

Moderne Theoretische Physik II (Quantenmechanik II und Statistik)

Institut für Theoretische Teilchenphysik

Prof. Dr. Matthias Steinhauser, Dr. Daniel Stremmer

WS 25/26 – Blatt 12

Abgabe: 06.02.2026, 11:30 Uhr; Besprechung: 10.02.2026

Aufgabe 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 $S_{kan} = -k \sum_i w_i \ln w_i$ und vergleichen Sie mit $S = -(\partial F / \partial T)_B$ (vgl. Vorlesung).

Solution

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

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

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

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

and

$$w_i^\pm = \frac{e^{\pm \beta E_i}}{z_i} = \frac{e^{\pm \beta E}}{2 \cosh(\beta E)},$$
$$S_{kan} = -k \sum_i w_i \log(w_i) = k (N \log [2 \cosh(\beta E)] - \beta EN \tanh(\beta E)).$$

On the other hand, we have the free energy

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

and entropy

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

Aufgabe 2: System von Oszillatoren ($2 + 2 = 4$)

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

a) Berechnen Sie die Zustandssumme für dieses System im kanonischen Ensemble.

Solution

We start with

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

b) Berechnen Sie die freie Energie, die mittlere Energie und die spezifische Wärmekapazität.

Solution

The free energy is

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

and the average energy

$$U = -\frac{\partial \log(Z)}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^N \frac{\hbar\omega_i}{2} \coth \left(\frac{\beta\hbar\omega_i}{2} \right),$$

and the specific heat capacity

$$c_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{k} \left(\frac{\hbar\omega_i}{2T} \right)^2 \left[\sinh \left(\frac{\hbar\omega_i}{2kT} \right) \right]^{-2}.$$

Aufgabe 3: Magnetisches Moment für allgemeinen Spin (2 + 2 + 1 + 1 = 6)

Betrachten Sie ein System von N Teilchen mit einem allgemeinen Drehimpuls \vec{J} mit der Quantenzahl J ohne Wechselwirkung in einem homogenen äußeren Magnetfeld entlang der z-Achse. Der Einteilchenhamiltonoperator ist gegeben durch

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad \text{mit} \quad \vec{\mu} = -g\mu_B \vec{J} / \hbar.$$

a) Bestimmen Sie die kanonische 1-Teilchen-Zustandssumme Z_1 .

Solution

We calculate the partition function as

$$\begin{aligned} Z_1 &= \sum_{m=-J}^J e^{-\beta E_m} = \sum_{m=-j}^J e^{-\beta E_0 m} \\ &= e^{\beta E_0 J} \sum_{m=0}^{2J} e^{-\beta E_0 m} = e^{\beta E_0 J} \frac{1 - e^{-\beta E_0 (2J+1)}}{1 - e^{-\beta E_0}} \\ &= \frac{e^{\frac{\beta E_0 (2J+1)}{2}} - e^{-\frac{\beta E_0 (2J+1)}{2}}}{e^{\beta E_0/2} - e^{-\beta E_0/2}} = \frac{\sinh(\beta E_0 (J + \frac{1}{2}))}{\sinh(\beta E_0/2)}, \end{aligned}$$

with $E_0 = g\mu_B B$.

b) Zeigen Sie, dass der Erwartungswert $\langle \mu_z \rangle$ von einem Teilchen geschrieben werden kann als

$$\langle \mu_z \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z_1}{\partial B},$$

und berechnen Sie damit den Erwartungswert.

Solution

We consider first

$$\begin{aligned} \frac{\partial \log Z_1}{\partial B} &= \frac{1}{Z_1} \frac{\partial Z_1}{\partial B} = \frac{1}{Z_1} \sum_{m=-J}^J \frac{\partial}{\partial B} e^{-\beta E_0 m} \\ &= \beta \left(\frac{1}{Z_1} \sum_{m=-J}^J (-g\mu_B m) e^{-\beta E_0 m} \right) = \beta \langle \mu_z \rangle, \end{aligned}$$

from which the relation directly follows. Next we calculate the expectation value

$$\langle \mu_z \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z_1}{\partial B} = g\mu_B \left(\left(J + \frac{1}{2} \right) \coth \left(\beta E_0 \left(J + \frac{1}{2} \right) \right) - \frac{1}{2} \coth \left(\frac{\beta E_0}{2} \right) \right).$$

c) Betrachten Sie den Grenzfall für kleine Felder \vec{B} , bzw. große Temperaturen und zeigen Sie, dass man für die magnetische Suszeptibilität χ wieder das Curie-Gesetz erhält, also $\chi \sim 1/T$.

Solution

We expand first the expectation value for small B

$$\begin{aligned}\langle \mu_z \rangle &= g\mu_B \left(\left(J + \frac{1}{2} \right) \left(\frac{1}{\beta E_0 (J + \frac{1}{2})} + \frac{\beta E_0}{3} \left(J + \frac{1}{2} \right) \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{2}{\beta E_0} + \frac{\beta E_0}{6} \right) \right) \\ &= \frac{g\mu_B \beta E_0}{3} J(J+1).\end{aligned}$$

Now we calculate χ as

$$\chi = \frac{\partial \langle \mu_z \rangle}{\partial B} = (g\mu_B)^2 \frac{\beta}{3} J(J+1) \sim \frac{1}{T},$$

which follows Curie's Law.

- d) Bestimmen Sie $\langle \mu_z \rangle$ und χ im gemeinsamen Grenzfall $J \rightarrow \infty$ und $g \rightarrow 0$, wobei $g \cdot J$ konstant sein soll.

Solution

In the combined limit we obtain for $\langle \mu_z \rangle$

$$\langle \mu_z \rangle = g\mu_B J \left(\coth(\beta E_0 J) - \frac{1}{\beta E_0 J} \right),$$

where we used

$$\begin{aligned}g(J + 1/2) &= gJ(1 + \mathcal{O}(g)) \\ \coth(\beta E_0 J) &= \frac{2}{\beta E_0 J} + \frac{\beta E_0 J}{6} + \mathcal{O}(g^2).\end{aligned}$$

And for χ we obtain

$$\chi = (g\mu_B J)^2 \beta \left(\frac{1}{\beta E_0 J} - \frac{1}{\sinh^2(\beta E_0 J)} \right) \stackrel{B \rightarrow 0}{=} \frac{(g\mu_B J)^2 \beta}{3}$$