13. Thermodynamische Größen von Paramagneten

Wir betrachten ein System aus N nicht miteinander wechselwirkenden Spin-$1/2$ Teilchen, die sich in inem statischen magnetischen Feld $\vec{B} = B_0\vec{e}_z$ befinden. Der Hamilton Operator ist dann gegeben durch

$$\hat{H} = -B_0\hat{M}^z = \mu_B B_0 \sum_{j=1}^{N} \hat{\sigma}^z \tag{1}$$

wobei $\hat{M}^z$ der Operator der Magnetisierung in z-Richtung ist und μ_B das Bohr-Magneton. Das Weiteren sei $\hat{\rho}_N$ die Dichtematrix des gesamten Systems der N Spins.

(a) Zeigen Sie, dass im Gleichgewicht und in einem homogenen system folgende Aussage gilt

$$U = \langle \hat{H} \rangle = N\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_1\hat{H}_1\} \tag{2}$$

mit $\hat{H}_1 = \mu_B B_0 \hat{\sigma}_1^z$ und $\hat{\rho}_1 = \mathrm{Tr}_{N-1}\{\hat{\rho}_N\}$ mit Tr die Spur auf die $N-1$ Spins. (1 Punkt)

(b) Gehen Sie von einer Boltzmann-Gibbs Verteilung der Spins aus. Die Dichtematrix eines einzelnen Spins ist dann gegeben durch

$$\hat{\rho}_1 = \frac{e^{\beta\epsilon_0}|+\rangle\langle+| + e^{-\beta\epsilon_0}|-\rangle\langle-|}{\mathcal{Z}_1}, \tag{3}$$

mit der Normierungskonstanten $\mathcal{Z}_1 = e^{\beta\epsilon_0} + e^{-\beta\epsilon}$ und $\epsilon_0 = \mu_B B_0$. Zeigen Sie, dass die Gesamtenergie U gegeben ist durch

$$U = -n\mu_B B_0 \frac{e^{2\beta\mu_B B} - 1}{e^{2\beta\mu_B B} + 1} \tag{4}$$

mit $\beta = 1/k_B T$, indem Sie explizit den Erwartungswert des Hamilton Operators $\langle \hat{H} \rangle$ bestimmen. Bilden Sie den Grenzwert $T \to 0$ und $T \ll \mu/BB_0/k_B$. Zeigen Sie weiterhin, dass der Erwartungswert der Magnetisierung in z-Richtung gegeben ist durch

$$\langle \hat{M}^z \rangle = N\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B_0}{k_B T}\right) \tag{5}$$

(1 Punkt)

(c) Benutzen Sie die explizite Form der Wahrscheinlichkeiten $p_\pm = e^{\mp\beta\epsilon_0}/\mathcal{Z}_1$ um folgende Formel für die Entropie S des Systems herzuleiten.

$$S = -Nk_B[p_+ \ln p_+ + p_- \ln p_-]. \tag{6}$$

(1 Punkt)

(d) Verwenden Sie die Formeln der Entropie S oder der Gesamtenergie U um eine Formel für die spezifische Wärme C herzuleiten. Hierbei gilt

$$C = \left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_{B_0} = T\left.\frac{\partial S}{\partial T}\right|_{B_0} = k_B N(\beta\mu_B B_0)^2 \operatorname{sech}^2(\beta\mu_B B_0). \tag{7}$$

Wie verhält sich die spezifische Wärme für Temperaturen in den Grenzfällen $T \ll \mu_B B_0/k_B$ und $T \gg \mu_B B_0/k_B$. Zeigen Sie, dass das Maximum der spezifischen Wärme $C(T)$ durch die Curie Temperatur $\theta = \mu_B B_0/k_B$ angenähert werden kann.
Hinweis: Sie dürfen verwenden, dass die Gleichung $x \tanh x = 1$ für $x > 0$ nur eine Lösung bei $x \approx 1.2$ besitzt.

(1 Punkt)

14. Klassische Approximation des Quantengases

Ein Gas aus Quantenteilchen der Masse m bei einer Dichte n und Temperatur T kann durch ein klassisches Gas angenähert werden, wenn der mittlere Abstand d zwischen den Teilchen, definiert als

$$d = \frac{1}{n^{1/3}}, \tag{8}$$

viel größer ist als die thermische de Broglie-Wellenlänge, nämlich $d \gg \lambda_{\text{th}}$. Bestimmen Sie für ein Gas aus $N = 10^{19}$ Teilchen, die in einem Volumen $V = 1\,\text{cm}^3$ eingeschlossen sind, den entsprechenden Teilchenabstand d und vergleichen Sie ihn mit der de Broglie-Wellenlänge eines Wasserstoffmoleküls bei $T \approx 290$ K: $\lambda_{\text{th}} \approx 0.72 \times 10^{-8}$ cm. Prüfen Sie also, ob die Bedingung, das Gas als klassisches System zu behandeln, erfüllt ist.

(1 Punkt)

15. Dichteoperator

Betrachten wir den Hilbertraum $\mathfrak{H}$, auf dem der Dichteoperator $\hat{\rho} : \mathfrak{H} \to \mathfrak{H}$ so definiert ist, dass wir ihn schreiben können als

$$\hat{\rho} = \sum_{\lambda} p_\lambda |\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda|, \tag{9}$$

wobei für alle λ die Vektoren $|\psi_\lambda\rangle$ normierte Zustände des Hilbertraums $\mathfrak{H}$ sind. Außerdem sind die Koeffizienten $p_\lambda \geq 0$ so, dass $\sum_\lambda p_\lambda = 1$ ist.

(a) Zeigen Sie, dass der Erwartungswert von einem hermiteschen Operator $\hat{A}$ ausgedrückt werden kann als

$$\langle \hat{A} \rangle = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}\}, \tag{10}$$

wobei die Spur über eine beliebige Basis $\{|n\rangle\}$ des Hilbertraums $\mathfrak{H}$ geführt wird.

(1 Punkt)

(b) Zeigen Sie, dass der Dichteoperator hermitesch ist, nämlich $\rho^\dagger = \rho$.

(1 Punkt)

(c) Zeigen Sie, dass der Dichteoperator positiv definit ist, oder mit anderen Worten, dass

$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0, \tag{11}$$

für jeden Zustand $|\psi\rangle$ im Hilbertraum.

(1 Punkt)

(d) Zeigen Sie, dass die Dichtematrix normalisiert ist, nämlich dass $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\} = 1$.

(1 Punkt)