Übungen zu Theoretische Physik IV

Priv.-Doz. Dr. Stefan Förste

http://www.th.physik.uni-bonn.de/people/forste/exercises/ws1213/tp4

–Anwesenheitsübungen–

A 5.1 Quantenmechanischer Virialsatz

In der Vorlesung wurde der klassische Virialsatz für wechselwirkende Teilchen,

$$PV = \frac{2}{3}\langle E_{\text{kin}}\rangle - \frac{1}{6}\sum_{m,n}\left\langle (x_m - x_n)\,\frac{\partial v\,(|x_m - x_n|)}{\partial\,(x_m - x_n)}\right\rangle$$

gezeigt. Hier wollen wir die quantenmechanische Version besprechen. Betrachte dazu ein System aus N Teilchen in einem Würfel mit Volumen V und Kantenlänge L. Der Hamiltonoperator ist gegeben durch

$$H = \sum_n \frac{p_n^2}{2m} + \sum_n V\,(x_n - x_{\text{Wand}}) + \frac{1}{2}\sum_{n,m} v\,(x_n - x_m)\ ,$$

wobei $V\,(x_n - x_{\text{Wand}})$ das Wandpotential ist und $v\,(x_n - x_m)$ die Wechselwirkung der Teilchen untereinander beschreibt.
Benutze die Tatsache, dass $\langle\Psi|\,[H, x_n\cdot p_n]\,|\Psi\rangle = 0$ für Energieeigenzustände Ψ, um

$$2\,\langle E_{\text{kin}}\rangle - \left\langle \sum_n x_n\cdot\nabla_n V(x_n - x_{\text{Wand}})\right\rangle - \left\langle \sum_n\sum_{n\neq m} x_n\cdot\nabla_n v\,(x_n - x_m)\right\rangle = 0\,,$$

mit $\nabla_n = \left(\frac{\partial}{\partial x_{n,1}}\ \frac{\partial}{\partial x_{n,1}}\ \frac{\partial}{\partial x_{n,3}}\right)^{\mathrm{T}}$ zu zeigen.
Wie im klassischen Fall folgt aus der Form des Wandpotentials

$$V_{\text{Wand}} = V_\infty \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{i=1}^{3}\Theta(x_{n,i} - L)\,,$$

dass $PV = \frac{1}{3}\left\langle\sum_n x_n\cdot\nabla_n V(x_n - x_{\text{Wand}})\right\rangle$. Einsetzen liefert den quantenmechanischen Virialsatz

$$2\,\langle E_{\text{kin}}\rangle - 3PV - \frac{1}{2}\left\langle\sum_n\sum_m (x_n - x_m)\cdot\nabla v\,(x_n - x_m)\right\rangle = 0\,.$$

A 5.2 Ising-Modell

Das Ising-Modell ist ein statistisches Modell für Ferromagnetismus in Festkörpern. Die Tatsache, dass es in $D \geq 2$ Dimensionen einen Phasenübergang zeigt und damit zu den wenigen solchen Modellen gehört die sich ohne größeren numerischen Aufwand lösen lassen, macht es zu einem der am besten studierten Modellen in der statistischen Physik.

Das Modell besteht aus einem Spin-Gitter in einem äußeren Magnetfeld bei dem nur die Wechselwirkungen direkt benachbarter Spins betrachtet werden. Der Hamiltonoperator ist gebeben durch

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^{N} \sigma_i \sigma_j - \mu B \sum_{j=1}^{N} \sigma_j \,.$$

Dabei bezeichnet σ_i die z-Komponente des Spins am Gitterplatz i und kann die Werte ± 1 annehmen. B sei das äußere Magnetfeld, μ das magnetische Moment der Spins und das *Austauschintegral* J beschreibt die Stärke der Wechselwirkung benachbarter Spins. $\langle i, j \rangle$ bedeutet, dass nur über die q nächsten Nachbarn von i summiert wird wobei q von der Art des Gitters abängt. Den eindimensionalen Fall, das heißt $q = 2$ werden wir in Aufgabe H 5.1 exakt berechnen, im Allgemeinen gibt es jedoch keine analytisch-exakte Lösung dieses Modells. Deswegen wollen wir hier die *Molekularfeldnäherung* betrachten, in der die Wechselwirkung eines Spins σ_i mit seinen nächsten Nachbarn durch das mittlere Feld $\langle \sigma \rangle$ der anderen Spins ersetzt wird. Mithilfe der Identität

$$\sigma_i \sigma_j = \sigma_i \langle \sigma_j \rangle + \langle \sigma_i \rangle \sigma_j - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle + (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) \,,$$

kann man H in die Form

$$H = -J \left(q \langle \sigma \rangle \sum_{j=1}^{N} \sigma_j - \frac{q}{2} N \langle \sigma \rangle^2 + \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) \right) - \mu B \sum_{j=1}^{N} \sigma_j$$

bringen. Dabei wurde ausgenutzt, dass aufgrund der Translationsinvarianz des Gitters der mittlere Spin $\langle \sigma_i \rangle$ nicht vom Index i abhängen kann. In der Molekularfeldnäherung wird nun der Term $\sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle)$, der die Abweichung eines bestimmten Spins von der mittleren Stellung beschreibt, vernachlässigt. Für den Hamiltonoperator ergibt sich also

$$H_{\mathrm{MF}} = J \frac{q}{2} N \langle \sigma \rangle^2 - \mu \left(B_{\mathrm{MF}} + B \right) \sum_{j=1}^{N} \sigma_j \,,$$

mit dem von den Spins verursachten mittleren Magnetfeld

$$B_{\mathrm{MF}} = q \frac{J \langle \sigma \rangle}{\mu} \,.$$

(a) Für die mittlere Magnetisierung des Systems ergeben sich nun zwei Ausdrücke. Einerseits gilt

$$\langle D \rangle = \mu \left\langle \sum_{j=1}^{N} \sigma_j \right\rangle = N \mu \langle \sigma \rangle \,.$$

Andererseits gilt aber die allgemeine Formel

$$\langle D \rangle = -\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_{N,T} .$$

Berechne die kanonische Zustandssumme und die freie Energie in der Molekularfeldnäherung. Benutze dein Ergebnis um die Konsistenzbedingung

$$\langle \sigma \rangle = \tanh\left[\beta\mu\left(\frac{qJ}{\mu}\langle \sigma \rangle + B\right)\right]$$

herzuleiten, die benutzt werden kann um $\langle \sigma \rangle$ zu bestimmen.

Substituiere nun $x = \beta qJ \langle \sigma \rangle + \beta\mu B$. Dann ist die Konsistenzbedingung

$$\frac{1}{\beta qJ}(x - \beta\mu B) = \tanh x .$$

Die Lösungen sind also durch die Schnittpunkte der Geraden $\frac{1}{\beta qJ}(x - \beta\mu B)$ mit der Funktion $\tanh x$ gegeben.

(b) Betrachte den Fall $B = 0$. Wie viele Lösungen für x gibt es oberhalb beziehungsweise unterhalb der kritischen Temperatur $T_\mathrm{c} = \frac{qJ}{k}$? Was bedeutet dies für die möglichen Werte von B_MF?

–Hausübungen–

H 5.1 Eindimensionales Ising-Modell *(3+3+3+3=12) Punkte*

Hier soll die eindimensionale Version des Ising-Modells betrachtet werden. Der Hamiltonoperator ist dann gegeben durch

$$H = -J\sum_{j=1}^{N}\sigma_j\sigma_{j+1} - \mu B\sum_{j=1}^{N}\sigma_j .$$

Zur Vereinfachung sei das lineare Gitter zu einem Kreis mit periodischer Randbedingung geschlossen, das heißt $\sigma_{N+1} = \sigma_1$.

(a) Die Matrixelemente der *Transfermatrix* T seien definiert als

$$\langle \sigma_i | T | \sigma_j \rangle = \exp\left(\beta\left[J\sigma_i\sigma_j + \frac{\mu B}{2}(\sigma_i + \sigma_j)\right]\right) .$$

Zeige, dass die kanonische Zustandssumme $Z = \sum_{\{\sigma_i = \pm 1\}} \exp\left[-\beta H(\{\sigma_i\})\right]$ durch

$$Z = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \langle \sigma_1 | T^N | \sigma_1 \rangle = \mathrm{Sp}\left(T^N\right)$$

gegeben ist.
Tipp: Da die Zustände $|\pm 1\rangle$ ein vollständiges System bilden, gilt die Vollständigkeitsrelation $\sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma\rangle\langle\sigma| = 1$.

(b) Weise dem Spin $\sigma = 1$ den Einheitsvektor $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und dem Spin $\sigma = -1$ den Einheitsvektor $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ zu, sodass T die Form

$$T = \begin{pmatrix} \exp\{\beta(J+\mu B)\} & \exp\{-\beta J\} \\ \exp\{-\beta J\} & \exp\{\beta(J-\mu B)\} \end{pmatrix}$$

annimmt. Berechne die Eigenwerte von T und werte die Zustandssumme Z explizit aus.

(c) Die *mittlere Magnetisierung* sei definiert als

$$\langle D \rangle = -\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_{T,N} .$$

Berechne die freie Energie F und zeige, dass das System bei abgeschalteter Wechselwirkung der Spins in einen paramagnetischen Zustand übergeht, das heißt die mittlere Magnetisierung bei abgeschaltetem Magnetfeld verschwindet. Wie verhält sich die Magnetisierung bei eingeschaltetem Magnetfeld in den Grenzwerten $T \to 0$ und $T \to \infty$?

(d) Zeige, dass bei eingeschalteter Wechselwirkung der Spins für die mittlere Magnetisierung

$$\langle D \rangle = N\mu \frac{\sinh \beta\mu B}{\sqrt{\exp\{-4\beta J\} + \sinh^2 \beta\mu B}} \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N}$$

gilt, wobei $\lambda_{1,2}$ die in (b) berechneten Eigenwerte von T sind. Wie verhält sich $\langle D \rangle$ im Fall $(\beta\mu B) \to 0$?

H 5.2 Ultrarelativistisches Gas *(5+3=8) Punkte*

Wir wollen mithilfe des kanonischen Ensembles die thermodynamischen Eigenschaften eines ultrarelativistischen klassischen Gases berechnen. Ein solches Gas besteht aus masselosen Teilchen die sich mit Lichtgeschwindigkeit bewegen. Es gilt dann die relativistische Energie-Impuls Beziehung

$$\epsilon = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} = |p|c .$$

Die Hamiltonfunktion ist gegeben durch

$$H(\{q_i\}, \{p_i\}) = \sum_{i=1}^{N} |p_i|c$$

und die kanonische Zustandssumme ist

$$Z(T,V,N) = \frac{1}{N!h^{3N}} \int \mathrm{d}^{3N}q\, \mathrm{d}^{3N}p \exp\left\{-\beta \sum_{i=1}^{N} |p_i|c\right\} .$$

(a) Zeige, dass

$$Z(T,V,N) = \frac{1}{N!}\left(8\pi V\left(\frac{kT}{hc}\right)^3\right)^N .$$

Tipp: Erinnere dich an die Integraldarstellung der Gamma-Funktion von Zettel 2: $\Gamma(n) = \int_0^\infty t^{n-1}\mathrm{e}^{-t}\mathrm{d}t$

(b) Benutze Stirlings Formel um die freie Energie F sowie das chemische Potential μ zu berechnen und zeige die Zustandsgleichungen des ultrarelativistischen Gases

$$\begin{aligned} pV &= NkT\,, \\ E &= 3NkT\,. \end{aligned}$$