $|S,S^z\rangle$, die in dem Basis ausdrücken wird, das aus Eigenvectoren von s_1^z und s_2^z besteht. Diese Wellenfunktionen sind

$$\Psi_{11} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2; \quad \Psi_{1,-1} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2;$$

$$\Psi_{1(0),0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 \pm \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right].$$

Nach der einfachen Matrizenmultiplikation bekommen wir

$$\hat{\rho}_1(S=1,S^z=1) = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(1+\hat{\sigma}_z\right), \tag{1}$$

$$\hat{\rho}_1(S=1,S^z=-1) = \begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(1-\hat{\sigma}_z\right), \tag{2}$$

$$\hat{\rho}_1(S=1(0),S^z=0) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}. \tag{3}$$

In den ersten zwei Zustände ($S=1$, $S^z=\pm1$) befindet sich das Teilchen 1 in einem reinen Zustand, weil es aus Gl. (1) und Gl. (2) folgt, dass $\mathbf{P}=(0,0,\pm1)$. Im Gegenteil, werden die Zustände mit $S^z=0$ sich durch $\mathbf{P}=0$ ausgezeichnet.

(c) Benutzen wir die Gleichungen (1), (2), und (3).
Es erfolgt für die Entropie

$$S[\hat{\rho}_1(S=1(0),S^z=0)] = \ln 2, \quad S[\hat{\rho}_1(S=1,S^z=\pm1)] = 0.$$

3. Maxwell-Verteilung:

Die Gesamtenergie

$$H[\{p_n\},\{x_n\}] = \sum_n \frac{p_n^2}{2m}.$$

Die 1-Teilchen-Verteilungsfunktion

$$\begin{aligned}\rho_1(x_1,p_1) &= C_0 \int \prod_{n=2}^{N} d^3p_n d^3x_n\, \delta\left(\sum_{n=1}^{N}\frac{p_n^2}{2m} - E\right)\\ &= C_0 V^{N-1}\int \prod_{n=2}^{N} d^3p_n\, \delta\left(\sum_{n=2}^{N}\frac{p_n^2}{2m} - \left[E-\frac{p_1^2}{2m}\right]\right)\end{aligned}$$

Es bezeichne

$$Q_0 = E - \frac{p_1^2}{2m}, \quad \tilde{p}_n = \frac{p_n}{\sqrt{Q_0}},$$

und dann finden wir

$$\rho_1(x_1,p_1) = C_0 V^{N-1} Q_0^{\frac{3(N-1)}{2}-1} \int \prod_{n=2}^{N} d^3\tilde{p}_n \; \delta\left(\sum_{n=2}^{N} \frac{\tilde{p}_n^2}{2m} - 1\right).$$

Letztendlich

$$\rho_1(x_1,p_1) = A\left(E - \frac{p_1^2}{2m}\right)^{\frac{3N-5}{2}}, \tag{4}$$

wobei A eine Normierungskonstante ist.

Die 1-Teilchen-Impulsverteilung ist dann

$$f(p_1) = A'\left(E - \frac{p_1^2}{2m}\right)^{\frac{3N-5}{2}}.$$

Benutzen wir jetzt die Energie pro Teilchen $\bar{\epsilon} = E/N$

$$f(p_1) = A''\left(1 - \frac{p_1^2}{2m\bar{\epsilon}N}\right)^{\frac{3N-5}{2}}.$$

Im Limes $N \gg 1$

$$f(p_1) \to B\left(1 - \frac{p_1^2}{2m\bar{\epsilon}N}\right)^{\frac{3N}{2}} \to B\exp\left(-\frac{3p_1^2}{4m\bar{\epsilon}}\right).$$

Das ist die Maxwell-Verteilung:

$$f(p) = B\exp\left(-\frac{p^2}{2mk_BT}\right), \tag{5}$$

wo wir die Relation $\bar{\epsilon} = 3k_\mathrm{B}T/2$ benutzt haben. Die Normierungskonstante ist

$$B = \left[\frac{3}{4\pi m\bar{\epsilon}}\right]^{3/2} = \frac{1}{[2\pi m k_B T]^{3/2}}.$$