Übung zur Vorlesung
Theoretische Physik IV

WiSe 2022/23 **Blatt 4** **08.11.2022**

Aufgabe 8 *Thermodynamische Potentiale und Maxwellsche Relationen*

Thermodynamische Potentiale sind Funktionen aus denen man alle thermodynamischen Größen ableiten kann. Voraussetzung dafür ist, dass man die richtigen Variablen (natürliche Variablen) für das jeweilige thermodynamische Potential verwendet. Neben der inneren Energie U gibt es weitere thermodynamische Potentiale, von denen wir im Folgenden die Enthalpie H, die freie Energie F, die freie Enthalpie G, das große Potential Ω und schließlich die Helmholtzsche freie Energie A betrachten.

a) Die Änderung der inneren Energie $U(S, V, \vec{H})$ eines Körpers mit magnetischem Moment $\vec{M}$ in einem homogenen äußeren Magnetfeld $\vec{H}$ lautet

$$dU = T\,dS - p\,dV - \vec{M}\cdot d\vec{H} = T\,dS - p\,dV - \sum_i M_i\,dH_i \tag{1}$$

für konstante Teilchenzahlen N_i. Basierend auf der freien Energie $F(T, V, \vec{H})$, definieren wir die sogenannte Helmholtzsche freie Energie $A = A(T, V, \vec{M})$ über

$$A = F + \vec{M}\cdot\vec{H} = F + \sum_i M_i\,H_i\,. \tag{2}$$

Leiten Sie ausgehend von den Gleichungen (1) und (2) die folgenden Relationen ab

$$\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V,H_i} = T\,,\quad \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S,H_i} = -p\,,\quad \left(\frac{\partial U}{\partial H_i}\right)_{S,V,H_k\neq H_i} = -M_i,$$
$$\left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_{V,M_i} = -S\,,\quad \left(\frac{\partial A}{\partial V}\right)_{T,M_i} = -p\,,\quad \left(\frac{\partial A}{\partial M_i}\right)_{T,V,M_k\neq M_i} = H_i\,,$$

und beweisen Sie damit die Maxwell-Relationen

$$\left(\frac{\partial M_i}{\partial V}\right)_{S,H_k} = \left(\frac{\partial p}{\partial H_i}\right)_{S,V,H_k\neq H_i}\,,\quad \left(\frac{\partial M_i}{\partial S}\right)_{V,H_k} = -\left(\frac{\partial T}{\partial H_i}\right)_{S,V,H_k\neq H_i}\,,$$
$$\left(\frac{\partial H_i}{\partial V}\right)_{T,M_k} = -\left(\frac{\partial p}{\partial M_i}\right)_{T,V,M_k\neq M_i}\quad \left(\frac{\partial H_i}{\partial T}\right)_{V,M_k} = -\left(\frac{\partial S}{\partial M_i}\right)_{T,V,M_k\neq M_i}\,.$$

(2 Punkte)

Aufgabe 9 *Partielle Spur*

Betrachten Sie zwei Hilbert-Räume, die über ein Tensorprodukt zu einem einzigen zusammengefasst werden: $\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2$. Die Dimensionen der Hilbert-Räume sind D_1 und D_2. Desweiteren wird jeder Hilbert-Raum von einer Basis aufgespannt, die mit $\{|a_i\rangle\}$ und $\{|b_i\rangle\}$ bezeichnet werden. Sei $\hat{X}$ ein Operator, der über $\mathfrak{H}$ definiert ist. Seine Spur kann geschrieben werden als

$$\mathrm{Tr}[\hat{X}] = \sum_{i=1}^{D_1} \sum_{j=1}^{D_2} \langle a_i| \otimes \langle b_j|\hat{X}|a_i\rangle \otimes |b_j\rangle. \tag{3}$$

Diese Operation ergibt einen Skalar. In ähnlicher Weise definieren wir die partielle Spur über $\mathfrak{H}_2$ als

$$\hat{X}_1 = \mathrm{Tr}_2[\hat{X}] = \sum_{j=1}^{D_2} \langle b_j|\hat{X}|b_j\rangle, \tag{4}$$

wobei man einen Operator erhält, der über $\mathfrak{H}_1$ definiert ist.

a) Betrachten Sie einen Zustand von zwei Spins $|\Psi\rangle$, so dass

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle). \tag{5}$$

Bestimmen Sie die Form der Dichtematrix $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$.

(1 Punkt)

b) Bestimmen Sie den Ausdruck der reduzierten Dichtematrizen $\hat{\rho}_1 = \mathrm{Tr}_2[\hat{\rho}]$ und $\hat{\rho}_2 = \mathrm{Tr}_1[\hat{\rho}]$.

(1 Punkt)

Aufgabe 10 *Eigenschaften von paramagnetischen Systemen*

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

$$\hat{H} = -B_0\hat{M}^z = -\mu_B B_0 \sum_{j=1}^{N} \hat{\sigma}^z, \tag{6}$$

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

a) Zeigen Sie, dass in einem homogenen System folgende Aussage gilt

$$\langle\hat{M}^z\rangle = N\mu_B \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_1^z\} \tag{7}$$

mit $\hat{H}_1 = \mu_B B_0\hat{\sigma}_1^z$ und $\hat{\rho}_1 = \mathrm{Tr}_{N-1}\{\hat{\rho}_N\}$, wobei Tr_{N-1} die Spur über $N-1$ Spins ist.

(1 Punkt)

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

$$\hat{\rho}_1 = \frac{e^{\beta\epsilon_0}|+\rangle\langle+| + e^{-\beta\epsilon_0}|-\rangle\langle-|}{\mathcal{Z}_1}, \tag{8}$$

mit der Normierungskonstante $\mathcal{Z}_1 = e^{\beta\epsilon_0} + e^{-\beta\epsilon}$ und $\epsilon_0 = \mu_B B_0$. Zeigen Sie, dass der Erwartungswert der Magnetisierung in z-Richtung gegeben ist durch

$$\langle \hat{M}^z \rangle = N\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B_0}{k_B T}\right) \tag{9}$$

mit $\beta = 1/(k_B T)$.

(1 Punkt)

c) Bestimmen Sie den Ausdruck für die Standardabweichung der Magnetisierung $\Delta M^z = \sqrt{\langle(\hat{M}^z)^2\rangle - \langle\hat{M}^z\rangle^2}$. Kommentieren Sie die Skalierung der Standardabweichung in Bezug auf die Systemgröße N.

(1 Punkt)