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 2007/08

Übungsblatt 2, Ausgabe 30.10.2007, abzugeben bis 05.11.2007

Präsenzaufgaben

7. **Dichteoperator fuer Zwei-Niveau-Systeme**
Der Dichteoperator eines Zwei-Niveau-Systems soll hier betrachtet werden. Für dieses Beispiel gibt es viele Awendungen in der Physik, z.B. das Spin 1/2 System, das im Folgenden verwendet werden soll. Dazu werden als Basisvektoren des Zustandsraumes $|0\rangle$ und $|1\rangle$ vereinbart. In dieser Basis wird ein Dichteoperator durch eine 2x2 Matrix dargestellt.

(a) Bestimmen Sie die Dichtematrix für einen reinen Zustand aus einer Superposition der beiden Komponenten $|0\rangle$ und $|1\rangle$, sowie des gemischten Zustandes, der sich je zur Hälfte in einer der beiden Zustände befinden soll.

(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 $c \in \mathbb{C}$. Bestimmen Sie zunächst die Eigenwerte von ρ. Zeigen Sie, dass die definierenden Eigenschaften von ρ auf folgende Ungleichungen der Matrixelemente führen:

$$0 \le a(1-a) - |c|^2 \le \tfrac{1}{4}$$

Zeigen Sie, dass ρ geschrieben werden kann als:

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

mit einem konstanten Vektor $|\mathbf{b}| \le 1$ und $\mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \sum_i b_i\sigma_i$ wobei σ_i durch die Pauli Matrizen

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

gegeben ist. Berechnen Sie $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$.

(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 Eigenwerte eines reinen Zustands?
Drücken Sie die Eigenwerte von ρ durch $\mathbf{b}$ aus.

8. **Gekoppeltes Zwei-Niveau-Systeme**
Betrachten Sie zwei gekoppelte Zwei-Niveau-Systeme. Das gekoppelte System hat vier Zustände:
$|11\rangle$, $|10\rangle$, $|01\rangle$, $|00\rangle$. Es nehme folgenden Singulett-Zustand an:

$$|\psi\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left(|10\rangle - |01\rangle\right).$$

   (a) Wie lautet der Dichteoperator dieses Zustandes?
   (b) Summieren Sie über die Einstellungen des zweiten Spins um den reduzierten Dichteoperator des ersten Spins zu finden. Was fällt ihnen auf? Bestimmen Sie $|\mathbf{b}|$ aus Aufgabe 7b.

schriftlich

9. **Zwei-Niveau-System (4 Punkte)**

   (a) In einem Zwei-Niveau-System kann der allgemeine Dichteoperator geschrieben werden als:
$$\rho = \frac{1}{2}(1 + \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle \cdot \boldsymbol{\sigma}).$$
Zeigen Sie, dass die sogenannte Informationsentropie S gegeben ist durch:
$$S = -\mathrm{Sp}\ \{\rho \ln(\rho)\} = \left(\frac{1+r}{2}\ln\left(\frac{2}{1+r}\right) + \frac{1-r}{2}\ln\left(\frac{2}{1-r}\right)\right),$$
wobei $r = |\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle|$ und $|r| \leq 1$. Diskutieren Sie S (z.B. graphisch).
   (b) In einem magnetischen Feld $\mathbf{B}(t)$ nimmt der Hamiltonoperator eines Spins die Form an:
$$H = -\gamma\, \mathbf{B} \cdot \mathbf{S},$$
wobei γ eine Konstante ist. Leiten Sie aus der von–Neumann Gleichung ab, dass der Spin um das magnetische Feld präzediert:
$$\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \boldsymbol{\omega} \times \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle,$$
Hier ist $\boldsymbol{\omega} \propto \mathbf{B}$.
   (c) Zeigen Sie damit, dass trotz der Präzession die Entropie erhalten bleibt:
$$\frac{d}{dt}S = -\frac{d}{dt}\mathrm{Sp}(\rho \ln(\rho)) = 0.$$

10. **Operator Gymnastik (4 Punkte)**

   (a) Berechnen Sie die zeitliche Ableitung einer Funktion $f(\mathbf{A})$ eines zeitabhängigen Operators $\mathbf{A}(t)$. $f(\mathbf{A})$ sei in eine Taylor-Reihe entwickelbar. 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?

(b) 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.

(c) Zeigen Sie

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

(d) Leiten Sie daraus folgende Relation ab:

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

(e) Zeigen Sie letztlich:

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

11. **Reines Subsystem (* 3 Punkte)**
Betrachtet werde ein Subsystem eines quantenmechanischen Systems. Variablen im Subsystem wirken auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}_1$, während der Rest mit $\mathcal{H}_2$ bezeichnet sei und der Hilbertraum $\mathcal{H}$ des gesamten Systems $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.
Der reduzierte Dichteoperator ϱ_1 des Subsystems gehöre zu einem reinen Zustand. Zeigen Sie, dass dann das Subsystem unabhängig sein muss vom Rest des Systems.
Hinweis: Stellen Sie, startend mit einem allgemeinen Dichteoperator ρ des Gesamtsystems, die Darstellung von ϱ_1 in einer allgemeinen ONB auf. Da ϱ_1 nach Annahme rein ist, also geschrieben werden kann als $\varrho_1 = |\psi\rangle\langle\psi|$, ist es geschickt, $|\psi\rangle$, als einen der Basiszustände zu wählen.

12. **Dichteoperator des freien Teilchens (4 Punkte)**
Betrachtet werde ein einzelnes freies Teilchen in einer Raumdimension. Der Hamiltonoperator sei $H = (1/2m)p^2$ und der Dichteoperator laute

$$\varrho(\beta) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \qquad \text{mit} \quad Z = \mathrm{Sp}\, e^{-\beta H}$$

wobei β eine positive Konstante ist.

(a) Der unnormierte Dichteoperator in Ortsdarstellung ist gegeben durch

$$\varrho_u(x, x', \beta) = \langle x|e^{-\beta H}|x'\rangle$$

Stellen Sie durch Ableitung nach dem Parameter β eine partielle Differentialgleichung für $\varrho_u(x, x', \beta)$ auf. Was ist der Anfangswert $\varrho_u(x, x', \beta = 0)$?
Hinweis: Die Gleichung lautet

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\, \varrho_u(x, x', \beta) = -\alpha \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\, \varrho_u(x, x', \beta)$$

(b) Die Lösung dieser partiellen Differentialgleichung erfolgt leicht durch Fouriertransformation. Wie lautet $\varrho_u(x, x', \beta)$? Welcher Parameter charakterisiert die Lösung, und welcher Wert ergibt sich für die sogenannte Zustandssumme Z?