8. Hausübung zur Quantentheorie II, SS 2007

(abzugeben am Donnerstag, 14.06.2007)

Aufgabe H21 *Thermodynamisches Gleichgewicht* (5 Punkte)

Ein Gemisch befindet sich dann im thermodynamischen Gleichgewicht, wenn die Entropie $S = -\,\mathrm{tr}\,(\varrho \log \varrho) = -\sum_i \lambda_i \log \lambda_i$ maximal ist. Hier sind λ_i die Eigenwerte von ϱ. Wegen $0 = i\hbar\partial_t\varrho = [H, \varrho]$ läßt sich im Gleichgewicht mit ϱ auch der Hamiltonoperator H diagonalisieren und habe die Eigenwerte E_i.

a) Nehmen Sie an, daß das Gemisch mit der Umgebung Energie derart austauscht, daß der Mittelwert seiner Energie, $\langle E\rangle = \mathrm{tr}\,(\varrho H) = \sum_i \lambda_i E_i$, konstant bleibt. Berücksichtigen Sie diese Nebenbedingung sowie die Spurerhaltung von ϱ mit Hilfe von Lagrange-Multiplikatoren, und maximieren Sie S. Zeigen Sie somit, daß λ_i durch die Boltzmann-Verteilung gegeben ist. Wie lautet die Entropie als Funktion von $\langle E\rangle$ und der Zustandssumme Z?

b) Der zur Nebenbedingung der Energieerhaltung gewählte Lagrange-Multiplikator heiße β. Zeigen Sie, daß $\langle E\rangle$ und die Zustandssumme gemäß $\langle E\rangle = -\partial_\beta \log Z(\beta)$ zusammenhängen. Betrachten Sie nun den harmonischen Oszillator mit auf Null verschobener Grundzustandsenergie, d.h.

$$E_n = n\,\mathcal{E} \qquad \text{für} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \; .$$

Was ist die mittlere Energie $\langle E\rangle$ für diesen Fall (Bosonen)? Und für den fermionischen Fall (d.h. für $n = 0, 1$)?

Aufgabe H22 *Shannon-Entropie und von Neumann-Entropie* (5 Punkte)

Die Entropie einer klassischen Wahrscheinlichkeitsverteilung $\{p_1, ..., p_N\}$ lautet

$$H := -\sum_{j=1}^{N} p_j \log p_j$$

und wird als Shannon-Entropie bezeichnet.
Die Entropie eines quantenmechanischen Zustands, der durch den Dichteoperator ϱ beschrieben wird, ist gegeben durch die von Neumann-Entropie

$$S := -\,\mathrm{tr}\,(\varrho \log \varrho) \; .$$

Zeigen Sie, daß bei Präparation von nicht-orthogonalen Quantenzuständen mit Wahrscheinlichkeiten p_j diese beiden Entropien i.a. nicht identisch sind. Betrachten Sie hierzu das folgende Beispiel: Ein Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen werde mit *gleicher* Wahrscheinlichkeit in einem der drei Zustände

$$|\psi_1\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\psi_2\rangle \doteq \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \qquad |\psi_3\rangle \doteq \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

präpariert. Wie groß sind H und S?
Betrachten Sie nun die Verallgemeinerung, daß ein Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen mit gleicher Wahrscheinlichkeit in einem von N verschiedenen reinen Zuständen präpariert wird. Wie groß sind H und S im Grenzwert $N \to \infty$?

b.w.

Aufgabe H23 *Nichtlineare Schrödingergleichung?* (5 Punkte)

Zeigen Sie, daß eine nichtlineare Modifikation der Schrödingergleichung (die anderen Postulate der Quantenmechanik sollen ungeändert bleiben) den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik verletzt. Betrachten Sie dazu für den Dichteoperator eine konvexe Kombination zweier Projektoren auf normierte ungleiche Zustände $|u\rangle$ und $|v\rangle$, d.h.

$$\varrho \;=\; \lambda\,|u\rangle\langle u| \;+\; (1-\lambda)\,|v\rangle\langle v| \qquad \text{mit} \quad 0<\lambda<1\;.$$

a) Berechnen Sie die Eigenwerte von ϱ als Funktion des Absolutquadrats des Skalarprodukts $|\langle u|\,v\rangle|^2 =: x$. Zeigen Sie, daß die von Neumann-Entropie $S = -\,\mathrm{tr}\,(\varrho \log \varrho)$ für jedes λ die Ungleichung $\mathrm{d}S/\mathrm{d}x < 0$ erfüllt.

b) Für nichtlineare Modifikationen der Schrödingergleichung gilt, daß es mindestens zwei Zustände gibt, deren Skalarprodukt-Betrag unter Zeitentwicklung nicht erhalten ist (Wigners Theorem).

   Gegeben sei ein vollständiges Orthonormalsystem von Zuständen $|u_k\rangle$, deren Orthogonalität zeitlich erhalten sei. Machen Sie sich klar, daß zu jeder Zeit

$$\sum_k |\langle u_k|\,v\rangle|^2 \;=\; 1 \quad .$$

   Zeigen Sie damit, daß es immer zwei Zustände gibt, deren Skalarprodukt mit der Zeit *zunimmt*, so daß deren Mischung die Eigenschaft hat, daß ihre Entropie S mit der Zeit *abnimmt*.