

# Lösungssammlung Übungsblätter Theo IV

## Blatt 10

Luc Kusters

WS 19/20

Die Lösungen die hier zusammengefasst wurden, kommen größtenteils von Oliver Liang Wen, obwohl ich selber einige Sachen hinzugefügt habe. Ich möchte mich insbesondere für seine gute und regelmäßige festlegung der Übungsgruppenmitschriften bedanken, ohne welches dieses Projekt gar nicht möglich wäre.

Die Lösungen gehören zu den Übungsblätter der von V. Meden gehaltene Vorlesung zur theoretische Physik IV: Statistische Physik und Thermodynamik an der RWTH Aachen, WS19/20.

**Weder absolute Vollständigkeit noch absolute Korrektheit kann garrantiert werden!** Bei Anmerkungen, Fragen, Korrekturen oder sonstiges, könnt ihr mich gerne per email erreichen:

[ljbkusters@gmail.com](mailto:ljbkusters@gmail.com)

1. **Eindimensionales Isingmodell** Betrachte eine 1D Kette von Spins  $\sigma_i = \pm 1$  unter periodische Randbedingungen. Die Energie einer Spinkonfiguration ist gegeben durch

$$E_r = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \mu_0 B \sum_i \sigma_i$$

- a) Zeige dass die kanonische Zustandssumme in der untere Form geschrieben werden kann. Gebe explizit die Transfermatrix an.

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{-\beta \sum_i \sigma_i (-J \sigma_{i+1} - \mu_0 B)} \\ &\quad \text{Definiere: } g = \beta J \quad h = \beta \mu_0 B \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{g \sigma_1 \sigma_2} e^{g \sigma_2 \sigma_3} \dots e^{g \sigma_N \sigma_1} e^{h \sigma_1} e^{h \sigma_2} \dots e^{h \sigma_N} \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{g \sigma_1 \sigma_2} e^{h \sigma_1} \dots e^{g \sigma_N \sigma_1} e^{h \sigma_N} \\ &\quad \text{Definiere: } \hat{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} e^{g+h} & e^{-g} \\ e^{-g} & e^{g-h} \end{pmatrix} \quad T(\sigma_i, \sigma_j) = \langle \sigma_i | \hat{\mathbf{T}} | \sigma_j \rangle \\ &\quad \text{mit } |\sigma_i\rangle = |\pm\rangle = (1, 0)^T \text{ oder } (0, 1)^T \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_N, \sigma_1) = \text{Sp}(\hat{\mathbf{T}}^N) \end{aligned}$$

- b) Berechne die kanonische Zustandssumme im thermodynamischen Limes  $N \gg 1$ . Vernachlässige Terme der Ordnung  $e^{-N}$ .

Redefiniere  $T(\sigma_i, \sigma_j) = T_{(ij)}$  für vereinfachte Notation.

$$Z = T_{(12)} T_{(23)} \dots T_{(N1)} = \text{Sp}(\hat{\mathbf{T}}^N) \quad \text{falls } \hat{\mathbf{T}} \text{ diagonalisiert}$$

Jetzt gilt aber dass der Spur invariant ist unter unitäre Transformationen.

$$\hat{\mathbf{T}}^N = U \hat{\hat{\mathbf{T}}}^N U^{-1} \quad \text{mit } \hat{\hat{\mathbf{T}}} \text{ diagonal}$$

Dabei gilt natürlich dass  $\text{Sp}(\hat{\hat{\mathbf{T}}}) = \lambda_1 + \lambda_2$  wobei  $\lambda_{1,2}$  die Eigenwerte von  $\hat{\hat{\mathbf{T}}}$  sind.

Man sucht nun also die Eigenwerte

$$\det(\hat{\mathbf{T}} - \lambda \mathbb{1})$$

und findet dass

$$\lambda_{\pm} = e^g \cosh(h) \pm e^g \sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4g}}$$

Es folgt nun dass

$$\hat{\hat{\mathbf{T}}} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \hat{\hat{\mathbf{T}}}^N = \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix}$$

Es folgt nun für  $\text{Sp} \hat{\mathbf{T}} = \lambda_+^N + \lambda_-^N = Z$  wegen  $\lambda_+ > \lambda_-$  folgt für  $N \rightarrow \infty$   $Z \rightarrow \lambda_+^N$

$$\Rightarrow Z = e^{Ng} \left( \cosh h + \sqrt{\sinh^2 h + e^{-4g}} \right)^N$$

c) Zeige dass die freie Energie gegeben ist durch

$$F = -NJ - k_B T N \ln \left( \cosh \beta \mu_0 B + \sqrt{\sinh^2 \beta \mu_0 B + e^{-4\beta J}} \right)$$

$$F = -k_B T \ln Z = -Nk_B T g - Nk_B T \ln \left( \cosh h + \sqrt{\sinh^2 h + e^{-4g}} \right)$$

$$\text{mit } g = \frac{J}{k_B T} \text{ und } h = \frac{\mu_0 B}{k_B T}$$

d) Betrachte zunächst den Fall ohne äußeres Magnetfeld. Berechne  $F$ ,  $S$ , und spez. Wärme  $C$ . Ist der 3. Hauptsatz erfüllt? Wie verhält sich  $C$  bei kleine und große Temperaturen?

$$B = 0 \Rightarrow h = 0 \Rightarrow \sinh(h) = 0 \text{ und } \cosh(h) = 1$$

$$\begin{aligned} F &= -NJ - k_B T N \ln \left( 1 + \sqrt{0 + e^{-4\beta J}} \right) \\ &= -NJ - k_B T N \ln \left( 1 + e^{-2\beta J} \right) \\ &= -NJ - k_B T N \ln \left( e^{-\beta J} \left[ e^{\beta J} + e^{-\beta J} \right] \right) \\ &= -\cancel{NJ} + \cancel{NJ} - Nk_B T \ln(2 \cosh \beta J) \\ &= -Nk_B T \ln(2 \cosh \beta J) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S &= -\frac{\partial F}{\partial T} \\ &= -Nk_B \ln(2 \cosh(\beta J)) - \beta J \tanh(\beta J) \\ &= Nk_B \left[ \ln \left( 2 \cosh \left( \frac{J}{k_B T} \right) \right) - \frac{J}{k_B T} \tanh \left( \frac{J}{k_B T} \right) \right] \\ 2 \cosh(J/k_B T) &= e^{-J/k_B T} + e^{J/k_B T} \xrightarrow{T \rightarrow 0} e^{J/k_B T} \\ &\Rightarrow \ln(2 \cosh(J/k_B T)) \xrightarrow{T \rightarrow 0} J/k_B T \\ \ln(2 \tanh(J/k_B T)) &\xrightarrow{T \rightarrow 0} 1 \\ &\Rightarrow S \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0 \end{aligned}$$

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{J^2 N}{k_B T^2} \frac{1}{\cosh^2(J/k_B T)}$$

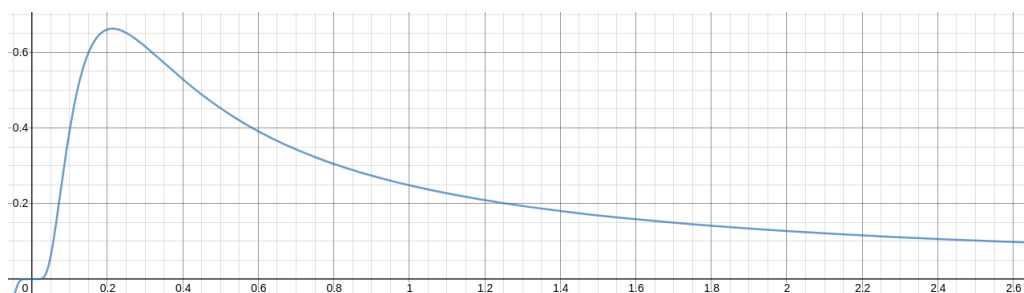


Abbildung 1: Skizze von  $C(T)$ . Man sieht dass  $C$  für  $T$  groß und klein nach 0 geht.

- e) Gebe  $F$  für  $J > 0$  und  $B \neq 0$  im Grenzfall  $T \rightarrow 0$  an. Wie ist die bevorzugte Ausrichtung der Spins?

$$\begin{aligned}
 F &= -NJ - k_B T N \ln \left( \cosh \beta \mu_0 B + \sqrt{\sinh^2 \beta \mu_0 B + \underbrace{e^{-4\beta J}}_{\rightarrow 0}} \right) \\
 &\stackrel{T \rightarrow 0}{\approx} -NJ - k_B T N \ln \left( \underbrace{\cosh(x) + \sinh(x)}_{=e^x} \right) \quad x = \beta \mu_0 B \\
 &= -NJ - N \mu_0 B
 \end{aligned}$$

Die freie Energie wird minimiert falls die Spins sich mit dem Magnetfeld mit ausrichten ( $J > 0$ ).

- f) Gebe  $F$  für  $J < 0$  und  $\mu_0 B < |J|$  im Grenzfall  $T \rightarrow 0$  an. Wie ist die bevorzugte Ausrichtung der Spins?

$$\begin{aligned}
 &\sinh^2(\beta \mu_0 B) + e^{4\beta |J|} \stackrel{\beta \rightarrow \infty}{\rightarrow} e^{4\beta |J|} \\
 &\cosh(\beta \mu_0 B) + e^{2\beta |J|} \stackrel{\beta \rightarrow \infty}{\rightarrow} e^{2\beta |J|} \\
 &F \rightarrow N|J| - 2N|J| = -N|J| = NJ
 \end{aligned}$$

Die freie Energie minimiert sich für Spins gegen Magnetfeld ausgerichtet ( $J < 0$ ).

- g) Gebe  $F$  für hohe Temperaturen  $J \ll k_B T$  an. Vergleiche das Ergebnis mit Aufgabe 6.1.

$$\begin{aligned}
 e^{-4\beta J} &\rightarrow 0 \quad \sinh(\beta \mu_0 B) \rightarrow 0 \quad \cosh(\beta \mu_0 B) \rightarrow 1 \\
 \ln(\dots) &\rightarrow \ln(1) = 0 \\
 F &\rightarrow -NJ
 \end{aligned}$$

Die Ergebnisse sind sehr ähnlich.

## 2. Korrelationsfunktionen im Isingmodell

Hier betrachten wir wieder ein 1D Isingmodell mit  $B = 0$ .

- a) Zeige dass die Korrelationsfunktionen in der untere Form geschrieben werden kann, mit  $\sigma^z$  z-Paulimatrix.

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp}(T^{i-1} \sigma^z T^{j-i} \sigma^z T^{N-j+1}) \quad \text{mit} \quad T = \begin{pmatrix} \exp(\beta J) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J) \end{pmatrix}$$

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \frac{1}{Z} = \sum \dots \sum \sigma_i \sigma_j T(\sigma_1, \sigma_2) \dots T(\sigma_N, \sigma_1)$$

$$\sigma_i = \sigma^z(\sigma_i, \sigma_i) = \langle \sigma_i | \sigma^z | \sigma_i \rangle = \pm 1$$

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum \dots \sum T_{(1,2)} \dots (\sigma_z T)_{(i-1,i)} \dots (\sigma_z T)_{(j-1,j)} \dots T_{(N,1)}$$

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp}(\underbrace{T^{i-1}}_{(1)} \sigma^z \underbrace{T^{j-i}}_{(2)} \sigma^z \underbrace{T^{N-j+1}}_{(3)})$$

Wobei (1) die Transfermatrizen bis i, (2) die Transfermatrizen zwischen i und j und (3) die Transfermatrizen nach j.

- b) Drücke  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$  mit Hilfe der Eigenwerte  $\lambda_a$  zu Eigenvektoren  $|a\rangle$  der Transfermatrix T aus.

$$\det(T - \lambda \mathbb{1}) = (e^{\beta J} - \lambda)^2 - e^{-2\beta J} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\lambda_1 = 2 \cosh(\beta J) \quad \lambda_2 = 2 \sinh(\beta J)$$

$$\text{mit Eigenzustände } |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1)^T \text{ und } |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1)^T$$

Schreibe  $\sigma^z$  in der Basis  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$

$$\begin{aligned} \sigma^z &= \sum_i \lambda_i |z_i\rangle \langle z_i| \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| \sum_i \lambda_i |z_i\rangle \langle z_i| \sum_a |a\rangle \langle a| \\ &= \sum_{i,a,a'} \lambda_i \langle a'| z_i \rangle \langle z_i | a \rangle |a'\rangle \langle a| \\ &= |2\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 2| \end{aligned}$$

$$\left( T = \sum_a |a\rangle \langle a| \quad \langle i|j\rangle = \delta_{ij} \right)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \lambda_i^N \left( \lambda_1^{i-j} \lambda_2^{j-1} + \lambda_1^{j-i-N} \lambda_2^{N+i-j} \right) \\ &= \frac{\lambda_1^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \left( \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{j-1} + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{N+i-j} \right) \end{aligned}$$

Dabei ist  $\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \tanh(\beta J) \leq 1$

- c) Zeige, dass  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$  für  $N \rightarrow \infty$  die untere Form besitzt. Skizziere  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$  als Funktion von  $x = (j - i)$  für  $J > 0$  und  $J < 0$

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \left( \tanh \frac{J}{k_B T} \right)^{j-i}$$

für  $N \rightarrow \infty$  geht  $\frac{\lambda_1^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \rightarrow \frac{\lambda_1^N}{\lambda_1^N} = 1$  und  $\left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{N+i-j} \rightarrow 0$

$$\Rightarrow \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = (\tanh \beta J)^{j-i}$$

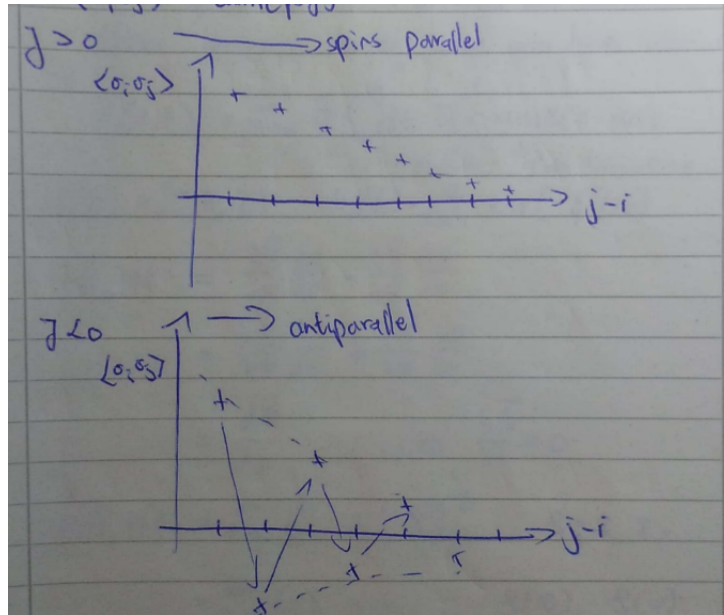


Abbildung 2: Skizze für  $J > 0$  und  $J < 0$

- d) Betrachte die spontane Magnetisierung  $\langle \sigma_i \rangle$ . Warum hängt  $M$  nicht vom Gitterplatz ab? Verwende die Beziehung  $M^2 = \lim_{j \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle$  und das Ergebnis aus (c) um die spontane Magnetisierung für  $T > 0$  und  $T = 0$  zu berechnen. Gibt es bei endlichen Temperaturen einen Phasenübergang?

$$M^2 = \lim_{j \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \begin{cases} \pm 1 & T = 0 \\ 0 & T > 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$$

Für  $T > 0$  keinen Phasenübergang.

- e) Zeige, dass die Korrelationsfunktion im ferromagnetischen Fall die Form  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \exp\{-(j - i)/\xi\}$  hat. Berechne  $\xi$  und gebe eine Physikalische Interpretation für diese "Länge". Was erhält man für  $T \rightarrow 0$ .

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \tanh(\beta J)^{j-i} \\ &= \exp(-(j - i) \ln \tanh(\beta J)) \\ \xi &= 1 / \ln(\tanh(\beta J)) \end{aligned}$$

für  $T \rightarrow 0$  divergiert  $\xi$  und sind alle Spins korreliert.  $\xi$  repräsentiert eine mittlere Interaktionsabstand, also für  $T \rightarrow 0$  interagieren alle Spins miteinander.

3. **Stationarität der Phasenraumdichte** Mit der Ergodenhypothese muss sich auch die Phasenraumdichte selbst als Zeitmittelwert ausdrücken lassen. Man erhält so die zeitlich gemittelte Dichte von Trajektorien zu

$$\bar{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}(t))$$

Erfüllt diese Dichte die Stationaritätsbedingung  $\{\bar{\rho}, H\} = 0$ ?

$$\delta(\xi) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} D_\sigma(\xi) \quad D_\sigma(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-\xi^2/2\sigma^2)$$

$$\begin{aligned} \{\bar{\rho}, H\} &= \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} \\ &= \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial p} \frac{dp}{dt} \\ &= \frac{d\bar{\rho}}{dt} \quad \text{mit} \quad \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} = 0 \\ &= \lim_{\sigma \rightarrow 0} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} [\rho]_0^\tau \quad \rho = \delta_x \delta_p \\ &= \lim_{\sigma \rightarrow 0} (0) = 0 \quad \rho(\tau) - \rho(0) \end{aligned}$$