Vorbemerkung

Dies ist ein abgegebener Übungszettel aus dem Modul physik521.

Dieser Übungszettel wurde nicht korrigiert. Es handelt sich lediglich um meine Abgabe und keine Musterlösung.

Alle Übungszettel zu diesem Modul können auf http://martin-ueding.de/de/university/bsc_physics/physik521/ gefunden werden.

[disclaimer]

physik521 – Übung 11

Martin Ueding — mu@martin-ueding.de
Paul Manz
Lino Lemmer — l2@uni-bonn.de

2014-07-07

1

Hier fehlen noch Inhalte.

2

Hier fehlen noch Inhalte.

3 Heisenberg-Modell und reduzierte Dichtematrix

3.1

Gegeben ist der Hamiltonian

$$H = J\, \boldsymbol{S}^1 \cdot \boldsymbol{S}^2 \qquad J > 0$$

Es gilt zu zeigen, dass:

$$H = \frac{J}{2}(\boldsymbol{S})^2 + C = \frac{J}{4}(S_+S_- + S_-S_+ + 2(S_3)^2) + C$$

Wir beginnen mit der ersten Gleichung:

$$\begin{aligned}
\frac{J}{2}(\boldsymbol{S}^2) &= \frac{J}{2}\sum_i (S_i^1 + S_i^2)^2 \\
&= \frac{J}{2}\left(2S_1^1S_1^2 + 2S_2^1S_2^2 + S_3^1S_3^2 + \sum_{i,j}(S_i^j)^2\right) \\
&= \frac{J}{2}\left(2\,\boldsymbol{S}^1\cdot\boldsymbol{S}^2 + \sum_{i,j}(S_i^j)^2\right) \\
(S_i^j)^2 &= \frac{1}{4}\mathbb{1} \\
\Longrightarrow J\,\boldsymbol{S}^1\cdot\boldsymbol{S}^2 &= \frac{J}{2}(\boldsymbol{S})^2 + C
\end{aligned}$$

Die zweite Gleichung:

$$\begin{aligned}
S_+S_- &= (S_1 + iS_2)(S_1 - iS_2) \\
&= (S_1)^2 + (S_2)^2 - iS_1S_2 + iS_2S_1 \\
&= (S_1)^2 + (S_2)^2 - i[S_1, S_2] \\
&= (S_1)^2 + (S_2)^2 + S_3
\end{aligned}$$

Analog finden wir:

$$S_-S_+ = (S_1)^2 + (S_2)^2 - S_3$$

Es folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{J}{4}(S_+S_- + S_-S_+ + 2(S_3)^2) &= \frac{J}{4}(2(S_1)^2 + 2(S_2)^2 + 2(S_3)^2) \\
&= \frac{J}{2}(\boldsymbol{S})^2
\end{aligned}$$

Die Eigenzustände dieses Hamiltonian lassen sich durch die Einteilchenspinoren mithilfe der Clebsch-Gordan-Koeffizienten darstellen. Wir erhalten:

$$\begin{aligned}
|S = 1, S_3 = +1\rangle &= |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\
|1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\
|1, -1\rangle &= |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\
|0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle
\end{aligned}$$

Der Singulettzustand hat einen Energieeigenwert von $E_0 = 0$ die Triplettzustände haben alle den Eigenwert $E_1 = 1(1+1)\frac{J}{2} = J$. Wir können die Zustände als kanonisches Ensemble auffassen, da die Teilchenzahl fest ist. Dann gilt für die Wahrscheinlichkeitsverteilung:

$$h_i = \frac{1}{Z_c}\mathrm{e}^{-\beta E_i}$$

mit

$$Z_c = 1 + 3\mathrm{e}^{-\beta J}$$

.

Berechne in dieser Basis den Dichteoperator:

$$\begin{aligned} W_c &:= \sum_i h_i \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right| \\ &= \frac{1}{Z_c}\left(\left|0,0\right\rangle\left\langle 0,0\right| + \mathrm{e}^{-\beta J}\sum_{S_z}\left|1,S_z\right\rangle\left\langle 1,S_z\right|\right) \end{aligned}$$

3.2

Berechne die reduzierte Dichtematrix

$$\begin{aligned} W_S &= \sum_{S_z^2}\left\langle S^2, S_z^2 \middle| W_c \middle| S^2, S_z^2\right\rangle \\ &= \left\langle\uparrow_R\right| W_c \left|\uparrow_R\right\rangle + \left\langle\downarrow_R\right| W_c \left|\downarrow_R\right\rangle \\ \left\langle\uparrow_R\right| W_c \left|\uparrow_R\right\rangle &= \frac{1}{Z_c}\left(\left\langle\uparrow_R \middle| 0,0\right\rangle\left\langle 0,0 \middle| \uparrow_R\right\rangle\right) \\ &+ \frac{\mathrm{e}^{-\beta J}}{Z_C}\left(\left\langle\uparrow_R \middle| 1,-1\right\rangle\left\langle 1,-1 \middle| \uparrow_R\right\rangle + \left\langle\uparrow_R \middle| 1,0\right\rangle\left\langle 1,0 \middle| \uparrow_R\right\rangle + \left\langle\uparrow_R \middle| 1,+1\right\rangle\left\langle 1,+1 \middle| \uparrow_R\right\rangle\right) \\ &= \frac{1}{Z_c}\left(\frac{1}{2}\left|\downarrow_S\right\rangle\left\langle\downarrow_S\right| + \mathrm{e}^{-\beta J}\left(\left|\uparrow_S\right\rangle\left\langle\uparrow_S\right| + \frac{1}{2}\left|\downarrow_S\right\rangle\left\langle\downarrow_S\right|\right)\right) \\ \left\langle\uparrow_R\right| W_c \left|\uparrow_R\right\rangle &= \frac{1}{Z_c}\left(\frac{1}{2}\left|\uparrow_S\right\rangle\left\langle\uparrow_S\right| + \mathrm{e}^{-\beta J}\left(\left|\downarrow_S\right\rangle\left\langle\downarrow_S\right| + \frac{1}{2}\left|\uparrow_S\right\rangle\left\langle\uparrow_S\right|\right)\right) \\ \Longrightarrow\; W_S &= \frac{1}{Z_C}\left(\frac{1}{2}\left|\downarrow_S\right\rangle\left\langle\downarrow_S\right| + \frac{1}{2}\left|\uparrow_S\right\rangle\left\langle\uparrow_S\right| + \mathrm{e}^{-\beta J}\left(\left|\frac{3}{2}\downarrow_S\right\rangle\left\langle\downarrow_S\right| + \frac{3}{2}\left|\uparrow_S\right\rangle\left\langle\uparrow_S\right|\right)\right) \end{aligned}$$

3.3

Für $T \longrightarrow 0$ verschwindet $\mathrm{e}^{-\beta J}$. Aus der Dichtematrix wird dann:

$$W_C = \left|0,0\right\rangle\left\langle 0,0\right|$$

also der Projektor auf den Grundzustand. Aus der reduzierten Dichtematrix wird:

$$W_S = \frac{1}{2}\left|\downarrow_S\right\rangle\left\langle\downarrow_S\right| + \frac{1}{2}\left|\uparrow_S\right\rangle\left\langle\uparrow_S\right|$$

Im ersten Fall ist als Energiezustand nur der Grundzustand möglich. Für den Entartungsgrad gilt dann $\Omega(T \to 0) = 1$ für die Entropie also

$$S = k_\mathrm{B}\ln\Omega = 0$$

Im Zweiten Fall gilt:

$$\begin{aligned} \Omega(T \to 0) &= 2 \\ S &= k_\mathrm{B} \ln 2 \end{aligned}$$