UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Matthias Fuchs
Raum P 907, Tel. (07531)88-4678
E-mail: matthias.fuchs@uni-konstanz.de

Übungen zur Statistischen Mechanik
Wintersemester 2005/06

Übungsblatt 2, Ausgabe 31.10.2005, abzugeben bis 07.11.2005
Besprechung in der Zentralübung am 07.11.2005.

11. **Zwei–Niveausystem (5 Punkte)**

a) In einem Zwei–Niveausystem kann der allgemeine Dichteoperator geschrieben werden als:

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \boldsymbol{\sigma}).$$

Zeigen Sie, dass die sogenannte Informationsentropie S gegeben ist durch:

$$S = -Sp\ \{\rho \ln(\rho)\} = \left(\frac{1+r}{2} \ln\left(\frac{2}{1+r}\right) + \frac{1-r}{2} \ln\left(\frac{2}{1-r}\right) \right),$$

wobei $r = |\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle|$ und $|r| \leq 1$. Diskutieren Sie S (z.B. graphisch).

b) In einem magnetischen Feld $\mathbf{B}(t)$ nimmt der Hamiltonoperator eines Spins die Form an:

$$H = -\gamma\, \mathbf{B} \cdot \mathbf{S},$$

wobei γ eine Konstante ist. Leiten Sie aus der von–Neumann Gleichung ab, dass der Spin um das magnetische Feld präzediert:

$$\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \boldsymbol{\omega} \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle,$$

Hier ist $\boldsymbol{\omega} \propto \mathbf{B}$. Zeigen Sie damit, dass trotz der Präzession die Entropie erhalten bleibt:

$$\frac{d}{dt} S = -\frac{d}{dt} Sp(\rho \ln(\rho)) = 0.$$

12. **Zustandsumme des Zwei–Niveausystems (5 Punkte)**
Die Funktion Z, die sich ergibt aus

$$Z = Sp\ \exp(-\beta H)$$

heißt Zustandsumme und ist eine der zentralen Größen der Statistischen Mechanik. β ist ein positiver Parameter, der die Temperatur widerspiegelt und H ist der Hamiltonoperator des Systems.

a) Berechnen Sie Z auf zwei unterschiedliche Weisen für den Hamiltonoperator eines Zwei–Niveausystems:

$$H = -t\sigma_x - h\sigma_z$$

Hinweis Verwenden Sie einmal $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$, die Eigenschaft der Pauli Matrizen, und entwickeln Sie die Exponentialfunktion in einer Taylorreihe. Ein anderer allgemeinerer Weg verwendet die Eigenwertdarstellung von H.

b) Diskutieren Sie die Funktion $Z(\beta t, \beta h)$.

13. **Virialtheorem (4 Punkte)**
Zum Virialsatz: Man zeige (für ein Teilchen im eindimensionalen Fall), dass für Dichteoperatoren, die stationär sind ($d\rho/dt = 0$), der Virialsatz

$$Sp\left[(p^2/m - x\partial V/\partial x)\rho\right] = 0$$

gilt, wobei $V(x)$ das Potential ist.
Hinweis: Man gehe aus von der Beziehung $Sp(px\,[H,\rho]) = 0$, die gilt, wenn $\rho = \rho(H)$ ist.

a) Man bestimme das Verhältnis von mittlerer kinetischer und potentieller Energie beim harmonischen Oszillator und bei Teilchen mit Coulombwechselwirkung oder Gravitationswechselwirkung nach dem Virialsatz.

b) Wie würde die Gesamtenergie eines Systems, bei dem nur Gravitationskräfte wirken, im Rahmen der klassischen Näherung im Gleichgewicht von der Temperatur T abhängen?

14. **Spinwellen (Magnonen) (8 Punkte)**
Betrachten Sie eine eindimensionale Kette von N Spins, welche zur Vereinfachung zu einem Ring geschlossen sein soll (periodische Randbedingung). Ein Mikrozustand dieser Spinkette könnte z.B. lauten: $|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$. Wenn nur Nächstnachbarwechselwirkungen auftreten lautet der Hamiltonoperator:

$$H = -A\sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_{n+1}$$

a) Die niedrigsten Eigenwerte dieses Hamiltonoperators können leicht gefunden werden indem H mit dem Spinaustauschoperator geschrieben wird:

$$p_{n,n+1} = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_{n+1}).$$

Betrachten Sie die Wirkung von $p_{n,n+1}$ auf einen beliebigen Zustand.
Hinweis Zeigen Sie zuerst, dass die Spins mit $n' \neq n,\ n+1$ nicht verändert werden.
Zeigen Sie dann, dass die beiden Spins n und $n+1$ gedreht werden.
Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator geschrieben werden kann als:

$$H = NA - 2A\sum_{n=1}^{N} p_{n,n+1}.$$

b) Wenn $A > 0$ ist, weist das System ferromagnetische Wechselwirkungen auf, welche benachbarte Spins parallel anordnen möchten. Bestimmen Sie damit den Grundzustand des Systems. (Wieviele verschiedene gibt es? Wählen Sie einen davon.) Berechnen Sie den Energiewartungswert $\langle H\rangle$ (Grundzustandsenergie) in diesem Zustand.

c) Wir interessieren uns nun für die ersten angeregten Zustände. Es bietet sich an, die Energie von der Grundzustandsenergie aus zu messen: $H_* = H + NA$. Mit der Vermutung, dass im ersten angeregten Zustand alle Spins in dieselbe Richtung weisen bis auf einen, definieren wir $|\psi_n\rangle$, als den Zustand, in dem der n–te Spin gedreht ist. Mit der

Annahme, dass die gesuchten angeregten Zustände, mit niedrigen Anregungsenergien geschrieben werden können als:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N} a_n |\psi_n\rangle$$

sollen die Eigenwerte E_l von H_* bestimmt werden. Zeigen Sie, dass diese folgende Gleichungen erfüllen:

$$E_l a_n = -2A(a_{n+1} + a_{n-1} - 2a_n).$$

Schreiben Sie $a_n = \exp(in\delta)$ und verwenden Sie die periodische Randbedingung $(a_{N+1} = a_1)$, um zu zeigen:

$$E_l = 8A \sin^2(\frac{\pi l}{N}),$$

für ganzzahlige l.

d) Ein Wellenvektor kann durch Einführung eines Gitterabstandes a zwischen den Spins definiert werden über: $k = (2\pi l)/(Na)$. Leiten Sie hiermit die Dispersionsrelation der Spinwellen ab:

$$E = 4A(1 - \cos(ka))$$

und diskutieren Sie den Grenzfall $k \to 0$. Die Koeffizienten a_n beschreiben die Amplituden der Spinwellen, die auch Magnonen heißen.