Übungen zu Moderne Theoretischen Physik III SS 16

Prof. Dr. A. Shnirman
PD Dr. B. Narozhny, Dr. P. Schad

Blatt 11
Besprechung: Freitag, 01.07.2016

---

1. Korrelatoren im 1D-Ising-Modell (30 Punkte, schriftlich)

Gegeben sei ein Ising-Modell aus N Spins-$\frac{1}{2}$ in einer Dimension mit periodischer Randbedingung: $\hat{S}^z_{N+1} = \hat{S}^z_1$ (Ising-Modell auf einem Ring). Der Hamiltonoperator ist

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N} \hat{S}^z_i \hat{S}^z_{i+1} - \gamma B \sum_{i=1}^{N} \hat{S}^z_i \ . \tag{1}$$

mit der Austauschwechselwirkung J und einem Magnetfeld $B > 0$. Die Eigenwerte der Spinoperatoren $\hat{S}^z_i$ seien durch $\frac{\sigma_i}{2}$ bezeichnet sind und können die diskreten Werte $\sigma_i = \pm 1$ annehmen ($\hbar = 1$) . Betrachten Sie den thermodynamischen Limes $N \to \infty$.

(a) Berechnen Sie im endlichen Magnetfeld $B > 0$ den Korrelator

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_l\}} \sigma_i \sigma_j e^{-\beta \mathcal{H}} \ , \qquad i > j \ . \tag{2}$$

Wie verhält sich der Korrelator $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ im Limes $(i - j) \to \infty$? Interpretieren Sie das Ergebnis.

(b) Berechnen Sie für $B = 0$ die Korrelatoren

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle \qquad \text{und} \qquad \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \rangle \ , \qquad i > j > k > l \ . \tag{3}$$

Drücken Sie den 4er-Korrelator $\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \rangle$ durch den 2er-Korrelator $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ aus.

Hinweis: Verwenden Sie die in der Vorlesung diskutierte Transfermatrixmethode. Im thermodynamischen Limes $N \to \infty$ können Sie Beiträge der Form $(\lambda_2/\lambda_1)^N$ vernachlässigen, wobei $\lambda_{1/2}$ die Eigenwerte der Transfermatrix sind und $\lambda_1 > \lambda_2$.

2. Suszeptibilität und Korrelatoren in Ising-Modellen (20 Punkte, schriftlich)

Im Allgemeinen hat der Hamiltonoperator eines Ising-Modells die Form

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}^z_i \hat{S}^z_j - \gamma B \sum_i \hat{S}^z_i \ , \tag{4}$$

wobei $\langle ij \rangle$ die Summation über nächste Nachbarn bezeichnet. Benutzen Sie den allgemeinen Ausdruck $Z = \mathrm{Tr}\left\{e^{-\mathcal{H}/(k_B T)}\right\}$ für die Zustandssumme, um zu beweisen, dass die Suszeptibilität $\chi \equiv \frac{\partial M}{\partial B}$ die folgende Relation erfüllt:

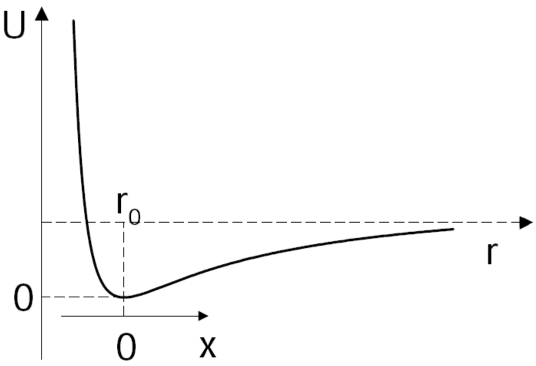
$$\chi = \frac{\gamma^2}{kT} \left[\sum_{i,j} \langle \hat{S}^z_i \hat{S}^z_j \rangle - \sum_i \left\langle \hat{S}_i \right\rangle^2 \right] \ . \tag{5}$$

3. Anharmonischer Oszillator (50 Punkte, mündlich)

Die Wechselwirkung zwischen den beiden Atomen eines zweiatomigen Moleküls kann durch ein Potential $U(r)$ beschrieben werden, wobei r den Abstand der Atome bezeichnet. Das Molekül sei in ein Kristallgitter eingebunden, so daß die Rotationsfreiheitsgrade unterdrückt sind und vernachlässigt werden können. 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 Hamiltonoperator

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

beschrieben, mit der effektiven Masse m und der Eigenfrequenz ω_0. Betrachten Sie den anharmonischen Term $\hat{V}$ als kleine Störung. 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:

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

Hinweis: Benutzen Sie Auf- und Absteigeoperatoren $a^\dagger$ und a .

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

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

wobei

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

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

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

(c) Bringen Sie $\mathrm{Tr}(\hat{W}_1 \hat{x})$ auf die Form

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

(d) Berechnen Sie die Summe in $\mathrm{Tr}(\hat{W}_1 \hat{x})$ und damit die Verschiebung der Ruhelage durch das anharmonische Potential.

(e) Wie verläuft $\langle \hat{x} \rangle$ qualitativ im Bereich $0 \leq T < \infty$ für $\alpha < 0$? Berechnen Sie den thermischen Ausdehnungskoeffizienten

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

Mit „schriftlich" gekennzeichnete Aufgaben sind handschriftlich zu bearbeiten und bis Mittwoch (vor der Besprechung), 10 Uhr, in den dafür vorgesehenen Kasten einzuwerfen.