Institut für Theoretische Physik
JLU Gießen
C. Fischer, G. Eichmann, C. Popovici

Blatt 8
WiSe 2011/12
22. 12. 2011

Übungen zur Statistischen Thermodynamik

Aufgabe 22 (Joule-Thomson-Prozess):

Wir interessieren uns für die *Inversionstemperatur*, jenseits derer ein Gas durch gedrosselte Entspannung gekühlt werden kann. Betrachten Sie dazu den Joule-Thomson-Prozess für ein Van-der-Waals-Gas mit der Zustandsgleichung

$$\left(p + \frac{a}{V}\right)(V - b) = NkT\,.$$

Der Joule-Thomson-Koeffizient ist gegeben durch

$$\delta = \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_H = \frac{V}{C_p}(\alpha T - 1)\,, \quad \text{wobei} \quad \alpha = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p\,.$$

(a) Drücken Sie die Zustandsgleichung zunächst durch die dimensionslosen Variablen $\tilde{p} = p/p_c$, $v = V/V_c$ und $t = T/T_c$ aus (siehe Vorlesung). Berechnen Sie den isobaren Ausdehnungskoeffizienten α.

(b) Welche Kurven erhält man für $\tilde{p}(v)$ und $\tilde{p}(t)$, wenn $\delta = 0$ gilt? In welchen Gebieten in der $\{\tilde{p}, v\}$ bzw. $\{\tilde{p}, t\}-$Ebene ist $\delta > 0$?

(c) Kann man Sauerstoff ($T_c = 154K$) bei Zimmertemperatur und Atmosphärendruck mit Hilfe des Joule-Thomson-Verfahrens kühlen, unter der Annahme, dass er sich wie ein Van-der-Waals-Gas verhält? Wie sieht es mit Helium aus ($T_c = 5.2K$)?

Aufgabe 23 (Statistischer Operator):

Ein statistischer Operator ρ ist definiert durch die Eigenschaften: $\rho = \rho^\dagger$, $\rho \geq 0$, $\mathrm{Tr}(\rho) = 1\,.$

(a) Zeigen Sie, dass $\rho = \sum_i p_i \,|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ mit $||\psi_i|| = 1$ alle diese Eigenschaften erfüllt.

(b) Zeigen Sie, dass aus der Definition für ρ folgt:

- $\rho^2 \leq \rho$, wobei $\rho^2 = \rho$ für Reinzustände.
- $\rho(\lambda) = \lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2$ für $0 \leq \lambda \leq 1$ (Konvexität).

(c) Gegeben sei ein quantenmechanisches System, das nur zwei Zustände, z.B. zwei Spineinstellungen, einnehmen kann ('qubit'). Der entsprechende Hilbertraum werde durch die Basisvektoren $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ aufgespannt. Welche Eigenschaften muss der Vektor $\boldsymbol{P} \in \mathbb{R}^3$ erfüllen, damit

$$\rho(\boldsymbol{P}) = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right)$$

Besprechung:
Blatt 8, Theo 5 vom Mittwoch, den 22.12.2011

Aufgabe 22

a) $\tilde{p} = \frac{p}{p_{cr}}, \quad v = \frac{V}{V_{cr}}, \quad t = \frac{T}{T_{cr}}$

$\Rightarrow (\tilde{p} + \frac{3}{v^2})(v - \frac{1}{3}) = \frac{8}{3}t$

$\Rightarrow \alpha = \frac{1}{V}(\frac{\partial V}{\partial T})_p$

$\frac{\partial V}{\partial v} = \dots, \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \dots, \ \Rightarrow \frac{1}{T_{cr}}\tilde{\alpha} = \frac{1}{vT_{cr}}(\frac{\partial v}{\partial t})_{\tilde{p}}$

$\frac{\partial}{\partial t}((\tilde{p} + \frac{3}{v^2})(v - \frac{1}{3})) = \frac{\partial}{\partial t}(\frac{8}{3}t)$

$\Rightarrow \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{8}{3}(\tilde{p} - \frac{3}{v^2} + \frac{2}{v^3})^{-1}$

$\Rightarrow \tilde{\alpha} = \frac{1}{v}\frac{8}{3}(\tilde{p} - \frac{3}{v^2} + \frac{2}{v^3})^{-1}$

$\delta = 0? \quad \Rightarrow \quad \tilde{\alpha}t = 1$

$\frac{\frac{8}{3}t}{(\tilde{p}v - \frac{3}{v} + \frac{2}{v^2})} = 1$

Zustands-Gleichung: $\frac{8}{3}t = (\tilde{p} + \frac{3}{v^2})(v - \frac{1}{3})$

Gleichsetzen: $\Rightarrow -\frac{\tilde{p}}{3} + \frac{6}{v} - \frac{3}{v^2} = 0$

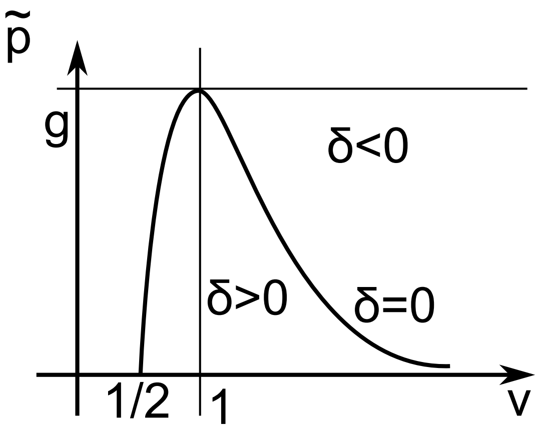
$\Rightarrow \tilde{p}_{inv}(v) = \frac{18}{v^2}(v - \frac{1}{2})$

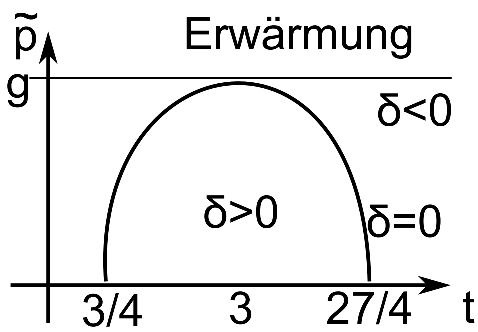
$\tilde{p}_{inv}(v)$ in Zustandsgleichung $\Rightarrow \frac{1}{v} = 3 - 2\sqrt{\frac{t}{3}}$

$\tilde{p}_{inv}(v \to t) = 3(-4t + 8\sqrt{3}t - 9)\delta > 0 \Leftrightarrow \tilde{\alpha}t > 1$

$\frac{8}{3}t = (\tilde{p} + \frac{3}{v^2})(v - \frac{1}{3}) > \tilde{p}v - \frac{3}{v} + \frac{2}{v^2} \Rightarrow \tilde{p}_{inv} > \tilde{p}$

b)





c) Zu Hause!

Aufgabe 23

a) 1)
$$\rho^\dagger = (\sum_i p_i|\psi_i><\psi_i|)^\dagger$$
$$= (\sum_i p_i|\psi_i><\psi_i|) = \rho$$

2)
$$<\phi|\rho|\phi> = \sum_i p_i <\phi|\psi_i><\psi_i|\phi>$$
$$= \sum_i p_i| <\phi|\psi_i> |^2 \geq 0$$
$$tr(\rho) = \sum_n <n|\rho|n> = \sum_{n,i} p_i <n|\psi_i><\psi_i|n>$$
$$= \sum_{n,i} p_i <\psi_i|n><n|\psi_i>$$
$$= \sum_i p_i <\psi_i|\psi_i> = \sum_i p_i = 1$$

b) zz.: $\rho^2 \leq \rho$

$$\rho^2 = \sum_{ij} p_i p_j |\psi_i> \underbrace{<\psi_i|\psi_j>}_{\delta_{ij}} <\psi_j| = \sum_j p_j^2 |\psi_j><\psi_j| \leq \rho$$

$\rho(\lambda) = \lambda\rho_1 + (1-\lambda)\rho_2$

$\Rightarrow \rho(\lambda) = \rho(\lambda)^\dagger$

$\Rightarrow \rho(\lambda) =\geq 0$ (siehe a)

$\Rightarrow tr(\rho(\lambda)) = 1$, weil $\lambda + (1-\lambda) = 1$ (siehe a.3)

c) *
$$\rho^\dagger = \tfrac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{p}\vec{\sigma})^\dagger$$
$$= \tfrac{1}{2}(\mathbb{1}^+ + (\vec{p}\vec{\sigma})^\dagger)$$
$$= \tfrac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{p}\vec{\sigma})$$

* $\rho \geq 0 \Leftrightarrow EW \geq 0$

$$\rho(\vec{p}) = \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+p_3 & p_1 - ip_2 \\ p_1 - ip_2 & 1-p_3 \end{pmatrix} \quad \text{(Eventuell Vorzeichenfehler)}$$

$\det(\rho(\vec{p}) - \lambda\mathbb{1}) \overset{!}{=} 0$

$\Rightarrow \frac{1}{2}((1-2\lambda)^2 - \vec{p}^2) = 0$

$\Rightarrow |\vec{p}| = |1-2\lambda|$

$\Rightarrow \lambda_\pm = \frac{1 \pm |\vec{p}|}{2}$

$0 \leq \lambda_\pm \leq 1 \quad \Rightarrow$ „Blochkugel“

* $|\vec{p}| = 1 : \lambda_+ = 1, \quad \lambda_- = 0 \quad \Rightarrow$ „Reiner Zustand“

$|\vec{p}| = 0 : \lambda_+ = \lambda_- = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow$ max. gemischte Zust.

$tr(\rho(\vec{p})) = \frac{1}{2}tr(\mathbb{1} + \vec{p}\vec{\sigma}) = \mathbb{1}$

$< \frac{\sigma_k}{2} >= tr(\frac{\sigma_k}{2}) = \frac{1}{2}tr(\underbrace{\frac{\sigma_k}{2}}_{=0} + \underbrace{\vec{p}\vec{\sigma}}_{\sum_i p_i\sigma_i} \frac{\sigma_k}{2})$

$= \frac{1}{4}p_i tr(\sigma_i\sigma_k) = \frac{1}{2}p_k$

$\Rightarrow < \frac{\vec{\sigma}}{2} >= \frac{\vec{p}}{2}$

Konvexität: $\frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{p}\vec{\sigma}) = \lambda\frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{p}_1\vec{\sigma}) + (1-\lambda)\frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{p}_2\vec{\sigma})$

$\Rightarrow \vec{p} = \lambda\vec{p}_1 + (1-\lambda)\vec{p}$

d) $|\psi >= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow> \otimes |\downarrow> - |\downarrow> \otimes |\uparrow>)$

$|\uparrow>= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$\rho = \sum_i p_i|\psi_i >< \psi_i| = |\psi >< \psi|$

$\rho^2 = |\psi >< \psi|\psi >< \psi| = |\psi >< \psi >= \rho$

$\rho_{AB} = |\psi >< \psi|$

$= \frac{1}{2}(|\uparrow><\uparrow| \otimes |\downarrow><\downarrow| - |\downarrow><\uparrow| \otimes |\uparrow><\downarrow| - |\uparrow><\downarrow| \otimes |\downarrow><\uparrow|$

$+ |\downarrow><\downarrow| \otimes |\uparrow><\uparrow|)$

$tr_B(\rho_{AB}) = \frac{1}{2}tr(\sum_{ij} |\psi_j >_A \otimes |\psi_j >_B < \psi_j|_A \otimes < \psi_j|_B)$

$tr(A \otimes B) = tr(A)tr(B)$

$\Rightarrow tr_B(\rho_{AB}) = (<\uparrow |\psi_A >< \psi_A| \uparrow> + <\downarrow |\psi_A >< \psi_A| \downarrow>)$

$\rho_A = \frac{1}{2}(|\downarrow><\downarrow| + |\uparrow><\uparrow|)$

$\rho_A^2 = \frac{1}{2}\rho_A$

Aufgabe 24

Einfach zu Hause: wie sonst auch rechnen, nur mit Quantenstatistik