Statistische Physik I — Übungsblatt 4

(Tutorium: Fr. 26.5.2023)

10. **Jaynes-Prinzip der maximalen Entropie**:

Betrachten Sie ein Quantensystem beschrieben durch den Hamiltonoperator $\hat{H}$. Zeigen Sie, dass bei fester mittlerer Energie $E(\hat{\rho}) = \mathrm{Sp}(\hat{H}\hat{\rho})$ die (von Neummann) Entropie

$$S(\hat{\rho}) \,=\, -\,k_{\mathrm{B}}\ \mathrm{Sp}\{\hat{\rho}\ln(\hat{\rho})\}$$

durch den kanonischen Gleichgewichtszustand $\hat{\rho}_{\mathrm{K}} = \exp(-\beta\hat{H})/Z_{\mathrm{K}}$ maximiert wird.

Hinweis: Sie dürfen hier annehmen, dass der betrachtete Dichteoperator diagonal in der Energieeigenbasis ist, d.h., $\hat{\rho} = \sum_n p_n\,|\,n\,\rangle\langle\,n\,|$ mit $\hat{H}\,|\,n\,\rangle = E_n\,|\,n\,\rangle$. Verwenden Sie weiters die Methode der Lagrange-Multiplikatoren für die Maximierung über die Variablen p_n und berücksichtigen Sie, dass neben der mittleren Energie, auch die Spur des Dichteoperators fixiert ist.

11. **Relative Entropie**:

Betrachten Sie ein bipartites Quantensystem beschrieben durch den Dichteoperator $\hat{\rho}_{AB}$, mit den reduzierten Dichteoperatoren $\hat{\rho}_A = \mathrm{Sp}_B(\hat{\rho}_{AB})$ und $\hat{\rho}_B = \mathrm{Sp}_A(\hat{\rho}_{AB})$ der Subsysteme A und B.

(a) Zeigen Sie durch explizite Rechnung, dass für beliebige $\hat{\rho}_A$ und $\hat{\rho}_B$ gilt

$$\ln(\hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B) = \ln(\hat{\rho}_A) \otimes \mathbb{1}_B \,+\, \mathbb{1}_A \otimes \ln(\hat{\rho}_B)\,,$$

wobei $\mathbb{1}_A$ und $\mathbb{1}_B$ die Identitäten auf den Hilberträumen der Subsysteme A und B bezeichnen.

(b) Die relative Entropie $S(\hat{\rho}\,\|\,\hat{\rho}')$ eines Dichteoperators $\hat{\rho}$ in Bezug auf einen anderen Dichteoperator $\hat{\rho}'$ ist gegeben durch (wie in der Informationstheorie üblich, setzen wir hier $k_{\mathrm{B}} = 1$)

$$S(\hat{\rho}\,\|\,\hat{\rho}') = \mathrm{Sp}\big\{\hat{\rho}\,\big[\ln(\hat{\rho}) \,-\, \ln(\hat{\rho}')\big]\big\}\,.$$

Beweisen Sie die Gültigkeit der Relation

$$S(\hat{\rho}_{AB}\,\|\,\hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B) = S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_B) \,-\, S(\hat{\rho}_{AB})\,.$$

(c) Betrachten Sie nun eine unitäre Transformation U auf dem gemeinsamen System, d.h., $\hat{\rho}_{AB} \mapsto U\hat{\rho}_{AB}U^\dagger$ mit $U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1}_{AB}$. Zeigen Sie, dass die Summe $S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_B)$ der Entropien der Subsysteme A und B durch solche eine Transformation nicht geringer werden kann, wenn anfangs ein Produktzustand vorliegt, d.h., wenn $\hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$ gilt.

Hinweis: Die Entropie ist eine Funktion der Eigenwerte des Dichteoperators, wie ändern sich diese Eigenwerte unter unitären Transformationen? Verwenden Sie weiters die Klein´sche Ungleichung $S(\hat{\rho}\,\|\,\hat{\rho}') \geq 0$.

12. **Kanonisches Ensemble des harmonischen Oszillators**:

Betrachten Sie einen quantenmechanischen harmonischen Oszillator mit Kreisfrequenz ω beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\omega^2 \, \hat{x}^2}{2} = \hbar\,\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \tfrac{1}{2}\right),$$

mit den verallgemeinerten Orts- und Impulsoperatoren $\hat{x}$ und $\hat{p}$, und die entsprechenden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\big(\omega\,\hat{x} - i\,\hat{p}\big) \qquad \text{und} \qquad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\big(\omega\,\hat{x} + i\,\hat{p}\big)\,.$$

erfüllen die Kommutatorrelation $[\,\hat{a}\,,\hat{a}^\dagger\,] = 1$. Für die Eigenzustände $|\,n\,\rangle$ des Teilchenzahloperators $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ mit $\hat{n}\,|\,n\,\rangle = n\,|\,n\,\rangle$ gilt

$$\hat{a}^\dagger\,|\,n\,\rangle = \sqrt{n+1}\,|\,n+1\,\rangle \qquad \text{und} \qquad \hat{a}\,|\,n\,\rangle = \sqrt{n}\,|\,n-1\,\rangle\ .$$

Solch ein harmonischer Oszillator befinde sich nun in thermischen Gleichgewicht mit einem Wärembad der Temperatur T (bei fixer mittlerer Teilchenzahl $\langle\,\hat{n}\,\rangle$). Der Zustand des Systems ist daher beschrieben durch den kanonischen Dichteoperator $\hat{\rho}_{\mathrm{K}} = \exp(-\beta\,\hat{H})/Z_{\mathrm{K}}$.

(a) Berechnen Sie die mittlere Teilchenzahl $\langle\,\hat{n}\,\rangle_{\hat{\rho}_{\mathrm{K}}}$ (siehe Vorlesung), die mittlere quadratische Teilchenzahl $\langle\,\hat{n}^2\,\rangle_{\hat{\rho}_{\mathrm{K}}}$, sowie die daraus resultierende Varianz der Teilchenzahl $(\Delta\hat{n})^2 = \langle\,\hat{n}^2\,\rangle - \langle\,\hat{n}\,\rangle^2$. Wie hängen diese Größen mit der mittleren Energie und Varianz der Energie zusammen?

(b) Berechnen Sie die Entropie $S(\hat{\rho}_{\mathrm{K}}) = -\,\mathrm{Sp}\big(\hat{\rho}_{\mathrm{K}}\,\ln(\hat{\rho}_{\mathrm{K}})\big)$.

(c) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle\,\hat{x}\,\rangle_{\hat{\rho}_{\mathrm{K}}}$, $\langle\,\hat{x}^2\,\rangle_{\hat{\rho}_{\mathrm{K}}}$, $\langle\,\hat{p}\,\rangle_{\hat{\rho}_{\mathrm{K}}}$, und $\langle\,\hat{p}^2\,\rangle_{\hat{\rho}_{\mathrm{K}}}$, sowie die Varianzen $(\Delta\hat{x})^2$ und $(\Delta\hat{p})^2$ für das kanonische Ensemble. Wie lässt sich die (rechte Seite der) Unschärferelation $\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} =?$ durch die Temperatur und durch die mittlere Teilchenzahl ausdrücken?

Kreuzerl für: 10; 11(a); 11(b); 11(c); 12(a+b) ; 12(c)