Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky
Príklady z cvičenia

cviko bolo 13.3.2019 *matica hustoty, doplnky k štatistickej fyzike*

Akékoľvek otázky smelo smerujte na `juraj(a)tekel(b)gmail(c)com`

Matica hustoty

Príklad 1 (Matica hustoty pre dvoj hladinový systém.)**.** Majme dvoj hladinový systém, v ktorom bázové stavy označíme ako $|1\rangle$ a $|0\rangle$. Okrem toho zaveďme označenie

$$|a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle + |0\rangle\right) \ , \ |b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle - |0\rangle\right) \ . \quad (1)$$

a. ■ Ako vyzerá matica hustoty pre ensambel, ktorý obsahuje

- iba stavy $|1\rangle$,
- iba stavy $|a\rangle$,
- stav $|1\rangle$ s pravdepodobnosťou p a stav $|0\rangle$ s pravdepodobnosťou $1-p$,
- stav $|1\rangle$ s pravdepodobnosťou $1/2$ a stav $|a\rangle$ s pravdepodobnosťou $1/2$.

b. ■ Vypočítajte $\mathrm{Tr}\left(\rho\right)$ a $\mathrm{Tr}\left(\rho^2\right)$ pre matice z predchádzajúcej úlohy a overte, že pre strednú energiu dostaneme zo vzťahu $\mathrm{Tr}\left(\rho H\right)$ očakávaný výsledok.

c. Stavy $|a\rangle, |b\rangle$ tvoria tiež bázu. Vyjadrite matice hustoty z úlohy a. v tejto báze a zopakujte pre ne časť b.

Príklad 2 (O matici hustoty.)**.** Ukážte, že pre maticu hustoty

$$\rho = \sum_x |x\rangle\, p_x \,\langle x| \quad (2)$$

platí

$$\mathrm{Tr}\left(\rho\right) = 1 \quad (3)$$

$$\bar{A} = \mathrm{Tr}\left(\rho A\right) \quad (4)$$

■ $$\mathrm{Tr}\left(\rho^2\right) \leq 1 \quad (5)$$

■ $$\mathrm{Tr}\left(\rho^2\right) = 1 \Leftrightarrow \rho \text{ reprezentuje čistý stav.} \quad (6)$$

Príklad 3 (Entropia kanonického súboru a matica hustoty.)**.** Entropia sa pomocou matice hustoty ρ počíta ako

$$S = -k\mathrm{Tr}\left(\rho \log \rho\right) \ . \quad (7)$$

Pre maticu hustoty kanonického súboru

$$\rho = \frac{1}{Z}e^{-\beta H} = \frac{1}{Z}\sum_n |n\rangle\, e^{-\beta E_n}\, \langle n| \quad (8)$$

ukážte, že platí vzťah $S = (E-F)/T$.

Entropia

Príklad 4 (O entropií informačného zdroja.)**.** Skúmajme rýchlosť častice plynu v jednom rozmere.

a. Aká hustota pravdepodobnosti $f_1(v)$ pre túto rýchlosť maximalizuje entropiu $S = \langle \log f_1 \rangle_{f_1}$, ak je daná stredná veľkosť rýchlosti častice $\langle |v| \rangle = u$?

b. Aká je hustota pravdepodobnosti $f_2(v)$ pre túto rýchlosť maximalizuje entropiu S, ak je daná stredná kinetická energia častice $\left\langle mv^2/2 \right\rangle = mu^2/2$?

c. Ktorá z týchto dvoch informácií nám poskytuje viac informácií o rýchlosti častice? (Zaujíma nás teda rozdiel výsledných entropií v oboch prípadoch.)

Príklad 5 (O entropií čiernej diery.)**.** Entropia čiernej diery je priamo úmerná druhej mocnine jej hmotnosti. Aká je závislosť jej teploty a jej tepelnej kapacity od hmotnosti?

Variačné metódy

Príklad 6 (Extremalizovanie entropie bez väzieb.). Ukážte, že extremalizovaním entropie dostaneme rovnomerné rozdelenie (mikrokanonické) a že Lagrangeov multiplikátor súvisí s entropiou.

Príklad 7 (Extremalizovanie entropie s väzbou na strednú energiu.). Ukážte, že extremalizovaním entropie pri fixovanej strednej hodnote energie dostávame kanonické rozdelenie a že Lagrangeov multiplikátor súvisí s teplotou.

Príklad 8 (Extremalizovanie entropie s väzbou na strednú energiu a disperziu energie.). Ukážte, že extremalizovaním entropie pri fixovanej strednej hodnote energie a strednej hodnote disperzie energie dostávame nejaké divné rozdelenie. S čím v tomto prípade súvisí Lagrangeov multiplikátor?

Príklad 9 (Kanonické rozdelenie revisited.). Lagrangeovskou variáciou ukáže, že ak pri zadanej väzbe $\sum p_i = 1$ extremalizujeme $F = \bar{E} - TS$ dostaneme kanonické rozdelenie. Ukážte tiež, aký je význam multiplikátora. Aká je hodnota voľnej energie v tomto systéme?

Klasická a kvantová štatistická fyzika

Príklad 10 (■ Faktor $1/(2\pi\hbar)$ revisited). Majme jednorozmerný harmonický oscilátor.

a. Ako vyzerajú pre zadanú hodnotu energie E krivky (klasického) časového vývoja vo fázovom diagrame. Akú plochu ohraničujú?

b. Koľko stavov s energiou E alebo menšou má kvantový harmonický oscilátor?

c. Na akú veľkú plochu v klasickom fázovom priestore pripadá jeden stav, aby sme v predchádzajúcich dvoch častiach dostali kompatibilné výsledky?

Príklad 11 (Faktor $1/(2\pi\hbar)$ naposledy.). V kvantovej štatistike je štatistická suma daná ako stopa matice[1]

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\hat{H}}\right) \ , \tag{9}$$

kde $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{x})$ je hamiltonián systému. Uvažujeme jednorozmerný prípad. Majme úplný systém stavov s ostrou hodnotou polohy a hybnosti $|x\rangle, |p\rangle$

$$\int dx\, |x\rangle \langle x| = \int dp\, |p\rangle \langle p| = \hat{1} \tag{10}$$

$$\langle x|p\rangle = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \ . \tag{11}$$

Ukážte, že v limite malého $\hbar$ prejde (9) na

$$Z = \int \frac{dx\, dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\beta E(x,p)} \ . \tag{12}$$

Príklad 12 (Mikrokanonický plyn voľných častíc). Majme plyn N nerelativistických častíc v objeme V, ktoré navzájom neinteragujú a ktoré majú fixovanú energiu E. Nájdite jeho entropiu integrovaním v klasickom fázovom priestore. Porovnajte s kvantovomechanickým výsledkom.

Príklad 13 (■ Kanonický plyn voľných častíc). Majme plyn N nerelativistických častíc v objeme V pri teplote T, ktoré navzájom neinteragujú.

a. Nájdite jeho štatistickú sumu, voľnú energiu a entropiu integrovaním v klasickom fázovom priestore.

b. Aký je tlak na plyn? Aký je vzťah medzi strednou energiou a týmto tlakom?

Príklad 14 (Klasická štatistika harmonického oscilátora.). V tejto úlohe nás bude zaujímať jednorozmerný lineárny harmonický oscilátor pri teplote T.

a. Nájdite štatistickú sumu kvantovomechanického oscilátora, sčítavaním cez energetické hladiny. Nájdite jeho voľnú energiu.

b. ■ Nájdite štatistickú sumu klasického oscilátora integrovaním vo fázovom priestore. Nájdite jeho voľnú energiu.

c. Ukážte, že v klasickej limite prechádza kvantový výsledok na klasický. Pri akých teplotách je kvantový oscilátor dobre opísateľný klasickým?

[1] V tomto príklade budeme dávať striešky nad operátory, lebo sa to ukáže užitočné.

Príklad 15 (Gibbsov paradox). a. Ukážte, že štatistická suma jednej voľnej klasickej častice je

$$Z_1 = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi mkT)^{3/2} \ . \qquad (13)$$

b. Rozmyslite si, že pre plyn N rozlíšiteľných častíc platí $Z = Z_1^N$ a vypočítajte voľnú energiu takéhoto plynu.

c. Uvažujme teraz dva takéto plyny oddelene, v rovnováhe s tým istým okolím. Ukážte, že neplatí $F(2N, 2V) = 2F(N, V)$. Avšak ak plyny spojíme, stav sústavy sa nezmení a mali by sme dostať, že voľná energia po spojení je súčet voľných energií pred spojením.

d. Ukážte, že ak zoberieme $Z = Z_1^N/N!$ problém sa vyrieši. Rozmyslite si, že to zodpovedá nerozlýšiteľnosti častíc plynu.

Príklad 16 (Rotačné stupne voľnosti kvantovo). Majme klasický plyn N dvojatómových molekúl v objeme V, ktoré môžu okrem posuvného pohybu vykonávať aj rotačný pohyb, ale navzájom neinteragujú. Okrem toho sú v rovnováhe s tepelným rezervoárom s teplotou T. Rotačný pohyb jednej molekuly je podľa kvantovej mechaniky kvantovaný a možné hodnoty momentu hybnosti molekuly sú

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \ , \ l = 0, 1, \dots \ , \qquad (14)$$

pričom l-tá hladina je $2l+1$-krát degenerovaná.

a. Zapíšte štatistickú sumu pre rotačné stupne voľnosti jednej molekuly. (Pripomienka : $E = L^2/(2I)$.)

b. V limite veľmi vysokých teplôt prejde táto suma v semiklasickom priblížení na integrál. Vypočítajte ho a porovnajte s výsledkom predchádzajúcej úlohy.

c. V limite veľmi nízkych teplôt si v tejto sume zahrá iba prvý člen (prečo?). Aký to má dôsledok pre dynamiku plynu.

d. Pomocou Euler-McLaurinovho vzorca dopočítajte niekoľko ďalších korekcií. Tento vzorec hovorí, že pre funkciu $f(x)$ sa dá suma $\sum f(n)$ vyjadriť nasledovne

$$\sum_{n=a}^{b} f(n) = \int_a^b dx f(x) + \frac{1}{2}\left[f(a) + f(b)\right] + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{B_{2j}}{(2j)!}\left(f^{(2j-1)}(a) - f^{(2j-1)(b)}\right)$$

kde B_n sú Bernouliho čísla. (Viac rád prezdradí Google.)

e. Nájdite v tabuľkách numercické hodnoty vystupujúcich veličín pre niektoré plyny a skúste si rozmyslieť, pri akých teplotách možno použiť klasické priblíženie, pri akých teplotách je rotačný pohyb molekúl zamrznutý a ako presný je pri danej teplote výraz daný iba niekoľkými členmi v úlohe (d).