Freie Universität Berlin
Fachbereich Physik

WS 2005/2006
30.11.2005

Statistische Physik - Theorie der Wärme
(PD Dr. M. Falcke)

Übungsblatt 7: Dichtematrix, Variationsprinzip

Lösungen

Aufgabe 1

a. Da jedes Rotationsniveau $(2j+1)-$fach entartet ist, lautet die kanonische Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{j=0}^{\infty}(2j+1)\exp\{-\beta E_{rot}\} = \sum_{j=0}^{\infty}(2j+1)\exp\left\{\frac{-\beta\hbar^2 j(j+1)}{2\theta}\right\} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty}(2j+1)\exp\left\{\frac{-j(j+1)\theta_r}{2T}\right\}. \end{aligned} \tag{1}$$

wo wir die charakteristische Temperatur $\theta_r := \hbar^2/\theta k_B$ eingeführt haben. Somit ergibt sich die mittlere Rotationsenergie zu

$$\langle E_{rot}\rangle = \frac{1}{Z}\sum_{j=0}^{\infty}E_{rot}(2j+1)\exp\{-\beta E_{rot}\} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = k_B T^2\frac{\partial}{\partial T}\ln Z\,. \tag{2}$$

Daraus folgt die spezifische Wärme als

$$C_{rot} = \frac{\partial}{\partial T}\langle E_{rot}\rangle = -\frac{1}{k_B T^2}\frac{\partial}{\partial\beta}\langle E_{rot}\rangle = \frac{1}{k_B T^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\ln Z = \frac{1}{k_B T^2}\left[\langle E_{rot}^2\rangle - \langle E_{rot}\rangle^2\right]. \tag{3}$$

Verschwindet die Varianz der Rotationsenergie, so ist auch die spezifische Wärme identisch Null.

b. Beginnen wir mit den kleinen Temperaturen, d.h. $T \ll \theta_r$. In der Zustandssumme (1) werden die höheren Terme exponentiell unterdrückt, so dass wir nur die führenden Terme berücksichtigen müssen, also $Z^- \approx 1 + 3\exp\{-\theta_r/T\}$. Somit erhalten wir

$$\langle E_{rot}^-\rangle = \frac{3\exp\{-\theta_r/T\}}{1+3\exp\{-\theta_r/T\}}\cdot k_B\theta_r \approx 3k_B\theta_r\exp\left\{\frac{-\theta_r}{T}\right\}, \tag{4}$$

und [1]

$$C_{rot}^- = 3k_B\left[\frac{\theta_r}{T}\right]^2\exp\left\{\frac{-\theta_r}{T}\right\} \overset{T\to 0}{=\!\!\longrightarrow} 0\,. \tag{5}$$

Für die Hochtemperaturentwicklung verwenden wir die Euler-MacLaurin Formel:

$$\sum_{i=0}^{\infty}f(i) = \int_0^{\infty}f(i)di + \frac{1}{2}f(0) - \frac{1}{12}f'(0) + \frac{1}{720}f'''(0) + \dots\,. \tag{6}$$

[1] Die Funktion $y^2\exp(-y)$ geht im Grenzwert $y\to\infty$ gegen 0. Man erhält sie aus $1/x^2 exp(-1/x)$ durch die Substitution $x = 1/y$.

Mit $a := \theta_r/2T$ und $f(j) = (2j+1)\exp\{-aj(j+1)\}$ finden wir

$$\int\limits_0^\infty f(j)dj = -\frac{1}{a}\int\limits_0^\infty \frac{d}{dj}\left[e^{-aj(j+1)}\right]dj = \frac{1}{a} = \frac{2\theta}{\beta\hbar^2}\,, \tag{7}$$

also

$$f(0) = 1\,, \tag{8}$$

$$f'(0) = 2 - a\,, \tag{9}$$

$$f'''(0) = -12a + 12a^2 - a^3\,. \tag{10}$$

Die Zustandssumme ergibt sich daher zu

$$Z^+ = \frac{1}{a} + \frac{1}{3} + \frac{1}{15}a + \frac{1}{60}a^2 - \frac{1}{720}a^3 + \ldots\,. \tag{11}$$

Da $T \gg \theta_r$ äquivalent mit $a \ll 1$, vereinfacht sich die Zustandssumme zu $Z^+ \approx 1/a = 2\theta/\beta\hbar^2$. Somit finden wir abschließend

$$\langle E^+_{rot}\rangle = \frac{1}{\beta} = k_BT\,, \tag{12}$$

und

$$C^+_{rot} = -\frac{1}{k_BT^2}\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{\beta} = k_B\,. \tag{13}$$

Dies ist in Übereinstimmung mit dem Gleichverteilungssatz, also $k_BT/2$ pro kinetischen Freiheitsgrad.

Aufgabe 2

a. Die Eigenwerte der drei Pauli Spinmatrizen sind jeweils 1 und -1. Die entsprechden Eigenvektoren lauten:

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\,, \qquad |-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\,, \tag{14}$$

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\-1\end{pmatrix}\,, \qquad |-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\1\end{pmatrix}\,, \tag{15}$$

$$|+\rangle_z = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\,, \qquad |-\rangle_z = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\,. \tag{16}$$

Da beide Strahlen die gleiche Intensität besitzen, ergibt sich der Dichteoperator zu

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{1}{2}|+\rangle_x\langle+|_x + \frac{1}{2}|+\rangle_y\langle+|_y = \frac{1}{4}\left\{\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}i\\-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-i & -1\end{pmatrix}\right\}\\ &= \frac{1}{4}\begin{pmatrix}2 & 1-i\\ 1+i & 2\end{pmatrix}\,.\end{aligned} \tag{17}$$

Somit folgt für die Polarisation

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \mathrm{Sp}(\rho\boldsymbol{\sigma}) = \begin{pmatrix}\mathrm{Sp}\,\rho\sigma_x\\ \mathrm{Sp}\,\rho\sigma_y\\ \mathrm{Sp}\,\rho\sigma_z\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0.5\\0.5\\0\end{pmatrix}\,, \tag{18}$$

da z.B.

$$\mathrm{Sp}\,\rho\sigma_x = \frac{1}{4}\mathrm{Sp}\left\{\begin{pmatrix}2 & 1-i\\ 1+i & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\right\} = \frac{1}{2}\,. \tag{19}$$

b. Zur Diagonalisierung von ρ berechnen wir die Nullstellen des charakteristischen Polynoms, also

$$\det(\rho - \lambda \mathrm{id}_2) = \lambda^2 - \lambda + \frac{1}{8} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{8}} \,. \tag{20}$$

Damit erhalten wir die beiden Eigenvektoren

$$|+\rangle_\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{2}\\ 1+i\end{pmatrix}, \qquad |-\rangle_\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}-\sqrt{2}\\ 1+i\end{pmatrix}. \tag{21}$$

Mittels der Basistransformation-Matrix

$$\Gamma = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{2} & -\sqrt{2}\\ 1+i & 1+i\end{pmatrix} \tag{22}$$

finden wir schließlich

$$\rho_e = \Gamma^{-1}\rho\Gamma = \begin{pmatrix}\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{8}} & 0\\ 0 & \frac{1}{2}-\sqrt{\frac{1}{8}}\end{pmatrix}, \tag{23}$$

was in Übereinstimmung mit den Eigenwerten ist.

c. Zunächst bestimmen wir die Eigenwerte von σ_α:

$$\det(\sigma_\alpha - \lambda \mathrm{id}_2) = \lambda^2 - 1 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \lambda_{1,2} = \pm 1 \,. \tag{24}$$

Im folgenden ist nur der Eigenvektor zu $\lambda = 1$ von Interesse (Polarisation in positive α Richtung), der sich zu

$$|+\rangle_\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{-i\alpha/2}\\ e^{i\alpha/2}\end{pmatrix} \tag{25}$$

ergibt, woraus

$$P_\alpha := |+\rangle_\alpha\langle+|_\alpha = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}e^{-i\alpha/2}\\ e^{i\alpha/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{i\alpha/2} & e^{-i\alpha/2}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & e^{-i\alpha}\\ e^{i\alpha} & 1\end{pmatrix} \tag{26}$$

folgt. Daher finden wir für den mittleren Anteil der Neutronen in positiver α Richtung:

$$\langle P_\alpha\rangle = \mathrm{Sp}(P_\alpha\rho) = \frac{1}{8}\,\mathrm{Sp}\left\{\begin{pmatrix}1 & e^{-i\alpha}\\ e^{i\alpha} & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 1-i\\ 1+i & 2\end{pmatrix}\right\} = \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\left[\cos\alpha + \sin\alpha\right]. \tag{27}$$

Abbildung 1 veranschaulicht den Verlauf von $\langle P_\alpha\rangle$ als Funktion von α. Für $\alpha = 0$ (positive x-Richtung) ist $\langle P_\alpha\rangle = 3/4$. Dieses Ergebnis hat eine anschauliche Bedeutung: Die Hälfte der Neutronen war ja ohnehin in positiver x-Richtung polarisiert. Bei einer Messung in dieser Richtung wird sich das nicht ändern. Ausserdem wird man bei einer Messung eines in positiver y-Richtung polarisierten Neutrons in der Hälfte der Fälle ebenfalls eine Polarisierung in die positive x-Richtung feststellen, also insgesamt bei 1/4 der Gesamtzahl der Neutronen, sodass $\langle P_0\rangle = 1/2 + 1/4 = 3/4$ wird.

d. Nach der Messung in die positive α-Richtung befindet sich das System im Eigenzustand $|+\rangle_\alpha$ von σ_α. Um die mittlere Polarisation in x-Richtung bei einer anschliessenden Messung zu berechnen, gibt es zwei Möglichkeiten: (1) Man berechnet die Projektion von $|+\rangle_\alpha$ auf $|+\rangle_x$ und nimmt das Betragsquadrat oder (2) man berechnet $\mathrm{Sp}(P_{x^+}P_{\alpha^+})$. Wegen

$$P_{x^+} \equiv |+\rangle_x\langle+|_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix} \tag{28}$$

folgt

$$\langle P_{x^+}\rangle = \mathrm{Sp}(P_{x^+}P_{\alpha^+}) = \frac{1}{4}\,\mathrm{Sp}\left\{\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & e^{-i\alpha}\\ e^{i\alpha} & 1\end{pmatrix}\right\} = \frac{1}{2}(1+\cos\alpha) = \cos^2\frac{\alpha}{2} \,. \tag{29}$$

Hieraus folgt insbesondere, dass die mittlere Polarisation in negative x-Richtung durch $\langle P_{x^-}\rangle = 1 - \cos^2\frac{\alpha}{2} = \sin^2\frac{\alpha}{2}$ gegeben ist. Anschaulich bedeutet dieses Ergebnis: Wenn bei der ersten

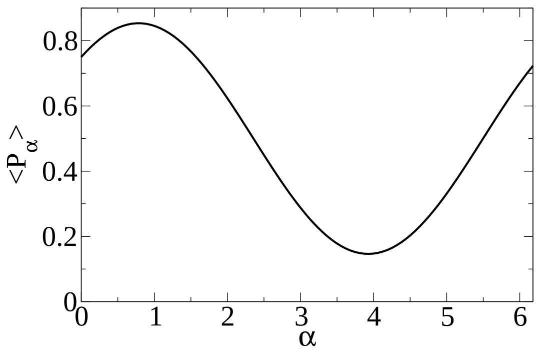

Abbildung 1: Mittlere Polarisation in positive α Richtung.

Messung unter dem Winkel $\alpha = 0$, d.h. in positiver x-Richtung gemessen wurde, sind mit Wahrscheinlichkeit 1 bei der zweiten Messung immer noch alle Teilchen in dieser Richtung polarisiert (da sich das System zwischen den beiden Messungen störungsfrei entwickelt). Wurde bei der ersten Messung jedoch unter dem Winkel $\alpha = \pi$, also in negativer x-Richtung gemessen, so sind bei der zweiten Messung immer noch alle Teilchen im Zustand $|-\rangle_x$, sodass man bei der zweiten Messung kein Teilchen mit positiver Polarisierung registrieren würde.

Aufgabe 3

Wir verwenden Lagrangesche Multiplikatoren, um H unter den beiden Bedingungen zu maximieren. Daher betrachten wir das Funktional

$$\tilde{H} = -\int f(\mathbf{p}) \ln f(\mathbf{p})\, d^3p + \lambda \left[\int f(\mathbf{p})\, d^3p - n\right] + \mu \left[\int f(\mathbf{p}) p^2/2m\, d^3p - n\epsilon\right] . \tag{30}$$

Da $\tilde{H}$ maximal werden soll, gilt

$$\delta\tilde{H} = -\delta \int \left[f(\mathbf{p}) \ln f(\mathbf{p}) - \lambda f(\mathbf{p}) - \mu f(\mathbf{p}) p^2/2m\right] d^3p = \delta \int g(f,p) d^3p = 0\,, \tag{31}$$

wobei g den gesamten Integranden bezeichnet. Daher erfüllt g die Euler-Lagrange Gleichung

$$\frac{\partial g}{\partial f} - \sum_j \frac{\partial}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial\left(\partial f/\partial p_i\right)} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \ln f + 1 - \lambda - \frac{\mu p^2}{2m} = 0\,, \tag{32}$$

weil g nicht mehr von den Ableitungen von f abhängt. Somit erhalten wir

$$f(\mathbf{p}) = \mathcal{N} \exp\left(\mu \frac{p^2}{2m}\right) , \quad \mathcal{N} := e^{\lambda - 1} . \tag{33}$$

Da $f(\mathbf{p})$ normierbar sein soll, muß $\mu < 0$ sein. Demzufolge ersetzen wir μ mit $-\mu$, wobei jetzt $\mu > 0$. Somit finden wir aus den beiden Bedingungen

$$n = \int f(\mathbf{p}) d^3p = \mathcal{N} \left[\frac{2\pi m}{\mu}\right]^{3/2} , \tag{34}$$

und

$$n\epsilon = \int f(\mathbf{p}) \frac{p^2}{2m} d^3p = -\frac{\partial}{\partial\mu} \int f(\mathbf{p}) d^3p = \mathcal{N} \left[\frac{2\pi m}{\mu}\right]^{3/2} \frac{3}{2\mu} = \frac{3n}{2\mu}\,, \tag{35}$$

die beiden noch unbestimmten Lagrangeschen Multiplikatoren:

$$\mu = \frac{3}{2\epsilon}\,, \qquad e^{\lambda-1} = n \left[\frac{4\pi\epsilon m}{3}\right]^{-3/2} . \tag{36}$$