Statistische Physik I (SS 2020): Tutorium 6

16. Dichteoperatoren

Gegeben sei ein Quantensystem mit Basiszuständen $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ und 2 Dichteoperatoren

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\rho}_2 = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 3 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 3 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

(a) Stellen Sie die beiden Dichteoperatoren in Diagonalform $\hat{\rho} = \sum_{n=1}^{3} p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ dar und bestimmen Sie jeweils die Wahrscheinlichkeiten p_n und Eigenzustände $|\psi_n\rangle$.

Das Eigenwertproblem

$$\hat{\rho}_1|\psi_n\rangle = p_n|\psi_n\rangle$$

ergibt die charakteristische Gleichung $(\frac{1}{3}-p)[(\frac{1}{3}-p)^2-\frac{1}{9}] = 0$, deren Lösungen sind die Eigenwerte

$$p_1 = 0, \qquad p_2 = \frac{2}{3}, \qquad p_3 = \frac{1}{3}.$$

Die entsprechenden normalisierten Eigenvektoren sind

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Für $\hat{\rho}_2$ findet man: $p\,[(\frac{1}{2}-p)^2 - \frac{1}{4}] = 0$ und dann

$$p_1 = 0, \qquad p_2 = 0, \qquad p_3 = 1,$$

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \qquad |\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Häufiger Fehler in den am So. 10.05 abgegeben Lösungen: In vielen Fällen wurde der **zweite** (unabhängige!) Eigenvektor zum 2-fach-entarteten Eigenwert 0 *vergessen*, und, anstattdessen, zwei Mal derselbe Eigenvektor genommen. Damit wird der ganze Hilbertraum in der Eigenbasis nicht mehr vollständig beschrieben !!!

Entsprechende Folgefehlern tauchen dann auch in der Berechnung von C_2 beim Unterpunkt (c) auf.

(b) Berechnen Sie die Reinheit und die Entropie von $\hat{\rho}_1$ und $\hat{\rho}_2$.

Die Reinheit ist

$$\gamma[\hat{\rho}] = \mathrm{Sp}\left\{\hat{\rho}^2\right\} = \sum_n p_n^2.$$

Die Entropie ist

$$S[\hat{\rho}] = -k_B \mathrm{Sp}\left\{\hat{\rho}\log\hat{\rho}\right\} = -k_B \sum_n p_n \log p_n.$$

$$\gamma[\hat{\rho}_1] = \frac{5}{9}, \qquad S[\hat{\rho}_1] = k_B\left(\log 3 - \frac{2}{3}\log 2\right),$$

$$\gamma[\hat{\rho}_2] = 1, \qquad S[\hat{\rho}_2] = 0,$$

d.h., $\hat{\rho}_2$ ist ein reiner Zustand.

S. auch `2020_04_27_StatPhysI_Ergaenzung_1.pdf` für weitere Details/Infos.

(c) Berechnen Sie die Matrixdarstellung der Operatoren $\hat{C}_1 = e^{-x\hat{\rho}_1}$ und $\hat{C}_2 = \cos(\frac{\pi}{2}\hat{\rho}_2)$.

$$\hat{C}_1 = e^{-x\hat{\rho}_1} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n x^n}{n!}\hat{\rho}_1^n = \hat{\mathbf{1}} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n x^n}{n!}\left(p_1^n|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + p_2^n|\psi_2\rangle\langle\psi_2| + p_3^n|\psi_3\rangle\langle\psi_3|\right), \tag{2}$$

Daher:

$$\hat{C}_1 = e^{-x\hat{\rho}_1} = \sum_{k=1}^{3} e^{-xp_k}|\psi_k\rangle\langle\psi_k|, \tag{3}$$

und, explizit:

$$\hat{C}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \\ i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}e^{-2x/3}\begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + e^{-x/3}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+e^{-2x/3} & -i(1-e^{-2x/3}) & 0 \\ i(1-e^{-2x/3}) & 1+e^{-2x/3} & 0 \\ 0 & 0 & 2e^{-x/3} \end{pmatrix} \tag{5}$$

Betrachten wir nun

$$\hat{C}_2 = \cos\left(\frac{\pi}{2}\hat{\rho}_2\right).$$

Da $\hat{\rho}_2$ ein reiner Zustand ist mit $p_1 = p_2 = 0$ und $p_3 = 1$, und damit $\hat{\rho}_2^m = \hat{\rho}_2, \quad m = 2, 3, 4, \ldots,$ findet man

$$\hat{C}_2 = \hat{\mathbf{1}} + \left(\cos\frac{\pi}{2} - 1\right)\hat{\rho}_2 = \hat{\mathbf{1}} - \hat{\rho}_2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix},$$

die natürlich entspricht $\hat{C}_2 = \cos\left(\frac{\pi}{2}\hat{\rho}_2\right) = \sum_{k=1}^{3}\cos\left(\frac{\pi}{2}p_k\right)|\psi_k\rangle\langle\psi_k|$.

17. Dichteoperator eines Zwei-Niveau-Systems

Betrachten Sie ein quantenmechanisches Zwei-Niveau-System (ZNS) mit Zuständen $|0\rangle$ und $|1\rangle$. Gegeben sei ein allgemeiner Dichteoperator des ZNS in Matrixdarstellung

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{10} \\ \rho_{01} & \rho_{00} \end{pmatrix}, \tag{6}$$

wobei $\rho_{ij} = \langle i|\hat{\rho}|j\rangle$.

(a) Wieviele unabhängige reelle Parameter sind zur Bestimmung eines beliebigen Dichteoperators für ein ZNS nötig? Begründen Sie Ihre Antwort mit den allgemeinen Eigenschaften von Dichteoperatoren.
Es gilt $\mathrm{Sp}\{\hat{\rho}\} = 1$ und $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$, und damit $\rho_{00} + \rho_{11} = 1$, $\rho_{00}, \rho_{11} \in \mathbb{R}$ und $\rho_{01}^* = \rho_{10}$. D.h. insgesamt 3 reelle Parameter.

(b) Berechnen Sie den Vektor $\vec{S} = (\langle\hat{\sigma}_x\rangle, \langle\hat{\sigma}_y\rangle, \langle\hat{\sigma}_z\rangle)^T$ der sich aus den Erwartungswerten der drei Pauli-Matrizen $\sigma_{x,y,z}$ für einen allgemeinen Dichteoperator ergibt. Drücken Sie die Dichtematrix in Gleichung (6) durch die Erwartungswerte S_x, S_y und S_z aus.
Generell $\langle\hat{\sigma}_k\rangle = \mathrm{Sp}\{\hat{\sigma}_k\hat{\rho}\}$.

$$\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)^T = (\rho_{01} + \rho_{10}, i(\rho_{10} - \rho_{01}), \rho_{11} - \rho_{00})^T. \tag{7}$$

Damit ergibt sich

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & 1 - S_z \end{pmatrix}. \tag{8}$$

(c) Drücken Sie $\vec{S}$ in Polarkoordinaten aus und bestimmen Sie die Beziehung zwischen (r, θ, ϕ) und den Elementen ρ_{ij}.
$\vec{S} = r(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$

$$\Rightarrow r = \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} = \sqrt{4|\rho_{01}|^2 + (\rho_{11} - \rho_{00})^2} \tag{9}$$

$$\tan(\theta) = \frac{2|\rho_{01}|}{\rho_{11} - \rho_{00}}, \qquad e^{i2\phi} = \frac{\rho_{01}}{\rho_{10}} \tag{10}$$

(d) Berechnen Sie die Reinheit $R = \mathrm{Sp}\{\hat{\rho}^2\}$ von $\hat{\rho}$ und drücken Sie das Resultat als Funktion der Matrixelemente ρ_{ij} und mit Hilfe der Polarkoordinatendarstellung von $\vec{S}$ aus.

$$\mathrm{Sp}\{\hat{\rho}^2\} = 2|\rho_{10}|^2 + \rho_{00}^2 + \rho_{11}^2 = \frac{1}{2}(1 + r^2) \tag{11}$$

18. Isoliertes Spin-Ensemble: Der paramagnetische Kristall

Gegeben Sei ein isoliertes System aus N nicht-wechselwirkenden Spin-1/2 Teilchen mit Zuständen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ und Hamiltonoperator (siehe Vorlesung)

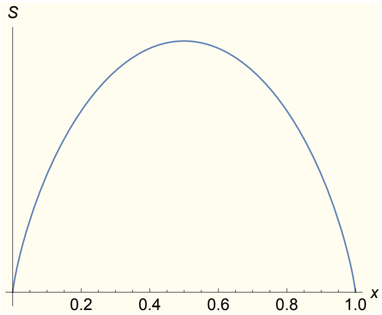
$$\hat{H} = \frac{E_0}{2}\sum_{i=1}^{N}(|\uparrow\rangle_i\langle\uparrow|), \tag{12}$$

(a) Bestimmen Sie den mikrokanonischen Dichteoperator $\hat{\rho}_{\mathrm{MK}}(E)$ und die Entropie $S(E)$ für gegebenes $N \gg 1$. Skizzieren Sie den Verlauf von $S(E)$.
Verwende die Relation $N_\uparrow = E\frac{2}{E_0} = (2E/E_0)$. Dann

$$\Omega(E) = \frac{N!}{N_\uparrow!(N-N_\uparrow)!}, \qquad \Rightarrow \qquad S(E) = k_B \ln(\Omega) \tag{13}$$

und mit Hilfe von Stirling

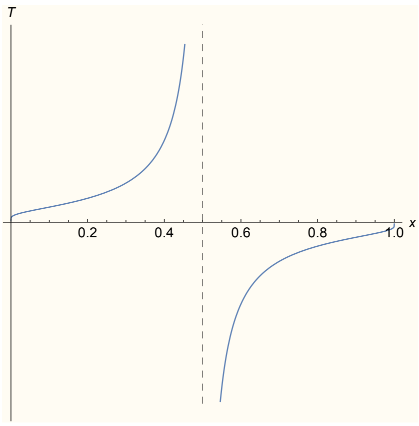
$$\begin{aligned} S(E) =& k_B \ln(\Omega) \simeq k_B \left[N \ln N - N - N_\uparrow \ln N_\uparrow - N_\uparrow - N_\downarrow \ln N_\downarrow - N_\downarrow\right] \\ =& k_B N \left[x \ln \frac{1}{x} + (1-x) \ln \frac{1}{(1-x)}\right], \qquad x = \frac{N_\uparrow}{N} = \frac{2E}{E_0 N}. \end{aligned} \tag{14}$$



(mit $x = \frac{E}{NE_0}$).

(b) Berechnen Sie die Temperatur T als Funktion von E und diskutieren Sie das Resultat.

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{2E_0 N}\frac{\partial S}{\partial x}, \qquad T(E) = \frac{2E_0/k_B}{\ln(1-x) - \ln x}. \tag{15}$$



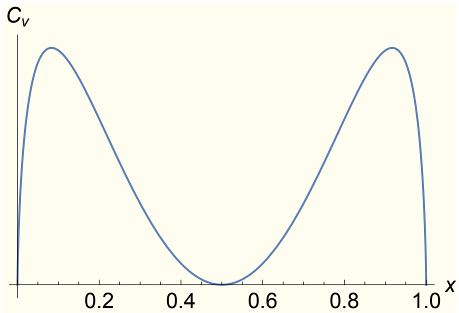
(mit $x = \frac{2E}{NE_0}$).
$T(x)$ ist unstetig in $x = 0.5$ [$\lim_{x\to 0.5} T(x) = +\infty$], und $T < 0$ für $0.5 < x < 1$. Eine negative Temperatur ist möglich, weil das Spektrum des Hamiltonoperators (12) von oben beschränkt ist.

(c) Berechnen und skizzieren Sie die spezifische Wärmekapazität C (bei konstantem E_0 und N) als Funktion von E.

Wir schreiben die innere Energie als $E = x\frac{E_0}{2}N$. Dann

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial E}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial T} = \frac{E_0}{2}N\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^{-1} \tag{16}$$

$$C_V = Nk_B(1-x)x\left[\ln(1-x) - \ln(x)\right]^2 \geq 0. \tag{17}$$



(mit $x = \frac{2E}{NE_0}$).

Kreuze für: 16a) + b); 16c); 17a)+b); 17c)+d); 18a); 18b)+ c)