Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie
der Kondensierten Materie

Übungen zur Theoretischen Physik F SS 12

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Dr. Igor Gornyi

Blatt 11: 30 Punkte + 5 Bonuspunkte
Besprechung 06.07.2012

---

1. Phasenübergang 2. Ordnung: $(5 + 5 = 10$ Punkte$)$

Für ein Heisenberg-Modell für N Spins der Länge S lässt sich über ein Näherungsverfahren das freie Energiefunktional für den Ordnungsparameter $\overline{m}$ herleiten,

$$F(\overline{m}) = N\left[\frac{1}{2}zJ(\overline{m})^2 - k_BT\ln(Z_1)\right]$$

wobei sich Z_1 schreiben lässt als

$$Z_1 = \sum_{m=-S}^{S}\exp\left(\frac{zJ\overline{m}}{k_BT}m\right) = \frac{\sinh\left(\frac{zJ}{kT}\,\overline{m}\,\frac{2S+1}{2}\right)}{\sinh\left(\frac{zJ}{kT}\,\overline{m}\,\frac{1}{2}\right)}\ .$$

z ist die Koordinationszahl des Gitters, J die Wechselwirkungsenergie.

(a) In der Nähe des Phasenübergangs ist $\overline{m} \simeq 0$. Zeigen Sie durch Reihenentwicklung bis zur Ordnung $\sim \overline{m}^4$, daß man für $T \simeq T_N$ ein Landau-Funktional erhält,

$$F(\overline{m}) = NzJ\left[\frac{1}{2}\frac{T-T_N}{T_N}(\overline{m})^2 + \frac{1}{4}b(\overline{m})^4 - \frac{S(S+1)}{3}\ln(2S+1)\right]$$

und bestimmen Sie die Konstanten T_N und b.

(b) Skizzieren Sie $F(\overline{m})$ für $T > T_N$ und $T < T_N$, und berechnen Sie $\overline{m}(T)$.

2. Phasenübergang 1. Ordnung: $(2 + 4 + 4 = 10$ Punkte$)$

In einem ferroelektrischen Kristall entsteht unterhalb einer Übergangstemperatur T_c eine spontane Verzerrung γ der Einheitszelle, verbunden mit einem Dipolmoment $\mathbf{P}$. Das Landau-Funktional für die beiden Ordnungsparameter $\eta = |\mathbf{P}|^2$ und γ lautet

$$F(\eta,\gamma) = a(T-T_0)\eta + b\eta^2 + c\eta^3 + d\gamma\eta + \frac{g}{2}\gamma^2$$

wobei $\quad T_0, a, b, c, d, g > 0, \quad \tilde{b} = \left(\frac{d^2}{2g} - b\right) > 0.$

(a) Bestimmen Sie den Gleichgewichtswert $\gamma = \gamma(\eta)$ und damit das Funktional $F(\eta)$. Skizzieren Sie den Verlauf von $F(\eta)$ für verschiedene Temperaturen T, und begründen Sie, daß ein Phasenübergang 1. Ordnung auftreten kann.

(b) Berechnen Sie die kritische Temperatur T_c, bei der dieser Übergang stattfindet. Bestimmen Sie näherungsweise $\eta(T)$ und $\gamma(T)$ in der Nähe von T_c.

(c) Berechnen Sie die Entropie

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{T_0,a,b,\ldots}$$

für T unmittelbar oberhalb bzw. unterhalb T_c. Bestimmen Sie die latente Wärme $Q_l = T\,\Delta S$ des Phasenübergangs.

3. Dichtematrix für den Spin-1/2: (4 + 4 + 2 = 10 Punkte)

Für einen Spin-1/2 kann man die Dichtematrix durch den Polarisationsvector $\mathbf{P}$ ausdrücken:

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

(a) Zeigen Sie, dass wenn $|\mathbf{P}| = 1$, dann ist der Spin in einem reinen Zustand, der mit der folgenden Wellenfunktion dargestellt werden kann:

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

Die zwei Winkel legen die Richtung von $\mathbf{P}$ fest:

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

(b) Betrachten Sie jetzt ein System, das aus zwei Spin-1/2-Teilchen besteht. Berechnen Sie nun für alle vier Quantenzustände des Gesamtsystems $|S, S^z\rangle$, wobei $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$, die reduzierte Dichtematrix des Teilchens 1:

$$\hat{\rho}_1 = \mathrm{Tr}_2\hat{\rho} = \sum_{s_2^z}\langle s_2^z|\hat{\rho}|s_2^z\rangle,$$

wobei $\hat{\rho}$ die Dichtematrix des Gesamtsystems ist. In welchen der vier Zustände befindet sich das Teilchen 1 in einem reinen Zustand?
Hinweis: Die Dichtematrix des Gesamtsystems ist durch

$$\hat{\rho} = |S, S^z\rangle\langle S, S^z|$$

gegeben.

(c) Berechnen Sie für alle vier Zustände die von-Neumann-Entropie des Teilchens 1

$$S[\hat{\rho}_1] = -k_B\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_1\ln\hat{\rho}_1].$$

4. Stationäre Lösung der Liouville-Gleichung (Bonusaufgabe): (5 Bonuspunkte)

Betrachten Sie eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\boldsymbol{x}, t)$, wobei $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$ ein Vektor im Phasenraum ist. Zeigen Sie nun mit Hilfe der klassischen Liouville-Gleichung, dass eine Gibbs-Verteilung ρ, die nur über die Energie von $\boldsymbol{x}$ abhängt, stationär ist,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\big(H(\boldsymbol{x})\big) = 0 \ .$$

Die klassische Liouville Gleichung (vergleiche QM: von Neumann Gleichung) lautet

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\big\{\rho,\ H\big\}.$$

Hierbei bezeichnet $\{\cdot, \cdot\}$ die klassiche Poisson-Gleichung und nicht etwa den Antikommutator. Die Poissonklammer ist folgendermaßen definiert:

$$\big\{A\,,\,B\big\} = \sum_{j=1}^{3N}\left(\frac{\partial A}{\partial p_j}\frac{\partial B}{\partial q_j} - \frac{\partial A}{\partial q_j}\frac{\partial B}{\partial p_j}\right).$$