KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE

INSTITUT FÜR THEORIE
DER KONDENSIERTE MATERIE

Moderne Theoretische Physik III (Einführung in die Theorie der Kondensierten Materie) SS 2024

Prof. Dr. A. D. Mirlin
Dr. Risto Ojajärvi and Dr. Paul Pöpperl

Blatt 0
Präsenzübung am 19.04.2024

---

1. Spin-$\frac{1}{2}$-Systeme (Wiederholung zur Mod. Theo II) (0 Punkte)

(a) Schreiben Sie den Spin-Operator $\vec{S}$ eines Spin-$\frac{1}{2}$-Systems in der S_z-Basis. Die Spins befinden sich in einem Magnetfeld $\vec{B}$, mit gyromagnetischem Verhältnis g. Wie lautet der Hamilton-Operator?

Lösung:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}, \tag{1}$$

mit den Pauli-Matrizen:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Hamiltonian: $H = -\frac{1}{2} g\mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$.

(b) N nicht-wechselwirkende Spins-$\frac{1}{2}$ befinden sich in einen System mit Magnetfeld $\vec{B}$.. Berechnen Sie die Freie Energie.

Lösung: Die Amplitude des Magnetfeldes ist B.

$$Z = Z_1^N. \tag{3}$$

Diagonalisierung gibt:

$$Z_1 = \sum_{s=\pm 1} e^{\frac{1}{2}\beta g\mu_B B s} = 2\cosh\left(\frac{1}{2}\beta g\mu_B B\right). \tag{4}$$

$$F = -k_B T \ln Z = -N k_B T \ln\left[2\cosh\left(\frac{1}{2}\beta g\mu_B B\right)\right] \tag{5}$$

(c) Bestimmen Sie die magnetische Suszeptibilität χ.

Lösung:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial B} = \frac{1}{2} N g\mu_B \tanh\left(\frac{1}{2}\beta g\mu_B B\right) \tag{6}$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{1}{4}\beta N \left(\frac{g\mu_B}{\cosh\left(\frac{1}{2}\beta g\mu_B B\right)}\right)^2 \tag{7}$$

2. **Mini-Ising-Kette** (0 Punkte)

Betrachten Sie $N = 3$ wechselwirkende Ising-Spins. Der erste und dritte Spin sind dabei nicht verbunden. Der Hamilton-Operator ist gegeben durch:

$$\mathcal{H} = -J(s_1^z s_2^z + s_2^z s_3^z) - \gamma B(s_1^z + s_2^z + s_3^z), \tag{8}$$

wobei B die Stärke des Magnetfeldes ist, γ die Stärke der Kopplung zwischen Spins und Magnetfeld, und J die Austauschwechselwirkung.

(a) Bestimmen Sie die Energien der möglichen Mikrozustände (d.h. der Eigenzustände des Hamilton-Operators).

Lösung: Der Hamilton-Operator ist bereits diagonal in der $s^z \in \{-1/2, 1/2\}$-Basis. Es gibt $2^3 = 8$ mögliche Mikrozustände, mit Energien:

$$E_{+++} = -(1/2)J - (3/2)\gamma B \tag{9}$$
$$E_{++-} = E_{-++} = -(1/2)\gamma B \tag{10}$$
$$E_{+-+} = +(1/2)J - (1/2)\gamma B \tag{11}$$
$$E_{--+} = E_{+--} = +(1/2)\gamma B \tag{12}$$
$$E_{-+-} = +(1/2)J + (1/2)\gamma B \tag{13}$$
$$E_{---} = -(1/2)J + (3/2)\gamma B. \tag{14}$$

(b) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme $Z(T, B)$.

Lösung:

$$\begin{aligned} Z(T,B) = {} & \exp\left[\beta(J/2 + 3\gamma B/2)\right] + 2\exp\left[\beta(\gamma B/2)\right] + \exp\left[\beta(-J/2 + \gamma B/2)\right] \\ & + 2\exp\left[\beta(-\gamma B/2)\right] + \exp\left[\beta(-J/2 - \gamma B/2)\right] + \exp\left[\beta(J/2 - 3\gamma B/2)\right], \end{aligned} \tag{15}$$

Also:

$$Z(T,B) = \left(4 + 2e^{-\beta J/2}\right)\cosh(\beta\gamma B/2) + 2e^{\beta J/2}\cosh(3\beta\gamma B/2). \tag{16}$$

(c) Im Fall $B = 0$, bestimmen Sie die Freie Energie. Bestimmen Sie damit die Wärmekapazität c_B bei konstantem Feld $B = 0$.

Lösung:

$$F = -k_B T \ln Z(T,0) = -k_B T \ln\left(4 + 4\cosh(\beta J/2)\right). \tag{17}$$

Die Entropie ist dadurch gegeben mit:

$$S(T,0) = -\frac{\partial F}{\partial T} = k_B \ln\left(4 + 4\cosh(\beta J/2)\right) - \frac{2J}{T}\frac{\sinh(\beta J/2)}{4 + 4\cosh(\beta J/2)}, \tag{18}$$

und c_B:

$$c_B(T,0) = T\frac{\partial S(T,0)}{\partial T} \tag{19}$$
$$= \frac{J^2\cosh(\beta J/2)}{k_B T^2(4 + 4\cosh(\beta J/2)} - \frac{4J^2\sinh^2\beta J/2}{k_B T^2[4 + 4\cosh(\beta J/2)]^2}. \tag{20}$$
$$= \frac{J^2}{4k_{\mathrm{B}}^2 T^2}\frac{1}{1 + \cosh(\beta J/2)} \tag{21}$$

(d) Das Ising-Modell ist eines der einfachsten Modelle in der Vielteilchenphysik, weil die lokale Dimension pro Gitterplatz nur 2 ist (das Minimum für nichttriviale Vielteilchenphysik). Nehmen Sie an, dass ein Rechner eine Million Zustände pro Sekunde berechnen kann für so ein wechselwirkendes System. Was ist dann die maximale Größe N des Gitters, falls der Rechner einen Tag Zeit hat, um alle Zustände zu betrachten? Was ist die maximale Größe, wenn der Rechner ein Jahr lang Zeit hat?

Lösung: Innerhalb von einem Tag kann der Rechner $8,64 \cdot 10^{10}$ Zustände berechnen, das entspricht einer maximalen Größe von nur 36 Gitterplätze. Wenn die Zustände gespeichert werden sollen, hat der Speicherplatz das gleiche Problem. Für 365 Tage ist es nicht viel besser: $N_{\text{Jahr}} = 44$. Durch die exponentielle Größe des Vielteilchenhilbertraumes sind wechselwirkende brute-force Computersimulationen mit großen Teilchenzahlen ($\gtrsim 30$) unmöglich. In (statistischer) Physik von wechselwirkenden Systemen müssen wir also nach klugen Näherungen suchen, oder nach speziellen Systemen mit exakten analytischen Lösungen.

3. Zustandssummen (0 Punkte)

(a) Die großkanonische Zustandssumme ist definiert als

$$Z = \mathrm{Tr}\left[\exp\Big(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})\Big)\right], \tag{22}$$

wobei $\hat{H}$ der Hamilton-Operator des Systems und $\hat{N}$ der Teilchenzahloperator ist. Unter der Annahme, dass das System nicht wechselwirkend ist, leiten Sie die übliche Form der großkanonischen Zustandssumme in Besetzungszahldarstellung

$$Z = \prod_\lambda \sum_{n_\lambda} \exp(-n_\lambda \beta(\varepsilon_\lambda - \mu)) \tag{23}$$

her und erklären Sie die Symbole λ, n_λ und ε_λ.

Lösung: Wir schreiben $\hat{N}$ und $\hat{H}$ in Besetzungszahldarstellung:

$$\hat{N} = \sum_\lambda \hat{n}_\lambda \tag{24}$$

$$\hat{H} = \sum_\lambda \hat{n}_\lambda \varepsilon_\lambda \tag{25}$$

Hierbei nummeriert λ die Einteilchenzustände des Systems, ε_λ ist die Energie von Zustand λ und $\hat{n}_\lambda$ zählt die Teilchen im Zustand λ. Gleichung (25) impliziert ein nichtwechselwirkendes System, bei dem der Hamiltonoperator auch durch die Summe der Einteilchen-Hamiltonoperatoren ausgedrückt werden kann. Wir erhalten

$$Z = \mathrm{Tr}\left[\exp\left(-\beta \sum_\lambda \hat{n}_\lambda(\varepsilon_\lambda - \mu)\right)\right] \tag{26}$$

$$= \mathrm{Tr}\left[\prod_\lambda \exp(-\beta \hat{n}_\lambda(\varepsilon_\lambda - \mu))\right] \tag{27}$$

Eine Basis des Hilbertraums ist gegeben durch alle Kombinationsmöglichkeiten, die Einteilchenzustände zu besetzen—die Basiszustände sind charakterisiert durch die

Besetzungszahlen der Einteilchenzustände $\{n_\lambda\}$. An Gleichung (25) sehen wir, dass der Hamiltonoperator in dieser Basis diagonal ist. Wir finden also

$$Z = \sum_{\{n_\lambda\}} \prod_\lambda \exp(-\beta n_\lambda(\varepsilon_\lambda - \mu)) \tag{28}$$

$$= \prod_\lambda \sum_{n_\lambda} \exp(-\beta n_\lambda(\varepsilon_\lambda - \mu)) \tag{29}$$

wobei n_λ die Anzahl von Teilchen im Zustand λ ist.

(b) Vereinfachen Sie den Ausdruck (23) für Bosonen / Fermionen.

Lösung: Bei Bosonen (Fermionen) kann jeder Einteilchenzustand null bis unendlich (0 oder 1) mal besetzt werden:

$$Z_\mathrm{F} = \prod_\lambda [1 + \exp(-\beta(\varepsilon_\lambda - \mu))] \tag{30}$$

$$Z_\mathrm{B} = \prod_\lambda \left[\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-n\beta(\varepsilon_\lambda - \mu))\right] \tag{31}$$

$$= \prod_\lambda \left[\frac{1}{1 - \exp(-\beta(\varepsilon_\lambda - \mu))}\right] \tag{32}$$

(c) Nehmen Sie jetzt an, dass das System wechselwirkend ist und erklären Sie, warum die Vereinfachungen aus Teil (a) nicht mehr angewendet werden können.

Lösung: Die Vereinfachungen aus Teil (a) beruhen darauf, dass der Hamilton-Operator von der Form (25) ist und damit die Eigenzustände des nicht-wechselwirkenden N-Teilchen-Systems trivial durch die Eigenzustände des Einteilchen-Systems ausgedrückt werden können. (Alle Eigenzustände sind von der Form $|\{n_\lambda\}\rangle$ wobei sich der Index λ auf Einteilchenzustände bezieht.) Dadurch können die Summationen über die Besetzungszahlen $\{n_\lambda\}$ unabhängig voneinander durchgeführt werden. Das ist für das wechselwirkende System nicht der Fall. Der Hamiltonoperator kann nicht auf die Form (25) gebracht werden und ist nicht diagonal in der Besetzungszahlbasis. Die Eigenzustände sind also im Allgemeinen Linearkombinationen dieser Basiszustände. Die Zustandssumme kann daher nicht wie in (a) faktorisiert werden.

(d) Betrachten Sie die klassische kanonische Zustandssumme eines N-Teilchen Systems

$$Z = \frac{1}{N!} \int \left(\prod_{i=1}^{N} \frac{\mathrm{d}^3 p_i \, \mathrm{d}^3 x_i}{(2\pi\hbar)^3}\right) \exp(-\beta H(\{\mathbf{x}_i\}, \{\mathbf{p}_i\})). \tag{33}$$

Geben Sie im allgemeinen die Hamiltonfunktion eines nicht-wechselwirkenden N-Teilchen-Systems an. Welche Terme kommen dazu, wenn eine paarweise Wechselwirkung eingeführt wird? Welche Vereinfachung kann im nicht-wechselwirkenden Fall gemacht werden, und warum geht das im welchselwirkenden Fall nicht?

Lösung: Nicht wechselwirkend:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i=1}^{N} V(\mathbf{p}_i, \mathbf{x}_i) \tag{34}$$

paarweise Wechselwirkung

$$\sum_{i,j=1}^{N} V'(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j) \tag{35}$$

Im nicht-wechselwirkenden Fall kann die Zustandssumme faktorisiert werden

$$Z \to \prod_{i=1}^{N} \left(\int \frac{\mathrm{d}^3\mathbf{x}_i \, \mathrm{d}^3\mathbf{p}_i}{(2\pi\hbar)^3} \exp(-\beta H_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_i)) \right) \tag{36}$$

da auch die Hamiltonfunktion in N einzelne Summanden zerfällt. Im Wechselwirkenden Fall ist keine Faktorisierung möglich, da die Wechselwirkungsterme die Integrale koppeln.