Lösungssammlung Übungsblätter Theo IV
Blatt 12

Luc Kusters

WS 19/20

Die Lösungen die hier zusammengefasst wurden, kommen großenteils von Oliver Liang Wen, obwohl ich selber einige Sachen hinzugefügt habe. Ich möchte mich insbesondere für seine gute und regelmäßige festlegung der Übungsgruppenmitschriften bedanken, ohne welches dieses Projekt gar nicht möglich wäre.

Die Lösungen gehören zu den Übungsblätter der von V. Meden gehaltene Vorlesung zur theoretische Physik IV: Statistische Physik und Thermodynamik an der RWTH Aachen, WS19/20.

Weder absolute Vollständichkeit noch absolute Korrektheit kann garrantiert werden! Bei Anmerkungen, Fragen, Korrekturen oder sonstiges, könnt ihr mich gerne per email erreichen:
ljbkusters@gmail.com

1. **Spezifische Wärme**

   Gegeben durch offizielle Musterlösung

2. **Zeitabhänginge Dichtematrix**

   Betrachten Sie einen Spin mit $S = 1/2$ im Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$. Der Hamiltonoperator ist gegeben durch

$$H = BS^z$$

   a) Zur Zeit $t = 0$ sei der Spin in x-Richtung polarisiert. Stellen Sie diesen Zustand, $|\psi(t = 0)\rangle = |x\rangle$, in der Eigenbasis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ des Hamiltonoperators dar. Bestimmen Sie in dieser Basis die zugehörige Dichtematrix $\rho(t = 0)$.

   Zunächst ist t fest mit $t = 0$. Polarisiert in x-Richtung

$$|\uparrow\rangle = (1, 0) \quad |\downarrow\rangle = (0, 1) \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

   In eigenbasis von σ_z ist $|+_x\rangle$ gegeben durch

$$|+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$$

   Für ρ gilt dann

$$\rho = |+_x\rangle \langle +_x| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

   b) Erfüllt $\rho(t = 0)$ die Projektoreingenschaft $\rho^2(t = 0) = \rho(t = 0)$?

$$\rho^2 = |+_x\rangle \langle +_x|+_x\rangle \langle +_x| = |+_x\rangle \langle +_x| = \rho$$

   c) Bestimmen Sie aus der von Neumann-Gleichung die Dichtematrix $\rho(t)$ zur Zeit t. Erfullt $\rho(t)$ die Projektoreigenschaft?

   Hinweis: Die Paulimatrix σ_z erfüllt $\sigma_z^{2n} = 1$ für $n \in \mathbb{N}_0$

$$\rho(t) = e^{-iHt/\hbar}\rho(0)e^{iHt/\hbar}$$

$$e^{\pm iHt/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\pm 1)^n}{n!}(itB)^n \sigma_z^n$$

   Wende Hinweis an, man findet

$$e^{\pm iHt/\hbar} = \cos\frac{Bt}{2}\mathbb{1} \pm i\sin\frac{Bt}{2}\sigma_z$$

   Es folgt daraus dass

$$\rho(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \cos Bt - i\sin Bt \\ \cos Bt + i\sin Bt & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & e^{-iBt} \\ e^{iBt} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}\rho^2(t) &= e^{-iHt/\hbar}\rho(0)\underbrace{e^{iHt/\hbar}e^{-iHt/\hbar}}_{1}\rho(0)e^{iHt/\hbar}\\ &= e^{-iHt/\hbar}\underbrace{\rho(0)\rho(0)}_{\rho(0)}e^{iHt/\hbar}\\ &= e^{-iHt/\hbar}\rho(0)e^{iHt/\hbar} = \rho(t) \quad \text{Erfüllt Projektoreigenschaft}\end{aligned}$$

d) Berechnen Sie den Erwartungswert des Spins $\langle S^y(t)\rangle$ in y-Richtung.

$$\langle S^y(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\operatorname{tr}(\rho(t)\sigma_y)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \langle S^y(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin Bt$$

e) Betrachten Sie nun ein Ensemble in dem der Spin mit einer Wahrscheinlichkeit p in positive x-Richtung polarisiert ist und mit Wahrscheinlichkeit $1-p$ in negative x-Richtung. Bestimmen Sie wieder $\rho(t=0)$, die Zeitentwicklung der Dichtematrix $\rho(t)$ und den Erwartungswert des Spins $\langle S^y(t)\rangle$ in y-Richtung.

$$\rho(0) = p(|+\rangle\langle+|) + (1-p)(|-\rangle\,|-\rangle)$$

mit

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$$

$$\rho(0) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 2p-1 \\ 2p-1 & 1 \end{pmatrix}$$

Analog folgt

$$\rho(t) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & (2p-1)e^{-iBt} \\ (2p-1)e^{iBt} & 1 \end{pmatrix}$$

und

$$\Rightarrow \langle S^y(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}(2p-1)\sin Bt$$

$$\rho^2 \neq \rho \quad \text{(Gemischte Zustand)}$$

3. **Zeit- und Ensemblemittel in der Quantenstatistik**

   Für ein System im Zustand $|\psi(t)\rangle$ ist der Erwartungswert $\langle A\rangle_t = \langle\psi(t)| A |\psi(t)\rangle$ einer Messgröße eine Funktion der Zeit. Für die statistische Physik ist entscheidend, dass sich der Zeitmittelwert
$$\overline{A} = \lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau}\int_0^\tau \langle A\rangle_t dt$$
   durch den Ensemblemittelwert $\langle A\rangle = \mathrm{Tr}[\rho A]$ eines Gleichgewichtsensembles mit zeitunabhängiger Dichtematrix darstellen lässt, wie Sie jetzt zeigen können. Dazu sei zur Zeit $t = 0$ der Zustand des Systems nach Eigenzuständen $|n\rangle$, $H|n\rangle = \lambda_n |n\rangle$ des Hamiltonoperators zerlegt:
$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$
   Wir nehmen an, dass H nur nicht entartete Eigenwerte λ_n hat. Zeigen Sie, dass dann der Zeitmittelwert durch $\overline{A} = \sum_n |c_n|^2 \langle n| A |n\rangle$ gegeben ist. Für welche - zeitunabhängige - Dichtematrix ρ gilt somit $\langle A\rangle = \overline{A}$ Wie lässt sich diese Dichtematrix durch ein Ensemble darstellen? Wird hierdurch eines der bekannten Ensemble beschrieben? Wenn nicht, welche Informationen gehen in dieses Ensemble ein im Vergleich zu den bisher diskutierten Ensembles?

4. **Entropie und Dichtematrix**

Die statistische Entropie eines Zustandes mit Dichtematrix ρ wird durch $S = -k_B\langle \ln \rho\rangle = -k\mathrm{Tr}[\rho \ln \rho]$ definiert.

a) Zeigen Sie, dass immer $S \geq 0$ gilt. Wann ist $S = 0$? Sie können annehmen, dass die Dichtematrix in der Eigenbasis (Diagonalform) geschrieben werden kann.

$$\rho = \sum_i p_i \left|i\right\rangle \left\langle i\right|$$

$$\begin{aligned}\langle \ln \rho\rangle &= \mathrm{tr}(\rho \ln \rho)\\ &= \sum_i \sigma_i \left\langle i\right| \rho \ln \rho \left|i\right\rangle\\ &= \sum_i p_i \ln p_i \left\langle i|i\right\rangle\\ &= \sum_i p_i \underbrace{\ln p_i}_{\leq 0} \quad p \in [0,1]\end{aligned}$$

Wegen $S \propto -\langle \ln \rho\rangle$ folgt $S \geq 0$.

$S = 0$ falls ein $p_i = 1$ (also falls es nur eine mögliche Zustand gibt).

b) Schreiben Sie die Dichtematrix in der Eigenbasis (Diagonalform). Für welche Wahl der Matrixelemente ist S maximal?

Hinweis: Lösen Sie das Extremalwertproblem durch Einführung eines Lagrange-Multiplikators.

$$-\sum_i p_i \ln p_i + \lambda\left(\sum_i p_i - 1\right) \equiv f$$

$$\frac{\partial f}{\partial p_i} = -k[\ln p_i + 1] + \lambda = 0 \quad \text{maximum}$$

Dies kann man einfach umschreiben zu

$$p_i = e^{\frac{\lambda}{k}-1}$$

Man gehe nun von eine Gleichverteilung aus

$$p_i = \frac{1}{N}$$

c) Zeigen Sie analog zu Aufgabenteil b), dass aus der Maximalität der Entropie unter der Nebenbedingung, dass der Erwartungswert der Gesamtenergie durch $E = \langle H\rangle = \mathrm{Tr}[\rho H]$ gegeben ist, die kanonische Gesamtheit folgt. Zeigen Sie dabei insbesondere auch, dass die hier definierte statistische Entropie mit dem aus der Thermodynamik bekannten Ausdruck übereinstimmt.

$$E = \langle H\rangle = \mathrm{tr}(\rho H) = \sum_i p_i E_i$$

$$f \equiv -k\sum_i p_i \ln p_i + \lambda_1 \sum_i p_i + \lambda_2 \sum_i p_i E_i + C$$

$$\frac{\partial f}{\partial p_i} \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow p_i = e^{\lambda_1/k-1} e^{\lambda_2/kE_i}$$

$$\sum_i p_i = 1 \Rightarrow e^{-\lambda/k+1} = \sum_i e^{-\beta E_i} = Z$$

Es folgt

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta_i E_i}$$

Was mit der Thermodynamik verträglich ist.

$$\begin{aligned} F &= -k_B T \ln Z \\ S &= -k_B \sum_i p_i \ln p_i \\ &= -k_B \sum_i \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i} \ln\Big(e^{-\beta E_i}/Z\Big) \\ &= \underbrace{k\beta \frac{1}{Z} \sum_i E e^{-\beta E_i}}_{k_B \beta \langle E \rangle} + \underbrace{k_B \ln Z}_{-F/T} \\ &= \frac{1}{T}(\langle E \rangle - F) \end{aligned}$$

d) Berechnen Sie die Zeitentwicklung $\dot{S}$ und kommentieren Sie das Ergebnis.

$$\begin{aligned} \dot{S} &= -k_B \operatorname{tr}(\partial_t \rho \ln \rho) \\ &= -k_B \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \ln \rho + \rho \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) \\ &= -k_B \operatorname{tr} \left[-\frac{i}{\hbar} [H, \rho] (\ln \rho + 1) \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} k_B \operatorname{tr} \left[H \rho \ln \rho - \rho H \ln \rho + H \rho - \rho H \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} k_B [\operatorname{tr}(H \rho \ln \rho) - \operatorname{tr}(H \ln \rho \rho)] \\ &= 0 \end{aligned}$$

S ändert sich zeitlich nicht. Zustand in Gleichgewicht.