UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Matthias Fuchs
Raum P 907, Tel. (07531)88-4678
E-mail: matthias.fuchs@uni-konstanz.de

Übungen zur Statistischen Mechanik
Wintersemester 2005/06

Übungsblatt 1, Ausgabe 25.10.2005, abzugeben bis 31.10.2005
Besprechung in der Zentralübung am 31.10.2005.

Präsenzaufgaben

5. **Zeitentwicklung in der Statistischen Mechanik**
Berechnen Sie die zeitliche Ableitung einer Funktion $f(\mathbf{A})$ eines zeitabhängigen Operators $\mathbf{A}(t)$. Welches Problem ergibt sich dabei? Zeigen Sie, dass Sie das erwartete Resultat erhalten für:
$$\frac{d}{dt}\mathrm{Sp}\Big(f\left(\mathbf{A}(t)\right)\Big) = \mathrm{Sp}\Big(\dot{\mathbf{A}}f'(\mathbf{A})\Big)$$
Welche Annahme machen Sie dabei für die Zustände?

6. **Dichteoperator für Zwei-Niveausystem**
In dieser Aufgabe sollen Dichteoperatoren eines Zwei-Niveausystems betrachtet werden. Für dieses Beispiel gibt es viele Anwendungen in der Physik, z.B. das Spin 1/2 System, das im Folgenden verwendet werden soll. Wir wählen die zwei Basisvektoren des Zustandsraums, $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$, welche z.B. die Eigenvektoren der z-Komponente des Spins sein können. In dieser Basis wird ein Dichteoperator durch eine 2×2 Dichtematrix dargestellt.

   a) Bestimmen Sie die Dichtematrix für einen reinen Zustand aus einer Superposition der beiden Komponenten $|\psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\,(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ sowie eines gemischten Zustands mit der Hälfte $|\uparrow\rangle$ und der anderen Hälfte $|\downarrow\rangle$.

   b) Die Dichtematrix ρ hat folgende Gestalt einer hermiteschen Matrix mit Spur 1:
   $$\rho = \begin{pmatrix} a & c \\ c^* & 1-a \end{pmatrix}$$
   mit $a \in \mathbb{R}$ und $c \in \mathbb{C}$. Zeigen Sie, dass die definierenden Eigenschaften von ρ auf folgende Ungleichung der Matrixelemente führen:
   $$0 \le a(1-a) - |c|^2 \le \frac{1}{4}$$
   Bestimmen Sie auch die beiden Eigenwerte und Eigenvektoren von ρ.
   Wie lautet damit folgende Größe: $S = -Sp(\rho \ln \rho)$?

   c) Zeigen Sie, dass die hinreichende und notwendige Bedingung an ρ für einen reinen Zustand ist:
   $$a(1-a) = |c|^2$$
   Wie lauten damit die Eigenvektoren und Eigenwerte eines reinen Zustands? Bestimmen Sie a und c für die Dichtematrix, die den normierten Zustandsvektor $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$, mit $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ beschreibt, und bestätigen Sie, dass dieses ρ ein reiner Zustand ist.

7. **Normalverteilung und Kumulanten**

a) In Aufgabe 4 auf Blatt 0 haben Sie den Übergang von der Binominal- zur Poissonverteilung untersucht (Grenzwert $N \to \infty$, Erwartungswert $\mu = Np$ endlich). Betrachten Sie jetzt den Grenzwert $N \to \infty$ der die Binominal- in die Normalverteilung überführt.

Hinweise:

Binominalverteilung $P_k(N) = \left(\begin{array}{c} N \\ k \end{array} \right) p^k q^{N-k}$ mit $p + q = 1$.
Gehen Sie zu der Variablen $z = k - Np$ über.
Benutzen Sie die Stirlingformel $r! = \left(\frac{r}{e}\right)^r \sqrt{2\pi r}(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right))$
Sowie folgende Näherungen:

$$\sqrt{\frac{N}{2\pi(Np + z)(Nq - z)}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}}\left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right)\right)$$

$$\left(1 - \frac{z}{Np + z}\right)^{Np+z}\left(1 + \frac{z}{Nq - z}\right)^{Nq-z} = e^{-\frac{z^2}{2Npq}}\left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right)\right)$$

b) In der Vorlesung haben Sie die charakteristische Funktion der Momente kennen gelernt:

$$\phi(k) = \int dx e^{ikx} P(x)$$

Bestimmen Sie diese für die Binomial-, Poisson- und Normalverteilung.
Die charakteristische Funktion der Kumulanten ist gegeben durch:

$$\phi_C(k) = -\ln \phi(k)$$

Hieran lassen sich leicht Eigenschaften der verschiedenen Verteilungen veranschaulichen. Von der Binomial- zur Poissonverteilung vollzieht man den Grenzwert $p \to 0$. Benutzen Sie dies für den Übergang der charakteristischen Funktionen der Kumulanten für die beiden Verteilungen. Die Kumulanten $C_s = (i\partial_k)^s \phi_C(k)|_{k=0}$ der Poissonverteilung lassen sich leicht bestimmen! Wie? Auch die Kumulanten der Normalverteilung sind leicht zu finden!

schriftlich

8. **Operator–Exponentialfunktion (6 Punkte)**
Die Exponentialfunktion eines Operators ist durch die Taylorreihe definiert:

$$\exp(A) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n.$$

Vertraute Relationen für das Rechnen mit Exponentialfunktionen komplexer Zahlen, wie z. B. $\exp(A + B) = \exp(A)\exp(B)$, gelten nur für kommutierende Operatoren, $[A, B] = 0$.
Betrachten Sie den Operator:

$$K(x) = \exp(x(A + B))\exp(-xA)$$

wobei x ein reeller Parameter (kein Operator) ist.

(a) Zeigen Sie

$$\frac{dK(x)}{dx} = \exp(x(A + B))B\exp(-xA).$$

(b) Leiten Sie daraus folgende Relation ab:

$$\exp(A+B) = \exp(A) + \int_0^1 dx \exp(x(A+B))B\exp((1-x)A)$$

(c) Zeigen Sie letztlich:

$$\frac{d}{d\lambda}\exp(A(\lambda)) = \int_0^1 dx \exp(xA(\lambda))\frac{dA}{d\lambda}\exp((1-x)A(\lambda))$$

9. **Dichteoperator eines Zweiniveausystems (5 Punkte)**
Ein allgemeiner Dichteoperator sei definiert durch:

$$\rho = \sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i| \ ,$$

mit $p_i \geq 0$ und $\sum_i p_i = 1$; die $|\psi_i\rangle$ sind Zustände aus einem Hilbertraum $\mathcal{H}$.
Das einfachste Beispiel ist durch einen Dichteoperator ρ gegeben, der auf dem zweidimensionalen Hilbertraum $\mathcal{H}_2$ wirkt, also in Matrixdarstellung die folgende Form annimmt:

$$\rho = \begin{pmatrix} a & c \\ c^* & 1-a \end{pmatrix}$$

wobei a reell und c komplex ist.

(a) Zeigen Sie, dass ρ geschrieben werden kann als:

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+b_z & b_x - ib_y \\ b_x + ib_y & 1-b_z \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

wobei $\mathbf{b}$ ein Einheitsvektor, $|\mathbf{b}| = 1$, und $\boldsymbol{\sigma}$ der Vektoroperator ist, dessen Komponenten durch die Pauli Matrizen gegeben sind:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Der Spinoperator ist $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$. Zeigen Sie:

$$\langle\frac{1}{2}\sigma_i\rangle \equiv Tr\left[\frac{1}{2}\sigma_i\rho\right] = \frac{1}{2}b_i$$

und damit $\langle\mathbf{S}\rangle = \frac{\hbar}{2}\,\mathbf{b}$

(b) Betrachten Sie nun zwei Spins. Das gekoppelte System hat vier Zustände: $|\uparrow\uparrow\rangle, \ |\downarrow\downarrow\rangle, \ |\uparrow\downarrow\rangle, \ |\downarrow\uparrow\rangle$. Es nehme den folgenden Singulett–Zustand an:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\ |\uparrow\downarrow\rangle \ - \ |\downarrow\uparrow\rangle \ ).$$

Wie lautet der Dichteoperator dieses Zustandes? Summieren Sie über die Einstellungen des zweiten Spins um den reduzierten Dichteoperator des ersten Spins zu finden. Was fällt Ihnen auf?

10. **Wigner Verteilungsfunktionen (8 Punkte)**
Die klassische Mechanik sollte sich aus der Quantenmechanik ergeben, wenn der Grenzfall einer verschwindenden Planck–Konstante betrachtet wird. Dieser Übergang lässt sich mit der Wignerschen Darstellung von Operatoren studieren.
Betrachten Sie die folgende Transformation eines Operators A in einem eindimensionalen Hilbertraum:

$$A_W(p,q) = \int_{-\infty}^{\infty} dr \exp(-ipr/\hbar)\langle x|A|x'\rangle$$

wobei $r = x - x'$ und $q = (x+x')/2$. Der reelle Parameter p werde als Impuls, q als Mittelwert von $x + x'$ interpretiert. $A_W(p,q)$ heisst Wigner–Repräsentation von A.

(a) Bestimmen Sie die Wigner–Darstellungen einer beliebigen Funktion des Ortsoperators, $f(x)$, und einer beliebigen Funktion des Impulsoperators, $g(p)$.

(b) Betrachten Sie die Wigner–Darstellung des Dichteoperators:

$$f(p,q) = \int_{-\infty}^{\infty} dr \, \exp(-ipr/\hbar)\langle x|\rho|x'\rangle.$$

Berechnen Sie die Inverse, d.h. $\langle x|\rho|x'\rangle$ gegeben durch ein Integral über p.

(c) Zeigen Sie, dass der Mittelwert eines Operators A im Zustand ρ, d.h. $Sp(A\rho)$, ausgedrückt werden kann als:

$$\langle A\rangle = \frac{1}{h}\int\int dp\, dq\, A_W(p,q) f(p,q).$$

Beachten Sie, dass h auftaucht anstelle von $\hbar$. Was fällt Ihnen an diesem Ergebnis auf?

(d) Bestimmen Sie $f(p,q)$ in niedrigster Ordnung in $\hbar$ für ein ρ der Form

$$\rho = e^{-\beta H}$$

wobei β ein reeller Parameter ist, und der Hamiltonoperator H lautet

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$