Lösung der Aufgabe 20, Tutorium 7

20. Dichteoperatoren

(a) Gegeben seien 2 Dichteoperatoren mit Matrixdarstellung

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\rho}_2 = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{1}$$

in der Basis $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$. Berechnen Sie die Reinheit und die Entropie von $\hat{\rho}_{1,2}$ sowie die Operatoren $\hat{C}_1 = e^{-x\hat{\rho}_1}$ und $\hat{C}_2 = \cos(\frac{\pi}{2}\hat{\rho}_2)$. *Hinweis:* Diagonalform!

Beide Dichtematrizen haben Blockdiagonalfrom und man sieht, dass jeweils der Zustand $|2\rangle$ (enspricht dem Vektor $(0,0,1)^T$) ein Eigenzustand mit Eigenwert $\lambda_1 = 0$ bzw. $\lambda_1 = 1/2$ ist. Das Eigenwertproblem der verbleibenden 2x2 Matrix für $\hat{\rho}_1$ ergibt

$$\det \underbrace{\left[\lambda \mathbb{1} - \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\right]}_{M_\lambda} = (\lambda - 1/2)^2 - 1/16 = 0, \qquad \Rightarrow \qquad \lambda_{2,3} = 1/4, 3/4 \tag{2}$$

Die entsprechenden Eigenvektoren erhält man dann aus der Bedingung $M_{\lambda_i}\vec{v} = 0$, in diesem Fall $\vec{v}_2 = (1,-1,0)^T/\sqrt{2}$ und $\vec{v}_3 = (1,1,0)^T/\sqrt{2}$. Insgesamt ergibt sich die Diagonalform von $\hat{\rho}_1$ in Matrixdarstellung

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3}$$

oder in Operatordarstellung

$$\hat{\rho}_1 = \frac{3}{4}|+\rangle\langle+| + \frac{1}{4}|-\rangle\langle-|, \qquad |\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle \pm |1\rangle\right). \tag{4}$$

Analog findet man für $\hat{\rho}_2$

$$\hat{\rho}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\rho}_2 = \frac{1}{2}|+\rangle\langle+| + \frac{1}{2}|2\rangle\langle 2| \tag{5}$$

Damit

$$\mathrm{Sp}\{\hat{\rho}_1^2\} = 5/8, \qquad \mathrm{Sp}\{\hat{\rho}_2^2\} = 1/2, \tag{6}$$

$$S_1/k_B = -3/4\ln(3/4) - 1/4\ln(1/4) \approx 0.56, \tag{7}$$

$$S_2/k_B = -1/2\ln(1/2) - 1/2\ln(1/2) \approx 0.69. \tag{8}$$

Weiters,

$$\hat{C}_1 = e^{-x\hat{\rho}_1} = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-x)^n}{n!} \left(\frac{3}{4}|+\rangle\langle+| + \frac{1}{4}|-\rangle\langle-| \right)^n$$
$$= \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-x)^n}{n!} \left[\left(\frac{3}{4}\right)^n |+\rangle\langle+| + \left(\frac{1}{4}\right)^n |-\rangle\langle-| \right] \tag{9}$$
$$= e^{-\frac{3x}{4}}|+\rangle\langle+| + e^{-\frac{x}{4}}|-\rangle\langle-| + |2\rangle\langle 2|$$

oder Matrixdarstellung

$$\hat{C}_1 = e^{-x\hat{\rho}_1} = \begin{pmatrix} e^{-3x/4} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-x/4} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{10}$$

Analog

$$\hat{C}_2 = \cos(\frac{\pi}{2}\hat{\rho}_2) = \cos(\pi/4)|+\rangle\langle+| + \cos(\pi/4)|2\rangle\langle 2| + |-\rangle\langle-| \tag{11}$$

oder Matrixdarstellung

$$\hat{C}_2 = \cos(\frac{\pi}{2}\hat{\rho}_2) = \begin{pmatrix} \cos(\pi/4) & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\pi/4) & 0 \\ 0 & 0 & \cos(0) \end{pmatrix} \tag{12}$$

(b) Gegeben sei der großkanonische Dichteoperator

$$\hat{\rho}_{\mathrm{G}} = \frac{1}{Z_{\mathrm{G}}} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \tag{13}$$

und ein beliebiger anderer Dichteoperator $\hat{\rho}'$. Zeigen Sie, dass aus der Ungleichung für die Boltzmann'sche Eta-Funktion

$$\mathbf{H}(\hat{\rho}_{\mathrm{G}}, \hat{\rho}') \leq 0 \tag{14}$$

folgt, dass

$$J(\hat{\rho}_{\mathrm{G}}) \leq J(\hat{\rho}'), \tag{15}$$

wobei $J(\hat{\rho})$ das entsprechende großkanonische Potential bezeichnet.
Aus der Definition von $\mathbf{H}(\hat{\rho}_{\mathrm{G}}, \hat{\rho}')$ folgt

$$k_B \mathbf{H}(\hat{\rho}_{\mathrm{G}}, \hat{\rho}') = S' + k_B \mathrm{Sp}\{\hat{\rho}' \ln \hat{\rho}_{\mathrm{G}}\} = S' - k_B \ln Z_{\mathrm{G}} - \frac{1}{T}\mathrm{Sp}\{\hat{\rho}'(\hat{H} - \mu\hat{N})\} \leq 0 \tag{16}$$

Mit $J = -k_B T \ln Z_G$ und $J' = E' - TS' - \mu N'$ folgt

$$TS' + J - E' + \mu N' \leq 0 \qquad \Rightarrow J \leq E' - TS' - \mu N' = J' \tag{17}$$