Übung zur Vorlesung
Theoretische Physik IV

WS 2016/2017 **Blatt 6** **01.12.2016**

Aufgabe 16 *Herleitung des kanonischen Ensembles*

Betrachten Sie ein kanonisches Ensemble, dass sich aus zwei Systemen 1 und 2 zusammensetzt. Hierbei können beide Systeme Wärme miteinander austauschen. System 2 sei ein Reservoir, das viel mehr Freiheitsgrade aufweist als System 1. Die Energie des Gesamtsystems sei $E = H_1 + H_2$ wobei H_1 die Energie von System 1 und H_2 die Energie von System 2 darstellt. Das Reservoir sei nun gegeben durch ein ideales Gas.

a) Zeigen Sie, dass die Anzahl aller Mikrozustände $\Gamma_2(E - H_1)$ sich auf die Entwicklung von

$$\left(1 - \frac{H_1}{E}\right)^{3N_2/2} \tag{1}$$

zurückführen lässt. Zeigen Sie darüber hinaus, dass die Entwicklung der Entropie S_2 des Reservoirs aus der Entwicklung des folgenden Logarithmus folgt

$$\ln\left(1 - \frac{H_1}{E}\right). \tag{2}$$

(1 Punkt)

b) Zeigen Sie nun, dass

$$\ln\left(1 - \frac{H_1}{E}\right) \approx -\frac{H_1}{E} \tag{3}$$

gilt. Zeigen Sie darüber hinaus, dass die Näherung

$$\left(1 - \frac{H_1}{E}\right)^{3N_2/2} \approx 1 - \frac{3N_2}{2}\frac{H_1}{E} \tag{4}$$

hingegen für große Teilchenzahlen keine korrekten Ergebnisse liefert. Verwenden Sie, dass $1 \ll N_1 \ll N_2$. Des Weiteren skaliert H_1 mit N_1 und E mit der Gesamtteilchenanzahl $N_1 + N_2$. *(1 Punkt)*

Aufgabe 17

Betrachten Sie die von-Neumann Entropie, die durch folgende Formel gegeben ist

$$S = -k_B \langle \ln \hat{\rho} \rangle = -k_B \mathrm{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}). \tag{5}$$

a) Zeigen Sie, dass die Entropie ihr Maximum annimmt, falls die Dichtematrix $\hat{\rho}$ als gewichtete Summe von Projektionen auf eine Orthonormalbasis $\{|\phi_n\rangle\}$ in der Form

$$\hat{\rho} = \sum_n \frac{1}{W} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \tag{6}$$

dargestellt werden kann, wobei die Normierungskonstante W gegeben ist durch $W = \mathrm{Tr}\left(\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\right)$. In diesem Fall gilt $S = k_B \ln W$. *(1 Punkt)*

b) Zeigen Sie dass stets $S \geq 0$ gilt und dass $S = 0$ für reine Zustände erfüllt ist. *(1 Punkt)*

c) Betrachten Sie nun zwei statistisch unabhängige Subsysteme A und B. Die Dichtematrix des Gesamtsystems ist dann gegeben durch das Tensorprodukt der Dichtematrizen der Subsysteme $\hat{\rho} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$. Zeigen Sie, dass die Entropie des Gesamtsystems sich in diesem Fall aus der Summe der Entropien der Subsysteme ergibt

$$S(\hat{\rho}) = S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_B). \tag{7}$$

(1 Punkt)

d) In dieser Unteraufgabe sollen Sie zeigen, dass die Entropie S eine konkave Funktion ist. Nehmen Sie hierzu zwei beliebige Dichtematrizen eines Systems $\hat{\rho}_1$ und $\hat{\rho}_2$ und $0 < \lambda \leq 1$. Zeigen Sie dann folgende Relation

$$S(\lambda\hat{\rho}_1 + (1-\lambda)\hat{\rho}_2) \geq \lambda S(\hat{\rho}_1) + (1-\lambda) S(\hat{\rho}_2). \tag{8}$$

(1 Punkt)

Hinweis: Sie dürfen verwenden, dass für positive Operatoren $\hat{X}$ und $\hat{Y}$ stets folgende Relation erfüllt ist: $\mathrm{Tr}(\hat{X} \ln \hat{Y}) - \mathrm{Tr}(\hat{X} \ln \hat{X}) \leq \mathrm{Tr}\,\hat{Y} - \mathrm{Tr}\,\hat{X}$.

Aufgabe 18

Betrachten Sie ein Großkanonisches Ensemble und nehmen Sie an, dass die Dichtematrix durch folgende Formel gegeben ist

$$\hat{\rho} = \frac{z^{\hat{N}} e^{-\beta \hat{H}(\hat{N})}}{\mathcal{Q}} \tag{9}$$

Hierbei ist $\mathcal{Q}$ die großkanonischen Zustandssumme mit $\mathcal{Q}(z, V, T) = \sum_n z^n Q_n(V, T)$, $Q_n(V, T)$ die kanonische Zustandsumme, $z = e^{\mu/(k_B T)}$ die Fugazität, μ das chemische Potential und $\hat{N}$ der Teilchenzahloperator.

a) Verwenden Sie Gl.(1) und zeigen Sie, dass die Entropie folgende Form annimmt

$$S = \frac{U}{T} - \frac{\mu\langle\hat{N}\rangle}{T} + k_B \ln \mathcal{Q}. \tag{10}$$

(1 Punkt)

b) Verwenden Sie daraufhin die Gibbs-Duhem relation

$$TS - U + \mu N = pV \tag{11}$$

mit dem Druck p, dem Volumen V und der inneren Energie U und beweisen Sie, dass

$$pV = k_B T \ln \mathcal{Q}. \tag{12}$$

(1 Punkt)