Plenum - 12.6.

Lösung:

1. Die Dichtematrix im mikrokanonischen Ensemble ist geben durch

$$\hat{\rho}_{MK} = \frac{1}{\Omega_{MK}} \sum_{E \le E_n \le E + \Delta E} |n\rangle\langle n|. \tag{1}$$

Ω_{MK} ist die mikrokanonische Zustandssumme. Die Zustandssumme normiert die Dichtematrix $\hat{\rho}_{MK}$: $Tr[\hat{\rho}_{MK}] = 1$. $|n\rangle$ sind die Eigenzustände von H zu einer festgehaltenen Energie E_n (bzw. es werden jene Zustände summiert, derren Energie E_n in einem kleinen Intervall $[E, E + \Delta E]$ liegt).
Zur Berechnung der mikrokanonischen Dichtematrix müssen wir die Eigenwerte und Eigenzustände des Hamiltonoperators berechnen. Wir verwenden die folgende Notation für die Eigenzustände der Einteilchenspinoperatoren (die Quantisierungsachse ist die z-Achse):

$$S_1^z \left|\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left|\frac{1}{2}\right\rangle \qquad \vec{S_1}^{\,2}\left|\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar^2\frac{3}{4}\left|\frac{1}{2}\right\rangle \tag{2}$$

$$S_1^z \left|-\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{\hbar}{2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle \qquad \vec{S_2}^{\,2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar^2\frac{3}{4}\left|\frac{-1}{2}\right\rangle \tag{3}$$

$$\tag{4}$$

Die Produktzustände für 2 Teilchen ergeben sich zu

$$\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle, \left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle, \left|-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle. \tag{5}$$

Der Hamiltonoperator $H = J\vec{S_1}\vec{S_2}$ ist gleichzeitig mit den Spinoperatoren der gekoppelten Spins diagonalisierbar. Mit anderen Worten: die Eigenzustände der gekoppelten Spinoperaten entsprechen den Eigenzuständen von H. Die Spinoperatoren der gekoppelten Basis sind:

$$\vec{S}^2 = (\vec{S_1} + \vec{S_2})^2 \tag{6}$$

$$S_z = S_1^z + S_2^z \tag{7}$$

$$\vec{S_1}^{\,2} \tag{8}$$

$$\vec{S_2}^{\,2} \tag{9}$$

Mit Hilfe dieser Operatoren lässt sich der Hamiltonoperator schreiben als

$$H = \frac{J}{2}(\vec{S}^2 - \vec{S_1}^{\,2} - \vec{S_2}^{\,2}). \tag{10}$$

Die Magnetquantenzahl M der gekoppelten Basis ist geben durch $M = m_1 + m_2$ (m_1 und m_2 sind die Magnetquantenzahl von S_1^z bzw. S_2^z). Die Drehimpulsquantenzahl ergibt sich aus der Ungleichung $|S_1 - S_2| \le S \le S_1 + S_2$ (S_1 und S_2 sind die Drehimpulsquantenzahlen von $\vec{S}_1^{\,2}$ bzw. $\vec{S}_2^{\,2}$). Damit ergibt sich die folgende Eigenbasis $|SM\rangle$:

$$|11\rangle = \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle \tag{11}$$
$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\right) \tag{12}$$
$$|11\rangle = \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle \tag{13}$$
$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle - \left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\right) \tag{14}$$
$$\tag{15}$$

die gleichzeitig Energieeigenbasis von H ist:

$$H|SM\rangle = \frac{\bar{J}}{2}\left[S(S+1) - S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)\right]|SM\rangle \tag{16}$$
$$H|11\rangle = \frac{\bar{J}}{4}|11\rangle \tag{17}$$
$$H|10\rangle = \frac{\bar{J}}{4}|10\rangle \tag{18}$$
$$H|1-1\rangle = \frac{\bar{J}}{4}|1-1\rangle \tag{19}$$
$$H|00\rangle = -\frac{3\bar{J}}{4}|00\rangle \tag{20}$$
$$\tag{21}$$

Wir haben den neuen Parameter $\bar{J} = J\hbar^2$ eingeführt. Der Energieeigenwert $\frac{\bar{J}}{4}$ ist also dreifach entartet, der Energieeigenwert $-\frac{3\bar{J}}{4}$ ist nicht entartet.
Damit ergibt sich für $E = -\frac{3\bar{J}}{4}$ die Dichtematrix

$$\hat{\rho}_{MK}\left(E = -\frac{3\bar{J}}{4}\right) = |00\rangle\langle 00|. \tag{22}$$

Es handelt sich um einen reinen Zustand und die Entropie ist

$$S\left(E = -\frac{3\bar{J}}{4}\right) = 0. \tag{23}$$

Für die Energie $E = \frac{\bar{J}}{4}$ liegt ein gemischter Zustand vor. Die Dichtematrix ist geben durch

$$\hat{\rho}_{MK}\left(E = \frac{\bar{J}}{4}\right) = \frac{1}{3}|11\rangle\langle 11| + \frac{1}{3}|10\rangle\langle 10| + \frac{1}{3}|1-1\rangle\langle 1-1|. \tag{24}$$

In der Unterbasis mit konstanter Energie $E = \frac{\bar{J}}{4}$ lässt sich ρ_{MK} schreiben als

$$\rho_{MK}\left(E = \frac{\bar{J}}{4}\right) = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}. \tag{25}$$

Für die Entropie müssen wir berechnen

$$S = -k_B Tr[\hat{\rho}_{MK} \ln \hat{\rho}_{MK}]. \tag{26}$$

Der Logarithmus eines Operators lässt sich nur in der Diagonaldarstellung des Operators einfach bilden. Wir erhalten also:

$$S\left(E = \frac{\bar{J}}{4}\right) = -k_B Tr\left[\begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ln\frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \ln\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \ln\frac{1}{3} \end{pmatrix}\right] = k_B \ln 3 = k_B \ln \Omega_{MK}. \tag{27}$$

Beachten Sie, dass der Wert der Spur Tr unabhängig von der für $\hat{\rho}$ gewählten Basis ist - die physikalische Größe S muss basisunabhängig sein.

2. Die Dichtematrix im kanonischen Ensemble ist geben durch

$$\hat{\rho}_K = \frac{1}{Z_K} e^{-\beta \hat{H}} = \frac{1}{Z_K} \sum_n e^{-\beta E_n} |n\rangle\langle n|. \tag{28}$$

$|n\rangle$ ist wieder ein Eigenzustand von H. Beachten Sie, dass jetzt über alle Eigenzustände von H summiert wird. Wir erhalten also:

$$\hat{\rho}_K = \frac{1}{Z_K}\left(e^{-\frac{\bar{J}\beta}{4}}|11\rangle\langle 11| + e^{-\frac{\bar{J}\beta}{4}}|10\rangle\langle 10| + e^{-\frac{\bar{J}\beta}{4}}|1-1\rangle\langle 1-1| + e^{\frac{3\bar{J}\beta}{4}}|00\rangle\langle 00|\right), \tag{29}$$

bzw. in der Energiebasis:

$$\hat{\rho}_K = \frac{1}{Z_K}\begin{pmatrix} e^{-\frac{\bar{J}\beta}{4}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{\bar{J}\beta}{4}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\frac{\bar{J}\beta}{4}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{\frac{3\bar{J}\beta}{4}} \end{pmatrix}. \tag{30}$$

Die kanonische Zustandssumme ist dabei

$$Z_K = 3e^{-\frac{\bar{J}\beta}{4}} + e^{\frac{3\bar{J}\beta}{4}}. \tag{31}$$

Die Entropie im kanonischen Ensemble ist damit:

$$\begin{aligned} S &= -k_B Tr[\hat{\rho}_K \ln \hat{\rho}_K] && (32)\\ &= -k_B \frac{1}{Z_K}\left[e^{-\frac{\bar{J}\beta}{4}}\left(-\frac{\bar{J}\beta}{4} - \ln Z_K\right)3 + e^{\frac{3\bar{J}\beta}{4}}\left(\frac{3\bar{J}\beta}{4} - \ln Z_K\right)\right] && (33)\\ &= k_B \frac{1}{Z_K}\left[\ln Z_K\left(3e^{-\frac{\bar{J}\beta}{4}} + e^{\frac{3\bar{J}\beta}{4}}\right) + \frac{3\bar{J}\beta}{4}e^{-\frac{\bar{J}\beta}{4}} - \frac{3\bar{J}\beta}{4}e^{\frac{3\bar{J}\beta}{4}}\right] && (34)\\ &= k_B\left(\ln Z_K - \beta\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_K\right) = k_B \ln Z_K + k_B T\frac{\partial}{\partial T}\ln Z_K. && (35) \end{aligned}$$