Übung 4 für Statistische Mechanik im SS 2016

Prof. Dr. Andreas Klümper
Norman Gundlach (n.gundlach@uni-wuppertal.de F.12.15)
Yahya Öz (y.oez@uni-wuppertal.de G.11.07)

Abgabe: 06.05.2016, 12:00 Uhr in Postfach Öz auf D.10
Besprechung: 10.05.2016, 08:30 Uhr / 13.05.2016, 10:15 Uhr

1. **Thermodynamik eines 2-Niveau-Systems** (7)
   Betrachte das allgemeine 2-Niveau-System aus der Übung 1 Aufgabe 3., dessen Energie E nun proportional zu $m = n_+ - n_-$ sei, $E_m = hm$ mit einem verallgemeinerten Feld h (z. B. unabhängige Spin-$\frac{1}{2}$-Objekte in einem äußeren Magnetfeld). Das System sei isoliert und abgeschlossen: Mikrokanonische Gesamtheit.

   (a) Benutze die Ergebnisse der Aufgabenteile aus Übung 1 Aufgabe 3. (a) und Übung 1 Aufgabe 3. (b), um die Anzahl der möglichen Zustände zu gegebener Energie $\Omega(\epsilon)$ und daraus die Entropie $S(\epsilon)$ zu berechnen, wobei $\epsilon = \frac{E}{hN}$ die reduzierte Energie ist.

   (b) Berechne die Temperatur $T(\epsilon)$ und skizziere die Kurven $S(\epsilon)$ und $T(\epsilon)$. Es treten negative Temperaturen auf. Sind diese "kälter" oder "wärmer" als positive Temperaturen? Was ist der physikalische Grund für das Auftreten negativer Temperaturen? Wodurch wird die experimentelle Realisierung erschwert?

   (c) Das System werde nun als kanonische Gesamtheit angesehen, die durch Kontakt mit einem Wärmebad realisiert wird (unter Erhaltung der Teilchenzahl). Berechne die kanonische Zustandssumme $Z_k(\beta) = \mathrm{tr}e^{-\beta\mathbf{H}} = (2\mathrm{ch}(\beta h))^N$ und daraus $T(\epsilon)$. Vergleiche mit dem Ergebnis aus Aufgabenteil (b).

   (d) Sowohl die Temperatur T als auch die Energie E sind proportional zum Feld h. Wie ist es aufgrund dessen möglich, das System durch Veränderung des Feldes abzukühlen?

2. **Thermodynamik eines Oszillatorensembles** (7)
   Die Energieniveaus eines harmonischen, eindimensionalen Oszillators der Frequenz ω sind
$$E(n) = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right).$$
   Gegeben sei ein abgeschlossenes, isoliertes Ensemble von N ($N \gg 1$) unabhängigen harmonischen eindimensionalen Oszillatoren der Gesamtenergie
$$E = \sum_{j=1}^{N} \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n_j\right) = \hbar\omega\left(\frac{N}{2} + M\right).$$
   (a) Benutze ein kombinatorisches Argument, um die Anzahl möglicher Zustände $\Omega(\epsilon)$ und daraus die Entropie $S(\epsilon)$ des Systems in den Grenzen $N, M \gg 1$ zu bestimmen ($\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega N}$).
   (b) Bestimme $T(\epsilon)$ und $\epsilon(T)$. Skizziere $\epsilon(T)$.
   (c) Das Ensemble sei nun im Kontakt mit einem Wärmebad. Berechne die kanonische Zustandssumme
$$Z_k = \mathrm{tr} e^{-\beta \mathbf{H}}, \qquad \mathbf{H} = \sum_{j=1}^{N} \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \mathbf{n}_j\right)$$
   durch Wahl einer geeigneten Basis bei der Spurbildung. Leite daraus die Entropie $S(T)$ und die reduzierte Energie $\epsilon(T)$ ab.

3. **Eigenschaften der Entropie** (7)
   Die relative Entropie $S(\boldsymbol{\rho} \mid \boldsymbol{\sigma})$ zweier Dichteoperatoren $\boldsymbol{\rho}$ und $\boldsymbol{\sigma}$ ist definiert als
$$S(\boldsymbol{\rho} \mid \boldsymbol{\sigma}) = \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{\rho}\left(\ln \boldsymbol{\rho} - \ln \boldsymbol{\sigma}\right)\right).$$
   (a) Eine differenzierbare reelle Funktion f einer reellen Variable x heißt konkav, wenn
$$f(y) - f(x) \leq (y - x) f'(x) \qquad \forall x, y.$$
   Beweise für Observablen $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ und konkaves f
$$\mathrm{tr}\left(f(\mathbf{B}) - f(\mathbf{A})\right) \leq \mathrm{tr}\left((\mathbf{B} - \mathbf{A}) f'(\mathbf{A})\right).$$
   Zeige, dass $f(x) = -x \ln x$ konkav ist für $x > 0$.

Tipp: Benutze einen vollständigen Satz von Eigenzuständen $(|\phi_i\rangle)_i$ zu $\mathbf{A}$ und $(|\psi_k\rangle)_k$ zu $\mathbf{B}$. Schreibe nun: $\mathrm{tr}\left(f(\mathbf{B}) - f(\mathbf{A})\right) = \sum_{i,k} \langle\psi_k| \, f(b_k) - f(a_i) \, |\phi_i\rangle \langle\phi_i|\psi_k\rangle$ und rechne weiter.

(b) Zeige unter Benutzung der Ergebnisse aus (a), dass $S\left(\boldsymbol{\rho} \mid \boldsymbol{\sigma}\right) \geq 0$ für beliebige Dichteoperatoren $\boldsymbol{\rho}$ und $\boldsymbol{\sigma}$ gilt.

(c) Der zu $\boldsymbol{\rho}$ gehörige Zustandsraum sei d-dimensional. Beweise mit Hilfe von (b) die Ungleichung für die Entropie:

$$S\left(\boldsymbol{\rho}\right) \leq d$$

(d) Benutze die Nichtnegativität der relativen Entropie, um die Subadditivität der Entropien zu zeigen:

$$S\left(\boldsymbol{\rho}_{12}\right) \leq S\left(\boldsymbol{\rho}_1\right) + S\left(\boldsymbol{\rho}_2\right)$$

$\boldsymbol{\rho}_1$ bezeichnet den Dichteoperator des Systems eins, $\boldsymbol{\rho}_2$ den Dichteoperator des Systems zwei und $\boldsymbol{\rho}_{12}$ den Dichteoperator des Gesamtsystems (bestehend aus System eins und System zwei).

Tipp: Wie sind $\boldsymbol{\rho}$ und $\boldsymbol{\sigma}$ in der Definition der relativen Entropie zu wählen? Wie sind $\boldsymbol{\rho}_1$ und $\boldsymbol{\rho}_2$ aus $\boldsymbol{\rho}_{12}$ zu erhalten (vgl. Blatt 0 und Blatt 3)?