Karlsruher Institut für Technologie | Institut f"ur Theoretische Festkörperphysik

Übungen zu Moderne Theoretische Physik III SS 13

Prof. Dr. G. Schön
Dr. M. Marthaler, Dr. A. Poenicke

Lösungsvorschlag zu Blatt 7
31.05.2010

---

1. Thermodynamische Potentiale: Gegeben ist,

$$U = C_V T \quad , \quad PV = Nk_B T \tag{1}$$

und wir wissen,

$$dU = TdS - PdV \quad , \quad \left.\frac{\partial U}{\partial S}\right|_V = T \quad , \quad \left.\frac{\partial U}{\partial V}\right|_S = -P \tag{2}$$

Bei den kommenden ableitungen wird nicht mehr explizit angegeben was konstant gehalten wird.

(a)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U}{\partial S} &= T = \frac{U}{C_V} && (3)\\
\frac{\partial U}{U} &= \frac{\partial S}{C_V} && (4)\\
\ln U(S,V) - \ln U_0(V) &= \frac{S-S_0}{C_V} = \ln\left(\frac{U(S,V)}{U_0(V)}\right) && (5)\\
\frac{U(S,V)}{U_0(V)} &= \exp\left((S-S_0)/C_V\right) && (6)\\
\Rightarrow U(S,V) &= U_0(V) e^{(S-S_0)/C_V} && (7)
\end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U}{\partial V} &= -P \ , \ PV = Nk_B T \Rightarrow P = \frac{Nk_B T}{V} = \frac{Nk_B U}{C_V V} && (8)\\
\frac{\partial U}{\partial V} &= -\frac{Nk_B U}{C_V V} && (9)\\
\frac{\partial U}{U} &= -\frac{Nk_B}{C_V}\frac{\partial V}{V} \Rightarrow \ln\frac{U}{U_0} = -\frac{Nk_B}{C_V}\ln\frac{V}{V_0} && (10)\\
\ln\frac{U}{U_0} &= \ln\left[\frac{V_0}{V}\right]^{\frac{Nk_B}{C_V}} \Rightarrow U(S,V) = U_0(S)\left[\frac{V_0}{V}\right]^{\frac{Nk_B}{C_V}} && (11)
\end{aligned}$$

(c) Aus den Resultaten der Aufgabenteile a) und b) erhalten wir

$$U(S,V) = U_0 \left[\frac{V_0}{V}\right]^{\frac{Nk_B}{C_V}} e^{(S-S_0)/C_V} \tag{12}$$

Nun verwenden wir $C_P - C_V = Nk_B$,

$$\frac{Nk_B}{C_V} = \frac{C_P - C_V}{C_V} = \frac{C_P}{C_V} - 1 \tag{13}$$

Damit ergibt sich,

$$U(S,V) = U_0 \left[\frac{V_0}{V}\right]^{\frac{C_P}{C_V}-1} e^{(S-S_0)/C_V} \tag{14}$$

(d) Wir lösen $U(S,V)$ nach S auf,

$$\begin{aligned}
\ln U &= \ln U_0 + \frac{Nk_B}{C_V}\ln\frac{V_0}{V} + \frac{S-S_0}{C_V} &(15)\\
\frac{S-S_0}{C_V} &= \ln\frac{U}{U_0} + \frac{Nk_B}{C_V}\ln\frac{V}{V_0} &(16)\\
S - S_0 &= C_V \ln\frac{U}{U_0} + Nk_B \ln\frac{V}{V_0} &(17)\\
S - S_0 &= Nk_B \ln\left(\frac{U}{U_0}\right)^{C_V/Nk_B} + Nk_B \ln\frac{V}{V_0} &(18)\\
S &= S_0 + Nk_B \ln\left(\frac{U}{U_0}\right)^{C_V/Nk_B}\frac{V}{V_0} &(19)\\
& &(20)
\end{aligned}$$

(e)

$$F(T,V) = U - ST \tag{21}$$

Wir schreiben nun $S(U,V)$ um in $S(T,V)$, durch $U = C_V T$,

$$S(T,V) = S_0 + Nk_B \ln\left[\left(\frac{T}{T_0}\right)^{C_V/Nk_B}\frac{V}{V_0}\right] \tag{22}$$

Damit ergibt sich

$$F = C_V T - TS_0 - Nk_B T \ln\left[\left(\frac{T}{T_0}\right)^{C_V/Nk_B}\frac{V}{V_0}\right] \tag{23}$$

2. Gaussverteilung in 2 Dimensionen:
Gegeben sei die Wahrscheinlichkeitsverteilung eines Oszillators in 2 Dimensionen,

$$\rho(x,y) = \frac{\sqrt{3}m\omega^2}{2\pi}\exp\left[-\frac{m\omega^2}{2k_BT}\vec{v}^T\mathbf{A}\vec{v}\right] \tag{24}$$

mit

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad , \quad \mathbf{A} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 13 & 4 \\ 4 & 7 \end{pmatrix} \tag{25}$$

(a) Wir fangen damit an die Matrix A zu Diagonalisieren:

$$\begin{aligned}
\begin{vmatrix} \frac{13}{5}-\lambda & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{7}{5}-\lambda \end{vmatrix} &= \frac{1}{5^2}\begin{vmatrix} 13-5\lambda & 4 \\ 4 & 7-5\lambda \end{vmatrix} = \frac{1}{5^2}\left[(13-5\lambda)(7-5\lambda)-16\right]\\
&= \frac{1}{5^2}\left[91 - 20\times 5\lambda + (5\lambda)^2 - 16\right] \quad (91-16=75) &(26)\\
&= 3 - 4\lambda + \lambda^2 &(27)
\end{aligned}$$

Damit ergeben sich die Eigenwerte

$$\lambda_{1/2} = \frac{4 \pm \sqrt{16 - 4 \times 3}}{2} = 2 \pm 1 \tag{28}$$

Eigenvektoren für den Eigenwert $\lambda_1 = 3$

$$\frac{1}{5}\begin{pmatrix} 13 - 5\lambda_1 & 4 \\ 4 & 7 - 5\lambda_1 \end{pmatrix} \vec{v}_1 = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} -2 & 4 \\ 4 & -8 \end{pmatrix} \vec{v}_1 = 0 \tag{29}$$

Damit ergibt sich für $\vec{v}_1$,

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{30}$$

Eigenvektoren für den Eigenwert $\lambda_2 = 1$

$$\frac{1}{5}\begin{pmatrix} 13 - 5\lambda_2 & 4 \\ 4 & 7 - 5\lambda_2 \end{pmatrix} \vec{v}_2 = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 2 \end{pmatrix} \vec{v}_2 = 0 \tag{31}$$

Damit ergibt sich für $\vec{v}_2$,

$$\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \tag{32}$$

Damit haben wir nun die neuen Koordinaten,

$$x' = \frac{1}{\sqrt{5}}(2x + y) \tag{33}$$

$$y' = \frac{1}{\sqrt{5}}(-x + 2y) \tag{34}$$

oder,

$$x = \frac{1}{\sqrt{5}}(2x' - y') \quad , \quad y = \frac{1}{\sqrt{5}}(x' + 2y') \tag{35}$$

Damit können wir nun schreiben

$$\vec{v}^T \mathbf{A} \vec{v} = \frac{1}{5}(13x^2 + 8xy + 7y^2) \tag{36}$$

$$x^2 = \frac{1}{5}\left(4x'^2 - 4x'y' + y'^2\right) \quad , \quad y^2 = \frac{1}{5}\left(x'^2 + 4x'y' + 4y'^2\right) \tag{37}$$

$$xy = \frac{1}{5}\left(2x'^2 + 3x'y' - 2y'^2\right) \tag{38}$$

Damit ergibt sich z.B.

$$13 \times 4x'^2 + 8 \times 2x'^2 + 7x'^2 = 75x'^2 \tag{39}$$

$$13y'^2 - 16y'^2 + 28y'^2 = 25y'^2 \tag{40}$$

Wir sehen also

$$\vec{v}^T \mathbf{A} \vec{v} = \frac{1}{5}(13x^2 + 8xy + 7y^2) = 3x'^2 + y'^2 \tag{41}$$

Damit können wir nun folgende Wahrscheinlichkeitsverteilungen bestimmen:

$$\rho_{x'}(x') = \sqrt{\frac{3m\omega^2}{2k_B T \pi}} e^{-\frac{3m\omega^2}{2k_B T} x'^2} \quad , \quad \rho_{y'}(y') = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2k_B T \pi}} e^{-\frac{m\omega^2}{2k_B T} y'^2} \tag{42}$$

(b) Wir fangen damit an einige Mittelwerte zu berechnen,

$$\langle x'^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 \rho_{x'}(x') = \frac{k_B T}{3m\omega^2} \tag{43}$$

$$\langle y'^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dy' x'^2 \rho_{y'}(y') = \frac{k_B T}{m\omega^2} \tag{44}$$

Zusammen mit

$$x^2 = \frac{1}{5}\left(4x'^2 - 4x'y' + y'^2\right) \quad , \quad y^2 = \frac{1}{5}\left(x'^2 + 4x'y' + 4y'^2\right) \tag{45}$$

ergibt sich nun,

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{5}\left[4\frac{k_B T}{3m\omega^2} + \frac{k_B T}{m\omega^2}\right] = \frac{7}{15}\frac{k_B T}{m\omega^2} \tag{46}$$

$$\langle y^2 \rangle = \frac{1}{5}\left[\frac{k_B T}{3m\omega^2} + 4\frac{k_B T}{m\omega^2}\right] = \frac{13}{15}\frac{k_B T}{m\omega^2} \tag{47}$$

3. Langevin Gleichung:
Betrachten sie folgende Langevin-Gleichung für ein Brown'sches Teilchen:

$$m\dot{v} + m\gamma v = \xi(t) \tag{48}$$

dabei ist $\xi(t)$ eine Zufallskraft, die charakterisiert ist durch

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad , \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = a e^{-b|t-t'|} \, . \tag{49}$$

(a) Es ist zu zeigen, dass

$$v(t) = \frac{1}{m}\int_{t_0}^{t} dt' e^{\gamma(t'-t)} \xi(t') \tag{50}$$

eine Lösung der Differentialgleichung (48) ist. Dazu nehmen wir die Ableitung von $v(t)$,

$$m\dot{v}(t) = \left[\frac{d}{dt}e^{-\gamma t}\right] \int_{t_0}^{t} dt' e^{\gamma t'} \xi(t') + e^{-\gamma t}\, e^{\gamma t}\xi(t) \tag{51}$$

$$= -\gamma \int_{t_0}^{t} dt' e^{\gamma(t'-t)} \xi(t') + \xi(t) = -\gamma m v(t) + \xi(t) \tag{52}$$

(b) Nun ist der Korrelator $\langle v(t)v(t') \rangle$ für $t > t'$ zu Berechnen,

$$\langle v(t)v(t') \rangle = \frac{1}{m^2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t'} dt_2 \, e^{\gamma(t_1 - t)} e^{\gamma(t_2 - t')} \langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle \tag{53}$$

$$= \frac{a}{m^2} e^{-\gamma(t+t')} \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t'} dt_2 e^{\gamma(t_1 + t^2)} e^{-b|t_1 - t_2|} \tag{54}$$

Wir unterteilen nun das Integral in 3 Teile. Teil 1:

$$\int_{t'}^{t} dt_1 \int_{-\infty}^{t'} dt_2 e^{\gamma(t_1+t_2)} e^{-b(t_1-t_2)} = \int_{t'}^{t} dt_1 \int_{-\infty}^{t'} dt_2 e^{(\gamma-b)t_1} e^{(\gamma+b)t_2} \tag{55}$$

$$= \int_{t'}^{t} dt_1 \frac{e^{(b+\gamma)t' + (\gamma-b)t_1}}{b+\gamma} = \frac{e^{2\gamma t'} - e^{b(t'-t)+\gamma(t+t')}}{b^2 - \gamma^2}$$

Teil 2:

$$\int_{-\infty}^{t'} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{\gamma(t_1+t_2)} e^{-b(t_1-t_2)} = \int_{-\infty}^{t'} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{(\gamma-b)t_1} e^{(\gamma+b)t_2} \tag{56}$$

$$= \int_{-\infty}^{t'} dt_1 \frac{e^{2\gamma t_1}}{b+\gamma} = \frac{e^{2\gamma t'}}{2\gamma(b+\gamma)} \tag{57}$$

Teil 3:

$$\int_{-\infty}^{t'} dt_2 \int_{-\infty}^{t_2} dt_1 e^{\gamma(t_1+t_2)} e^{-b(t_2-t_1)} = \int_{-\infty}^{t'} dt_2 \int_{-\infty}^{t_2} dt_1 e^{(\gamma+b)t_1} e^{(\gamma-b)t_2} \tag{58}$$

$$= \int_{-\infty}^{t'} dt_2 \frac{e^{2\gamma t_2}}{b+\gamma} = \frac{e^{2\gamma t'}}{2\gamma(b+\gamma)} \tag{59}$$

Damit ergibt sich,

$$\langle v(t)v(t')\rangle = \frac{1}{m^2}\left[\frac{e^{\gamma(t'-t)} - e^{b(t'-t)}}{b^2-\gamma^2} + \frac{e^{\gamma(t'-t)}}{2\gamma(b+\gamma)}\right] \tag{60}$$

4. Dichte Matrix:

Betrachten Sie zwei Spin-1/2 Teilchen die Gleichverteilt sind auf die Triplett Zustände $|\psi_1\rangle = |++\rangle$, $|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$, und $|\psi_{-1}\rangle = |--\rangle$

(a) Die Dichte Matrix lässt sich schreiben als,

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{3}\left[|++\rangle\langle++| + |--\rangle\langle--| + \frac{1}{2}(|+-\rangle + |-+\rangle)(\langle+-| + \langle-+|)\right] \\ &= \frac{1}{3}\big[|++\rangle\langle++| + |--\rangle\langle--| \qquad (61) \\ &\quad + \frac{1}{2}(|+-\rangle\langle+-| + |-+\rangle\langle-+| + |+-\rangle\langle-+| + |-+\rangle\langle+-|)\big] \qquad (62) \end{aligned}$$

Oder als Matrix

$$\rho = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{63}$$

(b) Die reduzierte Dichtematrix ist gegeben durch

$$\rho^{\mathrm{red}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{64}$$