# Theoretische Physik 5: Thermodynamik und Statistische Physik

WiSe 2022 / 2023 – Prof. Marc Wagner

Laurin Pannullo: pannullo@itp.uni-frankfurt.de
Marc Winstel: winstel@itp.uni-frankfurt.de

## Aufgabenblatt 11

*Abgabe am 20.01.2023. Besprechung in den Tutorien vom 23.01. - 27.01.2023*

### Aufgabe 1 [*Ausrichtung von Elektronenspins unter Coulombwechselwirkung*] (5 Pkt.)

Wir haben in vorherigen Übungsaufgaben das ideale Spinmodell studiert, welches Spins als nicht-wechselwirkend beschreibt. Betrachtet man zusätzlich Wechselwirkungen zwischen den Spins und stellt man sich diese als Elementarmagneten vor, könnte man zunächst vermuten, dass antiparallel ausgerichtete Spins energetisch günstig sind. Das Gegenteil ist aber bei typischen Systemen der Fall. Der Grund hierfür ist, dass in einem realen Kristall die Coulombwechselwirkung in Kombination mit der Austauschsymmetrie der Elektronen gegenüber der magnetischen Wechselwirkung der Elektronenspins dominiert. Wir studieren diesen Effekt im Folgenden und verstehen dadurch, warum das Isingmodell, bei dem parallel ausgerichtete Spins energetisch günstig sind, ein sinnvolles Modell zur Beschreibung realer Kristalle darstellt.

Zeige dazu, dass die Coulombenergie $E_C = \langle\psi(1,2)|\frac{e^2}{|\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2}|}|\psi(1,2)\rangle$ zwischen zwei, benachbarten Elektronen mit paralleler Spinausrichtung geringer ist als die Coulombenergie zweier Elektronen mit antiparalleler Spinausrichtung. Nimm dafür an, dass sich die Elektronen, gelabelt durch Indizes $1, 2$, räumlich zentriert an benachbarten Gitterplätzen $\mathbf{r_a}, \mathbf{r_b}$ (z.B. die Gitterplätze in einem Kristall) befinden und die 1-Teilchen Ortswellenfunktionen reell und positiv sind und die Form $\phi_a(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}-\mathbf{r_a})$ bzw. $\phi_b(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}-\mathbf{r_b})$ haben. Die Wellenfunktion

$$\psi(1,2) = \varphi(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2})|SS_z\rangle \tag{1}$$

ist, wie in der Vorlesung diskutiert, antisymmetrisch unter Vertauschung von $1, 2$. Es kann $\langle\phi_a|\phi_b\rangle = 0$ für die Normierung von $\psi$ angenommen werden. Die Quantenzahl $S$ bildet den Eigenwert $S(S+1)$ des Betragsquadrats des Gesamtspins $\hat{\vec{S}}^2 = (\hat{\vec{s}}_1 + \hat{\vec{s}}_2)^2$, während $S_z$ der Eigenwert zu $\hat{S}_z = \hat{s}_{1,z} + \hat{s}_{2,z}$ ist. Der Operator $\hat{\vec{s}}_i$ bezeichnet den Spin des Elektrons $i$ und hat somit Eigenwert $s(s+1) = 3/4$, während der Operator $\hat{s}_{i,z}$ die $z$-Komponente des Elektronenspins von Elektron $i$ bezeichnet. $\varphi(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2})$ ist die Ortswellenfunktion des Gesamtsystems.

Drücke in deiner Rechnung $E_C$ als Funktion von Integralen über die Einteilchen-Ortswellenfunktion sowie von $\langle\hat{\vec{s}}_1 \cdot \hat{\vec{s}}_2\rangle$ aus. Motiviere mithilfe deiner Ergebnisse wie eingangs erläutert, inwiefern das Ising-Modell (bekannt aus Übungsblatt 3) eine angemessene Approximation der Wechselwirkung zwischen Elektronenspins in einem realen Kristall darstellt.

*Hinweis: Überlege dir, welche Symmetrieeigenschaften für die einzelnen Zustände $|SS_z\rangle$ gelten und wie die zugehörige Ortswellenfunktion aus den reellen Ortswellenfunktionen der einzelnen Elektronen konstruiert werden muss. Desweiteren ist es sinnvoll, sich die möglichen Kombinationen der Spinquantenzahlen zu überlegen.*

## Aufgabe 2 [*Dichteoperator*] `(2+3+2+3=10 Pkt.)`

In dieser Aufgabe betrachten wir den Dichteoperator, der bei Problemen der Quantenstatistik häufig Anwendung findet. Mit ihm lassen sich alle Erwartungswerte der verschiedenen statistischen Ensembles in kompakter Form ausdrücken.

Die Ensembles, die wir in der Quantenstatistik betrachten, werden durch sogenannte gemischte Zuständen beschrieben. Die notwendige Information um solche Zustände zu charakterisieren, sind die Wahrscheinlichkeiten $p_i$ mit der sich das System nach einer Messung in den Eigenzuständen $|\psi_i\rangle$ des entsprechenden Operators befindet. Der Dichteoperator $\hat{\rho}$ für einen gemischten Zustand ist gegeben durch

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i \, |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \, . \tag{2}$$

(i) Zeige zunächst die folgenden Eigenschaften des Dichteoperators

- (a) $\bar{A} = \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{A})$, wobei $\hat{A}$ der Operator ist, der der Messgröße $A$ zugeordnet ist.
- (b) $\hat{\rho} = \rho^\dagger$. Was sagt dies über die Eigenwerte des Dichteoperators aus?
- (c) $\mathrm{tr}\,\hat{\rho} = 1$.
- (d) $\langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle \geqslant 0$, wobei $|\phi\rangle$ ein beliebiger Zustand ist.

(ii) Wir betrachten nun jeweils ein mikrokanonisches, kanonisches und großkanonisches Ensemble.

- (a) Welche Zustände sind die angemessene Wahl für die $|\psi_i\rangle$?
- (b) Gib für jedes dieser drei Ensembles die Wahrscheinlichkeiten $p_i$ (basirend auf den bisherigen Kapiteln des Skripts zu den statistischen Ensemblen) und den Dichteoperator an.
- (c) Schreibe den Dichteoperator für das kanonische und großkanonische Ensemble so um, dass darin nicht mehr die Summen über die Zustände $|\psi_i\rangle$ auftreten.
- (d) Drücke die Zustandssummen der drei Ensembles mit Hilfe des Dichteoperators aus.

(iii) Motiviere ausgehend von der Definition der Entropie des klassischen mikrokanonischen Ensembles, dass die Entropie in allgemeiner Weise als

$$S = -k_B \, \mathrm{tr}\left(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\right) \tag{3}$$

definiert werden kann, d.h. zeige, dass sich Gl. (3) auf die entsprechende Gleichung für $S$ im Skript reduziert.

(iv) Wir betrachten als konkretes Beispiel einen 1-dimensionalen, quantenmechanischen harmonischen Oszillator. Benutze den Dichteoperator um die kanonische Zustandssumme und die freie Energie zu berechnen. Berechne weiterhin die Entropie, sowohl als Ableitung der freien Energie $S = -\partial F/\partial T$ als auch mit $S = -k_B \operatorname{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$, und überprüfe, dass die Ergebnisse übereinstimmen.

**Aufgabe 3** [*Varianz der Besetzungszahlen in Quantengasen*] `(5 Pkt.)`

Leite her, dass

$$\left(\Delta n_{(\mathbf{p},s_z)}\right)^2 = -k_B T \frac{\partial \bar{n}_{(\mathbf{p},s_z)}}{\partial \epsilon_{(\mathbf{p},s_z)}} \tag{4}$$

für die Varianz $\left(\Delta n_{(\mathbf{p},s_z)}\right)^2$ der Besetzungszahlen $n_{(\mathbf{p},s_z)}$ des idealen Fermigases und des idealen Bosegases gilt (vergleiche dazu Kapitel 3.2 im Skript). Berechne explizit die relative Schwankung

$$\sigma_{(\mathbf{p},s_z)} = \sqrt{\frac{\left(\Delta n_{(\mathbf{p},s_z)}\right)^2}{\bar{n}^2_{(\mathbf{p},s_z)}}} \tag{5}$$

für das ideale Fermi- und Bosegas.

Berechne nun $\bar{n}_{(\mathbf{p})}$ für die Maxwell-Boltzmann Verteilung[1]. Berechne hiervon ausgehend $\sigma_{(\mathbf{p})}$.

*Hinweis: Hierzu spaltet man zunächst die Summe in der großkanonischen Zustandssumme über $N$ in einzelne Summen über Besetzungszahlen $n_\lambda$ des Quantenzustands $\lambda$ auf, sodass ein ähnlicher Ausdruck wie für das Bosegas entsteht. Dabei muss allerdings die Ununterscheidbarkeit der Teilchen durch einen Faktor $1/(n_\lambda)!$ in den einzelnen Summen beachtet werden. Anschließend funktioniert die gesamte Rechnung analog zu denen der Quantengase.*

Diskutiere die Unterschiede zwischen den einzelnen Verteilungen, indem du die berechneten Ausdrücke $\sigma_{(\mathbf{p},s_z)}$ bzw. $\sigma_{(\mathbf{p})}$ für die jeweiligen Grenzwerte von $\bar{n}_{(\mathbf{p},s_z)}$ bzw. $\bar{n}_{(\mathbf{p})}$ betrachtest.

[1] Damit sind ununterscheidbare Teilchen gemeint, deren Wellenfunktion nicht symmetrisch bzw. antisymmetrisch unter Teilchenaustausch sein müssen.