
Theoretische Physik (Master)

1. Übung

Wintersemester 2020/21

1. Temperatur und Entropie in Zwei-Niveau-Systemen 7 Punkte

Betrachten Sie ein System mit zwei Zuständen der Energien \mathcal{E}_1 und \mathcal{E}_2 , und machen Sie sich klar, weshalb Sie dieses effektiv als Spin-1/2 verstehen können. Nehmen Sie an, dass dieses System Teil eines Ensembles von N unabhängigen Zwei-Niveau-Systemen mit identischen Eigenschaften ist.

a) 1 Punkt

Nehmen Sie zunächst an, dass auch die Gesamtenergie E und die Gesamtteilchenzahl N des Ensembles fest sind. In welcher Klasse ist dieses Ensemble? Machen Sie sich klar, dass die Angabe von (E, N) im Allgemeinen mit einer Vielzahl unterschiedlicher Mikrozustände des Ensembles kompatibel ist. Argumentieren Sie, dass im thermodynamischen Gleichgewicht die Wahrscheinlichkeiten p_i aller dieser kompatiblen Mikrozustände gleich groß sein müssen. Führen Sie nun die Entropie $S = -\sum_i p_i \ln(p_i)$ ein, und berechnen Sie die Werte von p_i , für die S maximal wird. Ist die Entropie ein gutes Maß für das thermodynamische Gleichgewicht eines abgeschlossenen Ensembles?

b) 1 Punkt

Betrachten Sie im Folgenden ein mikrokanonisches Ensemble in dem m der Zwei-Niveau-Systeme im Zustand der Energie \mathcal{E}_1 sind. Wieviele Mikrozustände realisieren diese Situation, und was ist der Ausdruck der Entropie für allgemeines N und m im thermodynamischen Gleichgewicht? Berechnen Sie die Entropie konkret im Falle eines einzelnen Spin-1/2 für $\mathcal{E}_1 = \mathcal{E}_2$ und $\mathcal{E}_1 \neq \mathcal{E}_2$. Können Sie Ihrem Ergebnis eine einfache Interpretation geben?

c) 1 Punkt

Berechnen, skizzieren und diskutieren Sie für das in Teil b) betrachtete Ensemble die Entropie S und Temperatur T für feste große Teilchenzahl N in Abhängigkeit der Energie E (die Temperatur ist definiert durch $T^{-1} = dS/dE|_N$). Nehmen Sie dafür an, dass $\mathcal{E}_1 > \mathcal{E}_2$.

Hinweis: Sie können die Näherung $\log(x!) \approx x \log(x) - x$ benutzen. Weiterhin können Sie zur Vereinfachung annehmen, dass zu jeder Energie nur ein Wert von m korrespondiert.

d) 1 Punkt

Betrachten Sie jetzt zwei beliebige mikrokanonische Ensembles A and B mit Energien $E_{A,B}$ und Teilchenzahlen $N_{A,B}$. Das Ensemble $i = A, B$ habe \mathcal{N}_i Mikrozustände, die mit der Angabe von E_i und N_i kompatibel sind. Wenn die Ensembles nun in Kontakt gebracht werden und Energie und Teilchen austauschen können, stellt sich ein neues thermodynamisches Gleichgewicht ein. Wie ist dieses im Gesamtsystem definiert? Beschränken Sie sich im Folgenden auf den Fall, dass die Teilsysteme nur Energie austauschen können, und drücken Sie die Gesamtentropie mittels einer Summe über Mikrozustände aus, die eine gegebene Aufteilung der Gesamtenergie $E_A + E_B$ auf die Teilsysteme realisieren. Nähern Sie die Summe durch ihren größten Beitrag und zeigen Sie, dass dieser Beitrag über die Maximierung der Gesamt-Entropie der beiden Teilsysteme mit jeweils gegebener Energie E_i berechnet werden kann. Was folgt daraus für die Temperaturen der Teilsysteme A und B im Gleichgewicht?

e) 1 Punkt

Betrachten Sie jetzt ein allgemeines kanonisches Ensemble von Zwei-Niveau-Systemen. Durch welche Angaben ist dieses bestimmt? Ist Entropie-Maximierung allein nun immer noch ein gutes Kriterium für das Erreichen des thermodynamischen Gleichgewichts? Nutzen Sie die Definitionen des chemischen

Potentials μ ,

$$\mu = -T \left. \frac{\partial S}{\partial N} \right|_E, \quad (1)$$

um gegebenenfalls eine andere Größe anzugeben, die an Stelle der Entropie im Gleichgewicht extremal wird. Ist das Gleichgewicht im Maximum oder Minimum dieser Größe erreicht?

f)

1 Punkt

Betrachten Sie nun konkret das Ensemble der N Zwei-Niveau-Systeme aus Teilaufgabe b) mit dem Unterschied, dass diese jetzt ein kanonischen Ensemble bilden. Was ist nun die Wahrscheinlichkeit p_i eines gegebenen Mikrosustands mit Energie E_i im thermodynamischen Gleichgewicht? Berechnen Sie ausgehend von den p_i die Entropie, und drücken Sie diese durch die mittlere Energie E und die in der letzten Aufgabe eingeführten Größe aus, deren Extremisierung das thermische Gleichgewicht des kanonischen Ensembles definiert. Wie lässt sich diese Größe folglich aus der kanonischen Zustandssumme berechnen?

g)

1 Punkt

Skizzieren und diskutieren Sie nun das Verhalten der Entropie des kanonischen Ensembles, indem Sie die in Aufgabenteil d) eingeführte Größe für $\mathcal{E}_2 < \mathcal{E}_1$ berechnen und passend ableiten. Berechnen und diskutieren Sie weiterhin das Verhalten der spezifische Wärme $C(T) = T \partial S / \partial T$.

2. Quantenstatistische Entropie

1 Punkt

Betrachten Sie ein quantenmechanisches kanonisches Ensemble, und geben Sie den Ausdruck der quantenstatistische Entropie $S[\hat{\rho}]$ als Funktional des Dichtematrix-Operators an. Warum kann man die Dichtematrix eines kanonischen Ensembles im Gleichgewicht aus der Maximierung der Entropie unter der Nebenbedingung fester mittlerer Energie (und einer weiteren Nebenbedingung) herleiten? Führen Sie diese Maximierung durch, und vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem Ihnen bekannten Ausdruck der Dichtematrix im kanonischen Ensemble.