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 $|\psi_n\rangle$.

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

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

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

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{10} \\ \rho_{01} & \rho_{00} \end{pmatrix}, \tag{2}$$

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.

(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 (2) durch die Erwartungswerte S_x, S_y und S_z aus.

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

(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.

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)

$$\hat{H} = \frac{E_0}{2} \sum_{i=1}^{N} (|\uparrow\rangle_i \langle\uparrow|), \tag{3}$$

(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 $S(E)$.

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

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

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