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 2009/10

Übungsblatt 2, Ausgabe 03.11.2009, Abgabe und Besprechung am 09.11.2009

Präsenzaufgaben

7. **Dichteoperator für Zwei-Niveau-Systeme**
Der Dichteoperator eines Zwei-Niveau-Systems soll hier 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. 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:

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

Zeigen Sie, dass ρ geschrieben werden kann als:

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

mit einem konstanten Vektor $|\mathbf{b}| \leq 1$ 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.

(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?

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:

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

   (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?

schriftlich

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

   (a) In Aufgabe 7b haben wir gezeigt, dass für ein zwei Niveau System gilt $\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma})$. Zeigen sie weiterhin, dass $\mathbf{b} =< \boldsymbol{\sigma} >$ gilt. Damit können wir die Dichte schreiben 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:

$$H = -\gamma\, \mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma},$$

   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. 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 im allgemeinen Fall, wo $[A,B] \neq 0$ zugelassen sei, den Operator:

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

wobei x ein reeller Parameter (kein Operator) ist.
Zeigen Sie

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

(c) Leiten Sie daraus folgende Relation ab:

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

(d) 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. **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?