

Übungen zur Theoretischen Physik F SS 09

PROF. DR. A. SHNIRMAN
DR. S. RACHEL

Blatt 10
Besprechung 30.6.2009

1. Ising Modell:

(2 + 2 + 1 = 5 Punkte)

Das Ising-Modell zweier wechselwirkender Spins $1/2$ auf Gitterplätzen 1 und 2 in einem äußeren Magnetfeld $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$ lautet (in geeigneten Einheiten)

$$\hat{H} = -J\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z - B(\hat{S}_1^z + \hat{S}_2^z)$$

- (a) Bestimmen Sie die Eigenzustände und -energien von $\hat{H}$, und damit die kanonische Zustandssumme $Z_K(T, B)$.
- (b) Berechnen Sie die Magnetisierung

$$M(T, B) = \langle \hat{S}_1^z + \hat{S}_2^z \rangle$$

und die Suszeptibilität

$$\chi(T) = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial B}.$$

Wie verläuft $\chi(T)$ für $kT \ll J$ bzw. $kT \gg J$?

Für den thermischen Mittelwert gilt $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{W}\hat{A})$.

- (c) Alternative Methode zur Berechnung der Suszeptibilität: Es gelte folgende Relation:

$$\chi(T) = \frac{1}{kT} \langle (\hat{S}_1^z + \hat{S}_2^z)^2 \rangle \Big|_{B=0}$$

Berechnen Sie für $B = 0$ den Erwartungswert $\langle (\dots)^2 \rangle$ und damit $\chi(T)$.

2. Relation zwischen Suszeptibilität und Korrelatoren im Ising-Modell:

(5 Punkte)

Benutzen Sie den allgemeinen Ausdruck $Z = \text{Sp} \{ e^{-H/(kT)} \}$ für die Zustandssumme des durch den Hamiltonoperator $H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz} - B \sum_i S_{iz}$ beschriebenen Ising-Modells, um die Relation (von Aufgabe 1c) zu beweisen:

$$\chi \equiv \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{1}{kT} \left[\sum_{i,j} \langle S_{iz} S_{jz} \rangle - \left\langle \sum_i S_{iz} \right\rangle^2 \right].$$

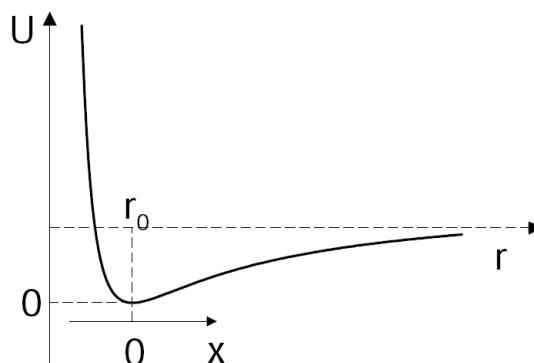
3. Anharmonischer Oszillator:

(4 + 6 = 10 Punkte)

In einem zweiatomigen Molekül seien die Atome durch das gezeigte Potential U aneinander gebunden, wobei r den Abstand der Atome bezeichne. Außerdem sei das Molekül in ein Kristallgitter eingebunden, so daß keine Rotationsfreiheitsgrade auftreten. Für kleine Auslenkungen $x = r - r_0$ aus der Ruhelage r_0 kann U um r_0 entwickelt werden. Dann wird das Molekül durch den folgenden Hamilton-Operator beschrieben

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2, \quad \hat{V} = \alpha\hat{x}^3$$

mit der effektiven Masse m und der Eigenfrequenz ω_0 . Betrachten Sie V als kleine Störung. Der Ortsoperator x kann durch die Auf- und Absteigeoperatoren $a^\dagger$ und a ausgedrückt werden. Das Kristall wirkt als Wärmebad mit der Temperatur T (kanonische Gesamtheit).



- (a) Berechnen Sie Zustandssumme Z_0 und freie Energie F_0 des ungestörten Systems $\hat{H}_0$. Bestimmen Sie die Korrektur F_1 zur freien Energie in 1. Ordnung Störungstheorie:

$$F = F_0 + F_1 + \dots, \quad F_1 = \langle \hat{V} \rangle_0 = \text{Tr}(\hat{W}_0 \hat{V}), \quad \hat{W}_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta \hat{H}_0}, \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

- (b) In 1. Ordnung Störungstheorie ist ein thermischer Mittelwert $\langle \hat{A} \rangle$ gegeben durch

$$\text{Tr}(\hat{W} \hat{A}) = \text{Tr}(\hat{W}_0 \hat{A}) + \text{Tr}(\hat{W}_1 \hat{A})$$

wobei

$$\hat{W}_1 = -\hat{W}_0 \int_0^\beta d\tau [\hat{V}_\tau - \langle \hat{V} \rangle_0], \quad \hat{V}_\tau = e^{\tau \hat{H}_0} \hat{V} e^{-\tau \hat{H}_0}$$

Gesucht ist die mittlere Ausdehnung $\langle \hat{x} \rangle = \text{Tr}(\hat{W} \hat{x})$ des Moleküls in 1. Ordnung. Berechnen Sie $\text{Tr}(\hat{W}_0 \hat{x})$. Zeigen Sie dann zunächst, dass

$$\text{Tr}(\hat{W}_1 \hat{x}) = \left(\frac{1}{Z_0} \sum_{n,n'=0}^{\infty} \langle n' | \hat{V} | n \rangle \langle n | \hat{x} | n' \rangle \frac{e^{-\beta E_n}}{E_n - E_{n'}} \right) + (\text{komplex konjugiert})$$

Gewinnen Sie daraus

$$\text{Tr}(\hat{W}_1 \hat{x}) = -\text{const.} \cdot \frac{1}{Z_0} \sinh \left(\frac{\hbar \omega_0}{2kT} \right) \sum_{\bar{n}=1}^{\infty} \bar{n}^2 e^{-\beta \hbar \omega_0 \bar{n}}$$

und berechnen Sie die Summe. Wie verläuft $\langle \hat{x} \rangle$ qualitativ im Bereich $0 \leq T < \infty$ für $\alpha < 0$? Berechnen Sie den thermischen Ausdehnungskoeffizienten

$$\kappa = \frac{1}{r_0} \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial T}.$$