Übungen in *Statistische Physik*

Übungsblatt 3

Bitte geben Sie Ihre Lösungen am **Dienstag, den 14.05.2019** in der Vorlesung ab.

1) 10 Punkte

In einem nicht wechselwirkenden (idealen) Gas mit der Temperatur T ist die Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses $\boldsymbol{p}$ eines beliebigen Atoms durch

$$P(\boldsymbol{p}) = A\,\exp\left(-\frac{\beta\,|\boldsymbol{p}|^2}{2m}\right)$$

gegeben, wobei $\beta = 1/k_\mathrm{B}T$ proportional zum Inversen der Temperatur T ist (Maxwell-Boltzmann-Verteilung). Finden Sie zunächst die passende Normierungskonstante A für $P(\boldsymbol{p})$. Bestimmen Sie dann die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(E)$ der (kinetischen) Energie E eines Teilchens. Verifizieren Sie die Normierung und interpretieren Sie das Resultat als Funktion von E und T, indem Sie z.B. eine Skizze von $P(E)$ für verschiedene Werte von T anfertigen.
Berechnen Sie anschließend den Mittelwert $\langle E\rangle$ und interepretieren Sie erneut die Abhängigkeit des Resultats von β und T. Welche Bedeutung können Sie daraus für die Parameter β bzw. T ableiten.
Hinweis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\,\mathrm{d}x = \sqrt{2\pi\sigma^2}\ , \quad \int_0^{\infty} \sqrt{x}\,\mathrm{e}^{-\alpha x}\,\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{2\,\alpha^{3/2}}\ , \quad \int_0^{\infty} x^{3/2}\,\mathrm{e}^{-\alpha x}\,\mathrm{d}x = \frac{3\sqrt{\pi}}{4\,\alpha^{5/2}}\ .$$

2) 5 Punkte

Ergodizität und Relaxationszeit

Ein klassisches System mit s Freiheitsgraden $(p,\,q) = (p_1,\,\ldots,\,p_s,\,q_1,\,\ldots,\,q_s)$ wird als ergodisch bezeichnet, wenn es mit der Zeit beliebig nah an alle zugänglichen Punkte im Phasenraum kommt.
Betrachten Sie ein freies Teilchen, das sich mit nahezu Lichtgeschwindigkeit in einem Würfel mit der Kantenlänge $L = 1\,\mathrm{m}$ fortbewegt. Schätzen Sie die Zeit T_erg ab, die dieses Teilchen *mindestens* brauchen würde, um an jeden Punkt im Würfel näher als 1Å zu kommen. Glauben Sie, dass T_erg eine gute Abschätzung für die Relaxationszeit eines Gases ist? Die Relaxationszeit ist die Zeit, die ein System benötigt, um den Gleichgewichts-Makrozustand zu erreichen.

3) 10 Punkte

Der im Allgemeinen gemischte Zustand eines Spin-1/2 Systems (z. B. der Spin der Elektronen in einem Elektronenstrahl) wird durch den Dichteoperator $\hat{\rho}$ definiert. In einem Experiment werden die Mittelwerte der Spins für verschiedene Richtungen gemessen.

i) Zeigen Sie zunächst, dass für die Projektionen des Spinoperators $\hat{\boldsymbol{S}}$ in die xy-, xz- und yz-Richtung $\hat{S}_{xy} = \hat{\boldsymbol{S}}\cdot(1,1,0)/\sqrt{2}$, $\hat{S}_{xz} = \hat{\boldsymbol{S}}\cdot(1,0,1)/\sqrt{2}$ und $\hat{S}_{yz} =$

$\hat{\boldsymbol{S}} \cdot (0,1,1)/\sqrt{2}$ die folgende Matrixdarstellung gilt:

$$\hat{S}_{xy} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix} , \quad \hat{S}_{xz} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} , \quad \hat{S}_{yz} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix} .$$

Die Eigenzustände der Paulimatrix $\hat{\sigma}_z$ werden hierbei als Basis verwendet $[\hat{\sigma}_z\,(1,0)^\top = (1,0)^\top,\ \hat{\sigma}_z\,(0,1)^\top = -(0,1)^\top]$.

ii) In dem Experiment wurden die folgenden Mittelwerte für die Observablen gemessen:

$$\langle \hat{S}_{xy} \rangle = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} , \quad \langle \hat{S}_{xz} \rangle = \frac{\hbar}{4} , \quad \langle \hat{S}_{yz} \rangle = \frac{\hbar}{4} .$$

Finden Sie die Dichtematrix $\hat{\rho}$ des Spinsystems. Handelt es sich um einen reinen oder gemischten Spinzustand? Bestimmen Sie die Entropie S des Systems.

iii) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass bei einer Messung der z-Komponente $\hat{S}_z$ des Spins der Wert $\hbar/2$ gefunden wird? Berechnen Sie den Mittelwert $\langle \hat{\boldsymbol{S}} \rangle$.

4)

10 Punkte

Zeigen Sie, dass der Dichteoperator genau dann einen reinen Zustand beschreibt, wenn eine der unten aufgelisteten äquivalenten Bedingungen erfüllt ist. Zeigen Sie zudem, dass all diese Bedingungen oder Aussagen äquivalent sind.

i) Es existiert ein reiner Zustand $|\alpha\rangle$, sodass $\hat{\rho} = |\alpha\rangle\langle\alpha|$.

ii) $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$.

iii) $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2\} = 1$.

iv) $S/k_\mathrm{B} = -\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\,\ln\hat{\rho}\} = -\langle \ln\hat{\rho}\rangle = 0$.

v) *+5 Bonus Punkte*:
$\hat{\rho}$ kann nicht als Summe zweier unterschiedlicher Dichteoperatoren $\hat{\rho}_1$ und $\hat{\rho}_2$ geschrieben werden, d. h., es existieren keine zwei Dichteoperatoren $\hat{\rho}_1 \neq \hat{\rho}_2$, sodass $\hat{\rho} = \alpha_1\,\hat{\rho}_1 + \alpha_2\,\hat{\rho}_2$ mit $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ und $\alpha_i > 0$. In anderen Worten, das durch $\hat{\rho}$ beschriebene Ensemble lässt sich nicht in 2 Ensembles mit unterschiedlichen Eigenschaften trennen.

5)

10 Punkte

Zeitabhängigkeit der statistischen Verteilungsfunktion in einer Dimension

i) Betrachten Sie ein Ensemble aus freien Teilchen in einer Dimension $[V(x) = 0\ \forall x]$. Der klassische Zustand eines einzigen Teilchens ist durch die Ortskoordinate x und den entsprechenden Impuls p eindeutig festgelegt.

(a) Die statistische Verteilungsfunktion des Ensembles sei zum Zeitpunkt $t = 0$ gegeben durch

$$\rho_1(p, x, t = 0) = \begin{cases} C\,\delta(x) & \text{für } |p| \leq p_\mathrm{max} \\ 0 & \text{sonst}\,. \end{cases}$$

Fertigen Sie zunächst eine qualitative Skizze von $\rho_1(p, x, t = 0)$ im Phasenraum (p, x) an.

Bestimmen Sie anschließend die Konstante C so, dass $\rho_1(p, x, t = 0)$ normiert ist, d. h.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \rho_1(p, x, t = 0) = 1 \, .$$

Bestimmen Sie nun $\rho_1(p, x, t)$ für $t > 0$ und fügen Sie Ihrem Diagramm qualitative Skizzen von $\rho_1(p, x, t)$ für zwei Zeitpunkte $t > 0$ hinzu, um die Zeitabhängigkeit von $\rho_1(p, x, t)$ zu illustrieren.

(b) Wiederholen Sie Teil (a) für die anfängliche Verteilungsfunktion

$$\rho_2(p, x, t = 0) = C' \, \delta\left(\frac{x^2}{x_0^2} + \frac{p^2}{p_0^2} - 1\right) \, ,$$

wobei C', x_0 und p_0 Konstanten sind.

(c) Bestimmen und Skizzieren Sie drei verschiedene stationäre Verteilungfunktionen $\rho(p, x)$. Stationäre Verteilungsfunktionen erfüllen bekanntlich die Bedingung $\partial\rho/\partial t = 0$. Begründen bzw. zeigen Sie, warum die vorgeschlagenen $\rho(p, x)$ tatsächlich stationär sind. Was haben diese $\rho(p, x)$ gemeinsam?

ii) Nun sei das Potential harmonisch: $V(x) = m\omega^2 x^2/2$.

(d) Illustrieren Sie bzw. skizzieren Sie die Zeitabhängigkeit der Verteilungsfunktion $\rho_1(p, x, t)$ aus Teil (a). Eine oder zwei Skizzen von $\rho_1(p, x, t)$ für $t > 0$ sind ausreichend.

(e) Bestimmen Sie die stationäre Verteilungsfunktion $\rho(p, x)$ für ein Ensemble aus Teilchen mit der Energie E, welche sich im eindimensionalen harmonischen Potential bewegen. Fertigen Sie eine qualitative Skizze dieser stationären Verteilungsfunktion an. Achten Sie auf die Normierung von $\rho(p, x)$.