

## Blatt 2

Bitte laden Sie die Lösung dieses Blattes bis zum 17.11.2020 18 Uhr über das Abgabewerkzeug auf der OLAT Kursseite zur Vorlesung hoch.

Das Abgabewerkzeug finden Sie unter *Kursinhalt/Übungen/Abgabe-Übungsgruppe #* (wobei # die Nummer Ihrer jeweiligen Übungsgruppe bezeichnet), auch zu finden unter dem Link <https://olat-ce.server.uni-frankfurt.de/olat/auth/RepositoryEntry/9596239873/CourseNode/102408662028611>

Bitte laden Sie die Lösung in einer einzig, zusammenhängenden, .pdf Datei hoch.

Bitte laden Sie nur Ihre finale Abgabe hoch. Sie können hochgeladene Dateien nicht selbständig löschen.

### 4) Ergodizität (4+2=6 Punkte)

- (i) Betrachten Sie die eindimensionale Bewegung eines Massenpunktes im Potential

$$V(x) = \theta(x_1 - x)\kappa(x - x_1)^2 + \theta(x - x_2)\lambda(x - x_2)^2 + \theta(x - x_1)\theta(x_2 - x) \min_x (\kappa(x - x_1)^2, \lambda(x - x_2)^2)$$

wobei  $x_2 > x_1$  und  $\theta(x)$  die Stufenfunktion ist und  $\kappa, \lambda > 0$ . Für welche Energien  $E = T + V$  ist dieses System ergodisch bzw. nicht ergodisch? Diskutieren Sie in beiden Fällen die Abhängigkeit des zeitlichen Mittelwerts des Orts von den Anfangsbedingungen.

- (ii) Betrachten Sie ein System von  $N$  ungekoppelten harmonischen Oszillatoren mit der Gesamtenergie  $E = \sum_{i=1}^N E_i$ , wobei  $E_i$  die Energie des  $i$ -ten Oszillators ist. Zeigen Sie, dass das System nicht ergodisch ist.

### 5) Darstellungen des mikrokanonischen Ensembles (4+3=7 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie die Wahrscheinlichkeitsverteilung eines isolierten, ergodischen Systems mit exakter Energieerhaltung, bei konstanter Teilchenzahl  $N$  und konstantem Volumen  $V$  kennengelernt. Die Energieerhaltung kann somit über die Hamiltonfunktion  $H(\vec{\pi}) = H(p, q) = E_0 = \text{const.}$  ausgedrückt werden.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist dann anhand der mikrokanonischen Verteilung gegeben

$$\rho(p, q) = \frac{1}{\Omega(E_0, V, N)} \delta(H(\vec{\pi}) - E_0),$$

- (i) Zeigen Sie, dass

$$\langle H(\vec{\pi}) \rangle = E_0.$$

*Hinweis: Schreiben Sie die Phasenraumintegration  $d\Gamma$  um, indem Sie diese in die Integration über eine Hyperfläche konstanter Energie  $df_{E_0}$  und einen auf dieser Hyperfläche senkrechten Vektor  $d\pi_{\perp}$  im Phasenraum zerlegen,  $d\Gamma = df_{E_0} d\pi_{\perp}$ .*

*Betrachten Sie anschließend das totale Differential der Hamiltonfunktion  $dH(\vec{\pi})$ . Nutzen Sie die Richtung des auftretenden Gradienten um  $d\pi_{\perp}$  durch  $dH$  auszudrücken, so dass Sie über die  $\delta$ -Distribution integrieren können.*

Eine, aus der Vorlesung bekannte, äquivalente Darstellung der mikrokanonischen Wahrscheinlichkeitsdichte ist mit

$$\rho(p, q) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta\Gamma(E_0, V, N)} & E \in [E_0, E_0 + \Delta E] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

gegeben. Anstelle einer delta-Distribution wird in diesem Fall ein Energieintervall mit kleiner, endlicher Breite  $\Delta E$  betrachtet.

(ii) Zeigen Sie, dass auch für obige Definition des mikrokanonischen Ensembles mit  $\Delta E \rightarrow 0$  folgt

$$\langle H(\vec{\pi}) \rangle = E_0.$$

*Hinweis: Verfahren Sie wie bei (i), aber beachten Sie die endliche Ausdehnung der Schale mit Breite  $\Delta E$ .*

*Nutzen Sie die Entwicklung des Phasenvolumens  $\Delta\Gamma(E_0, V, N)$  für kleine  $\Delta E$  und identifizieren Sie die Zustandsdichte  $\Omega(E_0, V, N)$  im limes  $\Delta E \rightarrow 0$ .*

## 6) Eigenschaften des Dichteoperators (7 Punkte)

Gegeben Sei der Operator  $\hat{A}$  und der Dichteoperator

$$\hat{\rho}_N = \sum_i w_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad \text{mit} \quad \sum_i w_i = 1$$

eines quantenmechanischen  $N$ -Teilchensystems. Zeigen Sie, dass gilt:

- (i)  $\text{Tr}(\hat{\rho}_N \hat{A}) = \text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}_N)$ .
- (ii)  $\hat{\rho}_N$  ist hermitesch.
- (iii)  $\hat{\rho}_N$  hat nur positive Eigenwerte.
- (iv)  $\text{Tr}(\hat{\rho}_N) = 1$ , d.h. die Wahrscheinlichkeitsdichte ist normiert.
- (v)  $\text{Tr}(\hat{\rho}_N \ln(\hat{\rho}_N)) = \sum_{i=1}^N w_i \ln w_i$ .
- (vi)  $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq \text{Tr}(\hat{\rho})$  (wann gilt Gleichheit?)
- (vii) Der statistische Mittelwert  $\langle \hat{A} \rangle$  ist gleich dem quantenmechanischen Erwartungswert von  $\hat{A}$ , falls das System in einem reinen Zustand vorliegt ( $w_i = \delta_{ij}$ .)

*Hinweis: Nutzen Sie zur Auswertung der Spuren ein vollständiges, diskretes System orthonormaler Eigenzustände.*