

Moderne Theoretische Physik II (Quantenmechanik II und Statistik)

Institut für Theoretische Teilchenphysik

Prof. Dr. Matthias Steinhauser, Dr. Hantian Zhang, Manuel Egner **WS 23/24 – Blatt 12**

Abgabe: Fr., 02.02.2024, 11:30 Uhr; Besprechung: Di., 06.02.2024

1 Entropie eines Spinsystems

Betrachten Sie ein System von N Spin-1/2-Teilchen ohne Wechselwirkung untereinander. Berechnen Sie die Entropie im kanonischen Ensemble mit Hilfe der Formel $S_{kan} = -k \sum_{i=1} w_i \ln w_i$ und vergleichen Sie mit $S = -(\partial F / \partial T)_H$ (vgl. Vorlesung).

Solution

For each spin-1/2 particle, we have the partition function

$$z_i = \sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{\beta E_i \sigma_i} = e^{\beta E_i} + e^{-\beta E_i} = 2 \cosh(\beta E_i), \quad (1)$$

with E_i being the energy of a two-level system. Let us assume all $E_i = E$, then the partition function for the whole system is

$$Z = \prod_i z_i = \prod_i 2 \cosh(\beta E_i) = [2 \cosh(\beta E)]^N, \quad (2)$$

and

$$w_i^{\pm} = \frac{e^{\pm \beta E_i}}{z_i} = \frac{e^{\pm \beta E}}{2 \cosh(\beta E)} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} S_{kan} &= -k \sum_i w_i \log(w_i) = -kN (w_i^+ \log(w_i^+) + w_i^- \log(w_i^-)) \\ &= k (N \log [2 \cosh(\beta E)] - \beta EN \tanh(\beta E)). \end{aligned} \quad (4)$$

On the other hand, we have the free energy

$$F = -kT \log Z = -NT \log [2 \cosh(\beta E)] \quad (5)$$

and entropy

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = k (N \log [2 \cosh(\beta E)] - \beta EN \tanh(\beta E)) \quad (6)$$

2 System von Oszillatoren

Wir betrachten ein System von N quantenmechanischen Oszillatoren, mit Frequenzen ω_i ($i = 1, \dots, N$). Die Energieniveaus eines Oszillators sind gegeben durch $(n+1/2)\hbar\omega_i$ ($n = 0, 1, 2, \dots$).

1. Berechnen Sie die Zustandssumme für dieses System im kanonischen Ensemble.

Solution

We start with

$$\begin{aligned}
 Z &= \text{Tr} \left[e^{-\beta H} \right] = \prod_{i=1}^N \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\beta H_i} | n \rangle = \prod_{i=1}^N \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_{i,n}} = \prod_{i=1}^N \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_i} \\
 &= \prod_{i=1}^N e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_i} \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\beta\hbar\omega_i} \right)^n = \prod_{i=1}^N e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_i} \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_i}} \right) \\
 &= \prod_{i=1}^N \left[2 \sinh \left(\frac{\beta\hbar\omega_i}{2} \right) \right]^{-1}
 \end{aligned} \tag{7}$$

2. Berechnen Sie die freie Energie, die mittlere Energie und die spezifische Wärme.

Solution

The free energy is

$$F = -\frac{1}{\beta} \log(Z) = \prod_{i=1}^N kT \log \left[2 \sinh \left(\frac{\beta\hbar\omega_i}{2} \right) \right], \tag{8}$$

and the average energy

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \log(Z)}{\partial \beta} = \prod_{i=1}^N \frac{\hbar\omega_i}{4} \coth \left(\frac{\beta\hbar\omega_i}{2} \right) \text{csch} \left(\frac{\beta\hbar\omega_i}{2} \right), \tag{9}$$

and the specific heat capacity

$$c_V = \frac{\partial U}{\partial F} = \frac{\partial(U + TS)}{\partial T} = \prod_{i=1}^N \frac{1}{k} \left(\frac{\hbar\omega_i}{2T} \right)^2 \left[\sinh \left(\frac{\hbar\omega_i}{2kT} \right) \right]^{-2} \tag{10}$$

by using $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$.

3 (*) Ideales Gas (5 Punkte)

Das ideale Gas beschreibt ein System aus N identischen, nicht wechselwirkenden Teilchen in einem Volumen V . Wir unterscheiden zwischen zwei Arten von idealem Gas, dem Fermi- und Bose-Gas. Zusätzlich lässt sich ein nützliches mathematisches Modell definieren, das sogenannte Boltzmann-Gas oder ideales Gas.

- (a) Impuls und Position von klassischen Teilchen sind kontinuierlich und scharf messbar. Die kanonische Zustandssumme des Boltzmann-Gases hat die Form

$$Z_N \propto \int \frac{1}{N!} e^{-\beta H(x,p)} d^{3N}x d^{3N}p. \quad (11)$$

Führen Sie einen Parameter (bzw. ein Integral-Maß) h ein um die Zustandssumme dimensionslos zu machen. Leiten Sie die Zustandsgleichung her und bestimmen Sie die Entropie. Zeigen Sie, dass die Entropie von der Wahl von h abhängt. Reskalieren sie h mit dem Faktor α .

Solution

Since the particles are non-interacting, the Hamiltonian is simply the sum of the free single-particle Hamiltonians

$$H(x, p) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} \equiv \sum_i H_{\text{single}}(x_i, p_i), \quad (12)$$

where p_i is the momentum of the i -th particle. Using the integration measure h for $dx dp$ and the correct Gibb's factor $1/N!$, the N -particle partition function is therefore

$$\begin{aligned} Z_N &= \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^{3N}x d^{3N}p e^{-\beta H(x,p)} = \frac{1}{N! h^{3N}} \prod_i \int d^{3N}x d^{3N}p e^{-\beta H_{\text{single}}(x_i, p_i)} \\ &= \frac{1}{N!} \left(\frac{1}{h^3} \int d^3x d^3p e^{-\beta H_{\text{single}}(x,p)} \right)^N = \frac{1}{N!} Z_{\text{single}}^N, \end{aligned} \quad (13)$$

with the single-particle partition function Z_{single} . To evaluate this expression, we use the identity $\int dx x^2 e^{-cx^2} = (-1) \frac{d}{dc} \left(\int dx e^{-cx^2} \right)$ and the Gaussian integral $2 \int_0^\infty dx e^{-cx^2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}}$ for $c > 0$. Z_{single} is therefore equal to

$$Z_{\text{single}} = \frac{V}{h^3} \int d^3p e^{-\beta p^2/2m} = \frac{V}{h^3} 4\pi \int_0^\infty dp p^2 e^{-\beta p^2/2m} = V \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2} \right)^{3/2} = \frac{V}{\lambda^3}. \quad (14)$$

We defined here $\lambda = \sqrt{\frac{\beta h^2}{2\pi m}}$. This is the thermal de-Broglie wavelength if the 'correct' integration measure is used, i.e. Planck's constant.

Hence we find

$$Z_N = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N. \quad (15)$$

Using Stirling's formula $\log N! = N \log(N) - N + O(\log(N))$ we can calculate the thermodynamic potentials and from that the entropy and equation of state

$$F = -kT \log Z_N \approx -kTN \left(\log \frac{V}{N\lambda^3} + 1 \right), \quad (16)$$

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = kN \left(\log \frac{V}{N\lambda^3} + \frac{5}{2} \right), \quad (17)$$

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = \frac{NkT}{V}. \quad (18)$$

Note that both the entropy and free energy depend on the integration measure h which cannot be derived from classical physics.

(b) Bestimmen Sie Z_N über

$$Z_N = \text{Tr} \left[e^{-\beta H} \right]. \quad (19)$$

Hierbei ist H der Hamilton-Operator eines freien Teilchens. Zeigen Sie, dass der führende Term von Z_N im thermodynamischen Limit bei hohen Temperaturen mit dem klassischen Ergebnis der vorherigen Aufgabe übereinstimmt. Benutzen Sie dafür das Maß $2\pi\hbar$ für $dx dp$.

Solution

In quantum mechanics, the momenta and energies of particles in a box with volume $V = L^3$ are quantized as

$$\begin{aligned} H |\Phi_n\rangle &= E_n |\Phi_n\rangle, \quad E_n = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}, \quad \vec{p}_i = \frac{2\pi}{L} \hbar \vec{n}_i, \quad \vec{n}_i \in \mathbb{Z}^3, \\ \langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N | \Phi_n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\theta \in S_N} (\pm 1)^\theta \phi_{\vec{p}_1}(\vec{x}_{\theta_1}) \dots \phi_{\vec{p}_N}(\vec{x}_{\theta_N}), \quad \phi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}}, \end{aligned} \quad (20)$$

with the $+, -$ sign for bosons and fermions, respectively, and S_N is the set of possible permutations that do not create any new states. In the thermodynamic limit $V \rightarrow \infty$, the momenta become continuous

$$\sum_n \rightarrow \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right)^N \int d^{3N}p, \quad (21)$$

where the factor $1/N!$ takes into account that permutations of the momenta $\vec{p}_i$ in Φ_n do not create any new states. Inserting $\mathbf{1} = \int |\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N\rangle \langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N|$ into the trace formula, we find the partition function

$$\begin{aligned} Z_N &= \text{Tr} [e^{-\beta H}] = \sum_n \langle \Phi_n | e^{-\beta E_n} | \Phi_n \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right)^N \int d^{3N}x d^{3N}p \langle \Phi_n | \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N \rangle \langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N | \Phi_n \rangle e^{-\beta E_n} \\ &= \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right)^N \int d^{3N}x d^{3N}p \frac{1}{N! V^N} \sum_{\theta, \theta'} (\pm 1)^{\theta+\theta'} e^{i\vec{p}_{\theta_1}(\vec{x}_{\theta_1}-\vec{x}_{\theta'_1})/\hbar} \dots e^{-\beta E_n} \\ &= \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right)^N \int d^{3N}x d^{3N}p \frac{1}{V^N} \sum_{\theta} (\pm 1)^\theta e^{i\vec{p}_1(\vec{x}_1-\vec{x}_{\theta_1})/\hbar} \dots e^{-\beta E_n}. \end{aligned}$$

The integral over the momenta is a Gaussian integral

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta p^2/(2m) + i\vec{p}\vec{x}/\hbar} = \frac{1}{\lambda^3} e^{-\frac{\pi x^2}{\lambda^2}}, \quad \lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}}, \quad (22)$$

with the thermal de-Broglie wavelength λ already introduced in exercise part (a). With this we find the partition function of the quantum gas

$$\begin{aligned} Z_N &= \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N \int \frac{d^{3N}x}{V^N} \sum_{\theta} (\pm 1) \left[e^{-\frac{\pi}{\lambda^2}(\vec{x}_1-\vec{x}_{\theta_1})^2} \dots e^{-\frac{\pi}{\lambda^2}(\vec{x}_n-\vec{x}_{\theta_n})^2} \right] \\ &= \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N \int \frac{d^{3N}x}{V^N} \left[1 \pm \sum_{i < j} e^{-\frac{2\pi}{\lambda^2}(\vec{x}_i-\vec{x}_j)^2} + (3 \text{ particle term}) + \dots \right], \end{aligned} \quad (23)$$

where we expanded the sum into the number of permuted particles. In the high temperature limit $T \rightarrow \infty$, the wavelength goes to zero $\lambda \rightarrow 0$ and only the first term is non-vanishing. More generally as long as $(\frac{V}{N})^{2/3} \sim \langle (\vec{x}_i - \vec{x}_j)^2 \rangle \gg \lambda^2$, i.e. at small densities, the leading term is

$$Z_N \approx \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N, \quad (24)$$

which coincides with the classical partition function of the Boltzmann gas (15) for the integration measure $h = 2\pi\hbar$.

4 (*) Spinsystem im Magnetfeld (5 Punkte)

Wir betrachten ein System von Spins in einem Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$. Der Hamilton-Operator eines Spins ist: $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\hbar\sigma_z\mu B/2$. Zum Zeitpunkt $t = 0$ ist die Hälfte des Spins in Richtung $+x$ polarisiert, die andere Hälfte in Richtung $+y$.

1. Geben Sie den Dichteoperator $\rho(t)$ des Systems bei $t = 0$ an.

Solution

Der Dichteoperator bei $t = 0$ ergibt sich mit

$$\rho(0) = \frac{1}{2} |x_+\rangle\langle x_+| + \frac{1}{2} |y_+\rangle\langle y_+|$$

mit den Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ergibt sich in der Basis des z-Spins

$$|x_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right)$$

und analog für $|y_+\rangle$

$$|y_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right)$$

Einsetzen in $\rho(0)$ ergibt die Matrix

$$\rho(0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & (1-i)/2 \\ (1+i)/2 & 1 \end{pmatrix}$$

Für die folgenden Aufgaben ist es sinnvoll, diese Matrix als Linearkombination der Pauli-Matrizen zu schreiben:

$$\rho(0) = \frac{1}{2}\sigma_0 + \frac{1}{4}\sigma_x + \frac{1}{4}\sigma_y$$

2. Welches sind die Eigenwerte und die Eigenvektoren dieses Operators?

Solution

Die Eigenwerte sind

$$\lambda_1 = \frac{1}{4} (2 + \sqrt{2}),$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{4} (2 - \sqrt{2})$$

mit den Eigenvektoren

$$v_1 = \begin{pmatrix} \frac{1-i}{\sqrt{2}} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$v_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1-i}{\sqrt{2}} \\ 1 \end{pmatrix}$$

3. Berechnen Sie $\rho(t)$ und $\langle S_x \rangle(t)$.

Solution

Wir schreiben $\rho(t)$ als Linearkombination von Pauli-Matrizen mit zeitabhängigen Koeffizienten

$$\rho(t) = \frac{1}{2} (\sigma_0 + b_x(t)\sigma_x + b_y(t)\sigma_y + b_z(t)\sigma_z)$$

Die Zeitabhängigkeit von $\rho(t)$ können wir berechnen über

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho(t)] = -\frac{\hbar\mu B}{2} [\sigma_z, \rho(t)]$$

Wir setzen den Ansatz für $\rho(t)$ von oben ein und erhalten

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar\mu B}{2} [\sigma_z, \rho(t)] &= -\frac{\hbar\mu B}{4} (b_x(t) [\sigma_z, \sigma_x] + b_y(t) [\sigma_z, \sigma_y]) \\ &= -\frac{i\hbar\mu B}{2} (b_x(t)\sigma_y - b_y(t)\sigma_x) \end{aligned}$$

Wir betrachten nun die Differentialgleichungen für die Koeffizienten der Pauli-Matrizen und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{2} \partial_t b_x(t) &= \frac{i\hbar\mu B}{2} b_y(t) \\ \frac{i\hbar}{2} \partial_t b_y(t) &= -\frac{i\hbar\mu B}{2} b_x(t) \\ \frac{i\hbar}{2} \partial_t b_z(t) &= 0 \end{aligned}$$

Ineinander einsetzen liefert

$$\partial_t^2 b_x(t) + (\mu B)^2 b_x(t) = 0.$$

Wir lösen für die oben gegebenen Anfangsbedingungen und erhalten

$$\begin{aligned} b_x(t) &= \frac{1}{2} \sin(\mu B t) + \frac{1}{2} \cos(\mu B t) \\ b_y(t) &= \frac{1}{2} \cos(\mu B t) - \frac{1}{2} \sin(\mu B t) \\ b_z(t) &= 0 \end{aligned}$$

Den Erwartungswert $\langle S_x \rangle(t)$ bestimmen wir über

$$\langle S_x \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} \text{Tr} [\rho(t) \sigma_x]$$

Unter Ausnutzen von $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} \sigma_k$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle(t) &= \frac{\hbar}{2} \text{Tr} [\rho(t) \sigma_x] \\ &= \frac{\hbar}{4} b_x(t) \text{Tr} [\sigma_0] = \frac{\hbar}{2} b_x(t) = \frac{\hbar}{4} \sin(\mu B t) + \frac{\hbar}{4} \cos(\mu B t) \end{aligned}$$

5 Zustandsdichte

Wir betrachten ein quantenmechanisches Teilchen in einem D -dimensionalen Kasten der Kantenlänge L , für das die Energie-Impuls-Beziehung $\epsilon(p)$ besteht. Die Zustandsdichte $\mathcal{N}(\epsilon)$ ist definiert als

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int d^D p \, \delta(\epsilon - \epsilon(p)).$$

Es sei nun $\epsilon(p) = \alpha p^n$. Bestimmen Sie $\mathcal{N}(\epsilon)$ für $D = 1, 2, 3$. Geben Sie insbesondere die Ergebnisse für Elektronen ($\epsilon(p) = |\vec{p}|^2/(2m)$) und Photonen ($\epsilon(p) = c\vec{p}$) an.

For electron in $D = 3$, we have

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}(\epsilon) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \delta(\epsilon - \frac{\vec{p}^2}{2m}) \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{4\pi} d\Omega \int_0^\infty dr r^2 \delta(\epsilon - \frac{r^2}{2m}) = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{2} \delta(\epsilon - \frac{x}{2m}) \\
&= \frac{4\sqrt{2}\pi m^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dx' \sqrt{x'} \delta(\epsilon - x') \\
&= \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \sqrt{\epsilon},
\end{aligned} \tag{25}$$

and in $D = 2$, we have

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}(\epsilon) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d^2p \delta(\epsilon - \frac{\vec{p}^2}{2m}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dr r \delta(\epsilon - \frac{r^2}{2m}) \\
&= \frac{2\pi m}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty dx \delta(\epsilon - x) = \frac{m}{2\pi\hbar^2},
\end{aligned} \tag{26}$$

and in $D = 1$, we have

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}(\epsilon) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int_{-\infty}^\infty dp \delta(\epsilon - \frac{p^2}{2m}) \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \sqrt{\frac{m}{2\epsilon}} \left(\int_{-\infty}^\infty dp \delta(p - \sqrt{2m\epsilon}) + \int_{-\infty}^\infty dp \delta(p + \sqrt{2m\epsilon}) \right) \\
&= \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\epsilon}}.
\end{aligned} \tag{27}$$

Notice that in one-dimensional case, one needs to take care of both roots with positive and negative p values.

For photon in $D = 3$, we have

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}(\epsilon) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \delta(\epsilon - c\vec{p}) \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{4\pi} d\Omega \int_0^\infty dr r^2 \delta(\epsilon - cr) = \frac{\epsilon^2}{2\pi^2(\hbar c)^3},
\end{aligned} \tag{28}$$

and in $D = 2$, we have

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}(\epsilon) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d^2p \delta(\epsilon - c\vec{p}) \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dr r \delta(\epsilon - cr) = \frac{\epsilon}{2\pi(\hbar c)^2},
\end{aligned} \tag{29}$$

and in $D = 1$, we have

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int_{-\infty}^\infty dp \delta(\epsilon - cp) = \frac{1}{2\pi\hbar c} \tag{30}$$