INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK



Prof. Dr. Wolfram Brenig Erik Wagner

Thermodynamik und Quantenstatistik

WS 2019/20

4. Übungsblatt

Abgabe: Di, 19.11.2019 bis 11:30 Uhr, Kasten neben A316

Übungsblätter gibt es unter https://www.tu-bs.de/theophys/edu/wise-1920/thermo1920.

13. Wissensfragen (3 Punkte)

Bitte benennen Sie alle verwendeten Symbole und Größen.

- (a) Was ist ein Dichteoperator?
- (b) Was ist ein mikrokanonisches Ensemble?

14. Dichteoperatoren von Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen (15 Punkte)

Für die Komponenten S^{α} mit $\alpha \in \{x, y, z\}$ des **Spinoperators** \vec{S} eines quantenmechanischen Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchens gilt $\left[S^{\alpha}, S^{\beta}\right] = i\hbar \, \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \, S^{\gamma}$ und $\vec{S}^2 = \sum_{\alpha} S^{\alpha} S^{\alpha} = \frac{3}{4} \hbar^2$.

- (a) Zeigen Sie, dass für die S^{α} gilt: Sp $S^{\alpha} = 0$.
- (b) i. Welche Bedingung muss ein **Dichteoperator** für ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen erfüllen?
 - ii. Beweisen Sie, dass

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{u}\,\vec{\sigma})$$

mit $\vec{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ einem Vektor mit den drei Paulimatrizen als Komponenten und \vec{u} einem reellen Parametervektor, die von Ihnen aufgestellten Bedingungen erfüllt. Nehmen Sie an, dass $\rho \geq 0$ für geeignete Werte von \vec{u} erfüllt ist.

- (c) Zeigen Sie, dass \vec{u} identisch ist mit dem Mittelwert $\langle \vec{\sigma} \rangle = \operatorname{Sp}(\rho \vec{\sigma})$.
- (d) Der Dichteoperator habe die Eigenwerte ρ_1 und ρ_2 . Drücken Sie Sp ρ und Sp ρ^2 durch ρ_1 und ρ_2 aus.
- (e) Begründen Sie, dass $u := |\vec{u}| \le 1$ sein muss. Welche Eigenschaft von \vec{u} charakterisiert einen **reinen Zustand**? *Hinweis:* Betrachten Sie zunächst $(\vec{u} \cdot \vec{\sigma})^2$ und vereinfachen Sie damit ρ^2 . Nutzen Sie dann Ihre Ergebnisse aus (d), um die Eigenwerte in Abhängigkeit von u auszudrücken.
- (f) Nun betrachte man *N* Teilchen in einem Neutronenstrahl. Die Hälfte der Teilchen sei in Richtung der positiven *x*-Achse, die andere Hälfte in Richtung der negativen *y*-Achse ausgerichtet.
 - i. Geben Sie den Dichteoperator an.
 - ii. Wie sieht der Dichteoperator aus, wenn man über die Spins der zweiten Hälfte gar nichts weiß?

15. Eigenstate Thermalization Hypothesis (ETH) (12 Punkte)

Ein quantenmechanisches System sei aus 'typischer' kondensierter Materie zusammengesetzt und werde durch einen Hamiltonoperator $H=\sum_{\alpha}E_{\alpha}\left|E_{\alpha}\right\rangle\left\langle E_{\alpha}\right|$ mit Eigenzuständen $\left|E_{\alpha}\right\rangle$ zu Eigenenergien E_{α} beschrieben.

(a) Eine Studierende bringt das System am Anfang ihrer Bachelorarbeit ganz vorsichtig, z.B. in den ersten 5 Tagen (wie auch immer), in einen Zustand $|\Psi(t=0)\rangle$. Schätzen Sie grob ab, aus wie vielen Eigenzuständen der Zustand $|\Psi(t=0)\rangle$ typischerweise superponiert ist.

Hinweis: Erinnern Sie sich an die Unschärferelation.

Nutzen Sie ihre Ergebnisse aus Aufgabe 12, um die Zustandsdichte abzuschätzen.

(b) Über welche Zeitspanne müsste die Studierende den Zustand präparieren, damit es ein einzelner Energieeigenzustand werden kann?

Eine Form der sog. "Eigenstate Thermalization Hypothesis" (ETH) besagt, dass sich der **quantenmechanische Erwartungswert** $\langle \widehat{A} \rangle(t) = \langle \Psi(t) | \widehat{A} | \Psi(t) \rangle$ einer 'typischen' Observablen \widehat{A} in einem 'typischen' Zustand $|\Psi(t=0)\rangle$ mit Energieunschärfe ΔE im Limes langer Zeiten so verhält wie der **thermodynamische statistische Mittelwert** in einem mit demselben Energieintervall ΔE gleichverteilten Ensemble ρ (mikrokanonisches Ensemble) - wenn die Diagonalmatrixelemente $\langle E_{\alpha} | \widehat{A} | E_{\alpha} \rangle$ hinreichend schwach variierende Funktionen der Energie E_{α} sind.

(c) Zeigen Sie nun, dass für ein System, das in einem Zustand Ψ zur Zeit t=0

$$|\Psi(t=0)\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |E_{\alpha}\rangle$$
 (1)

präpariert wird, der Langzeitlimes des quantenmechanischen Erwartungswerts \overline{A} einer Observablen \widehat{A} , definiert als

$$\overline{A} \equiv \lim_{\tau \to \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} \left\langle \Psi(t) \middle| \widehat{A} \middle| \Psi(t) \right\rangle dt, \qquad (2)$$

durch

$$\overline{A} = \sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 A_{\alpha\alpha} \tag{3}$$

gegeben ist. Dabei sind die $A_{\alpha\alpha}=\langle E_{\alpha}|\widehat{A}|E_{\alpha}\rangle$, die Zustände $|E_{\alpha}\rangle$ Eigenzustände des Hamilton-Operators zur Energie E_{α} und $c_{\alpha}\in\mathbb{C}$.

Hinweis: Überlegen Sie sich, wie $|\Psi(t)\rangle$ mit $|\Psi(t=0)\rangle$ zusammenhängt.

(d) Der **Mittelwert im mikrokanonischen Ensemble** der Observablen \widehat{A} ist gegeben durch

$$\langle A \rangle_{\text{mikro}} \equiv \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\alpha'=1}^{\mathcal{N}} A_{\alpha'\alpha'},$$
 (4)

wobei die Summe über alle Zustände $|E_{\alpha'}\rangle$ in einem kleinen Energieintervall ΔE um E mit insgesamt $\mathcal N$ Zuständen läuft.

Zeigen Sie, dass unter den Annahmen der ETH gilt:

$$\overline{A} \approx \langle A \rangle_{\text{mikro}}$$
 (5)