

Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky

Príklady z cvičenia

cviko nebolo 10.3.2020

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 zavedme označenie

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

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 $\text{Tr}(\rho)$ a $\text{Tr}(\rho^2)$ pre maticu z predchádzajúcej úlohy a overte, že pre strednú energiu dostaneme zo vzťahu $\text{Tr}(\rho H)$ očakávaný výsledok.

c. Stavy $|a\rangle, |b\rangle$ tvoria tiež bázu. Vyjadrite maticu 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

$$\text{Tr}(\rho) = 1 \quad (3)$$

$$\bar{A} = \text{Tr}(\rho A) \quad (4)$$

$$\blacksquare \text{Tr}(\rho^2) \leq 1 \quad (5)$$

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

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

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

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 entropii informačného zdroja.). Skúmame 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 $\langle mv^2/2 \rangle = mu^2/2$?

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

Príklad 5 (O entropii 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.

- Ako vyzerajú pre zadanú hodnotu energie E krivky (klasického) časového vývoja vo fázovom diagrame. Akú plochu ohraničujú?
- Koľko stavov s energiou E alebo menšou má kvantový harmonický oscilátor?
- 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 matice¹

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

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

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 $|x\rangle, |p\rangle$

$$\int dx |x\rangle \langle x| = \int dp |p\rangle \langle p| = \hat{1} \quad (10)$$

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

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

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

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.

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

- Nájdite štatistickú sumu kvantovomechanického oscilátora, sčítaním cez energetické hladiny. Nájdite jeho voľnú energiu.
- Nájdite štatistickú sumu klasického oscilátora integrovaním vo fázovom priestore. Nájdite jeho voľnú energiu.
- Ukážte, že v klasickej limite prechádza kvantový výsledok na klasický. Pri akých teplotách je kvantový oscilátor dobre opísateľný klasickým?

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

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

- 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 nerozlišiteľnosti 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

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

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

- a. Zapište 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

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

kde B_n sú Bernoulliho čísla. (Viac rád prezradí Google.)

- e. Nájdite v tabuľkách numerickej 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).