Gerhard Kahl & Florian Libisch

STATISTISCHE PHYSIK 1 (VU – 136.020)

5. Tutoriumstermin (13.5.2022)

T14. Gegeben ist ein ideales Gas im Schwerefeld (N Teilchen der Masse m), das sich in einem dreidimensionalen, nach unten abgeschlossenen Volumen mit quadratischer Grundfläche (Kantenlänge L) befindet. Nach oben hin (d.h. in Richtung der positiven z-Achse) ist das Volumen durch einen schweren Kolben (Index K) der Masse M abgeschlossen. Die potentielle Energie der Gasteilchen kann vernachlässigt werden. Das Gesamtsystem ist an ein Temperaturbad (mit Temperatur T) angeschlossen. Beachten Sie, daß der Kolben Teil des Systems ist.

(a) Geben Sie die Hamiltonfunktion und den Phasenraum Γ dieses Systemes an und berechnen Sie die kanonische Zustandssumme;

(b) berechnen Sie ausgehend vom Ergebnis (a) die thermische und die kalorische Zustandsgleichung.

Hinweis: Überlegen Sie in einem ersten Schritt, welche der Integrationen Sie bei der Mittelwertbildung tatsächlich ausführen müssen.

Lösung:
(a) Der Phasenraum besteht aus den möglichen realisierbaren Impulsen und Aufenthaltsorten der Teilchen des idealen Gases und aus der Position und dem Impuls des Kolbens, welcher sich nur in eine Raumrichtung bewegen kann.

$$\Gamma = \mathbb{R}^{3N} \times [0, L]^{2N} \times [0, q_K]^N \times [0, \infty] \times \mathbb{R}$$

Der Hamiltonian besteht aus dem kinetischen Energie der idealen Gasteilchen, der kinetischen Energie des Kolbens und der potentiellen Engergie des Kolbens im Schwerefeld.

$$H(p, q) = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + Mgq_K + \frac{p_K^2}{2M}$$

Die kanonische Zustandssummme ergibt sich somit zu:

$$
\begin{aligned}
Z_K &= \frac{1}{N!h^{3N+1}} \int_\Gamma dp^{N+1} dq^{N+1} e^{-\beta H(p,q)} \\
&= \frac{1}{N!h^{3N+1}} \int_\Gamma dp^{N+1} dq^{N+1} e^{-\beta \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + Mgq_K + \frac{p_K^2}{2M}} \\
&= \frac{1}{N!h^{3N+1}} \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} \int_{\Pi_{ideal}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} e^{-\beta \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + Mgq_K + \frac{p_K^2}{2M}} dp^N dq^N dp_K dq_K \\
&= \frac{1}{N!h^{3N+1}} \int_0^\infty (L^2 q_K)^N (\frac{2\pi m}{\beta})^{\frac{3}{2}N} (\frac{2\pi M}{\beta})^{\frac{1}{2}} e^{-\beta Mgq_K} dq_K \\
&= \frac{L^{2N}}{N!h^{3N+1}} (\frac{2\pi m}{\beta})^{\frac{3}{2}N} (\frac{2\pi M}{\beta})^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty q_K^N e^{-\beta Mgq_K} dq_K \\
&= \frac{L^{2N}}{N!h^{3N+1}} (\frac{2\pi m}{\beta})^{\frac{3}{2}N} (\frac{2\pi M}{\beta})^{\frac{1}{2}} \frac{N!}{(\beta Mg)^{N+1}}
\end{aligned}
$$

von der 5ten in die 6te Zeile wurde folgende Relation verwendet, wobei diese im wesentlichen eine Abwandlung der Gammafunktion aus der Formelsammlung ist.

$$
\begin{aligned}
\int_0^\infty x^N e^{-Cx} dx &= \left[x^N \frac{1}{-C} e^{-Cx} \right]_0^\infty + \frac{N}{C} \int_0^\infty x^{N-1} e^{-Cx} dx \\
&= ... \\
&= \frac{N!}{C^{N+1}}
\end{aligned}
$$

(b) Nun berechnen wir uns die kalorische Zustandsgleichung. Dazu betrachten wir den Energieerwartungswert.

$$
\begin{aligned}
E &= \langle E \rangle_K \\
&= \frac{1}{Z_K N! h^{3N+1}} \int_\Gamma H(p,q) dp^{N+1} dq^{N+1} e^{-\beta H(p,q)} \\
&= -\frac{1}{Z_K} \frac{\partial}{\partial \beta} Z_K \\
&= -\beta^{\frac{1}{2}(5N+3)} \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{\beta^{\frac{1}{2}(5N+3)}} \\
&= \frac{1}{2}(5N+3) \frac{1}{\beta} \\
&= \frac{1}{2}(5N+3) k_B T
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle V\rangle_K &= \frac{1}{Z_K N! h^{3N+1}}\int_\Gamma dp^{N+1}dq^{N+1}L^2 q_K e^{-\beta H(p,q)}\\
&= \frac{1}{Z_K N! h^{3N+1}}\int_0^\infty (L^2 q_K)^{N+1}(\frac{2\pi m}{\beta})^{\frac{3}{2}N}(\frac{2\pi M}{\beta})^{\frac{1}{2}}e^{-\beta M g q_K}dq_K\\
&= (\int_0^\infty (L^2 q_K)^N e^{-\beta M g q_K}dq_K)^{-1}(\int_0^\infty (L^2 q_K)^{N+1}e^{-\beta M g q_K}dq_K)\\
&= (\int_0^\infty (L^2 q_K)^N e^{-\beta M g q_K}dq_K)^{-1}L^{2(N+1)}(\Big[q_K^{N+1}\frac{1}{-\beta M g}e^{-\beta M g q_K}\Big]_0^\infty + \frac{N+1}{\beta M g}\int_0^\infty q_K^N e^{-\beta M g q_K}dq_K)\\
&= (N+1)\frac{L^2 k_B T}{Mg}
\end{aligned}
$$

Ein alternative wäre die Formel für das Integral in der 2ten Zeile anzuwenden und danach kürzen. Dies bringt einen gleich zum Ergebnis. Wir können hier $\frac{Mg}{L^2}$ als druck P interpretieren was uns zu der Gleichung $PV = (N+1)k_B T$ bringt.

T15. Betrachten Sie ein dreidimensionales System von klassischen Teilchen, dessen Hamilton-Funktion durch

$$\mathcal{H} = \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{q}_i^2\right)$$

gegeben ist. Das System ist in Kontakt mit einem Temperaturbad der Temperatur T und einem Teilchenreservoir mit chemischem Potential μ.

(a) Berechnen Sie die großkanonische Zustandssumme des Systems, Z_g;

(b) Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, $P(N)$, daß sich genau N Teilchen im System befinden; sie ist gegeben durch

$$P(N) = \frac{1}{h^{3N}N!}\int d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N \rho_\mathrm{g}(\mathbf{p}^N, \mathbf{q}^N).$$

Zeigen Sie, daß diese Wahrscheinlichkeitsverteilung normiert ist (also $\sum_N P(N) = 1$). Berechnen Sie weiters aus Z_g die mittlere Teilchenzahl $\langle N\rangle_\mathrm{g}$ und stellen Sie $P(N)$ als Funktion von $\langle N\rangle_\mathrm{g}$ dar. Zeigen Sie, daß es sich um eine Poisson-Verteilung handelt.

(c) Berechnen Sie $\langle E\rangle_\mathrm{g}$ und die Wärmekapazität des Systems.

(d) Drücken Sie das chemische Potential μ als Funktion der Teilchenzahl $\langle N\rangle_\mathrm{g}$ und der Temperatur aus. Wie verhält sich $\beta\mu$ für große T bei konstantem $\langle N\rangle_\mathrm{g}$?

a.) Die großkanonische Zustandssumme ist gegeben durch:

$$Z_g = \sum_{N=0}^\infty \int \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{N! h^{3N}} \exp\{-\beta[\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p}) - \mu N]\} \tag{1}$$

Neben einer Integration muss nun auch über die Teilchen N summiert werden. In der folgenden expliziten Berechnung wird die Definition der Fugazität $z = \exp\{\beta\mu\}$ verwendet. Es gilt:

$$
\begin{aligned}
Z_g &= \sum_{N=0}^{\infty} \int \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{N! h^{3N}} \exp\{-\beta[\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p}) - \mu N]\} = \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \int \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{N! h^{3N}} \exp\left\{ -\beta\left[\sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{q}_i^2\right) - \mu N\right]\right\} = \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \int \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{N! h^{3N}} \exp\left\{ -\sum_i \frac{\beta \mathbf{p}_i^2}{2m}\right\} \exp\left\{ -\sum_i \frac{\beta m\omega^2}{2}\mathbf{q}_i^2\right\} z^N = \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{N! h^{3N}} \int d^{3N}q \prod_{i=1}^{N} \exp\left\{\frac{-\beta \mathbf{p}_i^2}{2m}\right\} \int d^{3N}p \prod_{i=1}^{N} \exp\left\{\frac{-\beta m\omega^2}{2}\mathbf{q}_i^2\right\} = \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{N! h^{3N}} \prod_{i=1}^{3N} \left[\int dq \, \exp\left\{\frac{-\beta p^2}{2m}\right\}\right]\left[\int dp \, \exp\left\{\frac{-\beta m\omega^2}{2}q^2\right\}\right] = \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{N! h^{3N}} \prod_{i=1}^{3N} \left[\frac{2m\pi}{\beta}\right]^{1/2}\left[\frac{2\pi}{\beta m\omega^2}\right]^{1/2} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{N!}\left[\frac{2\pi}{h\beta\omega}\right]^{3N} = \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{[\xi^3 z]^N}{N!} = \exp\{z\xi^3\}
\end{aligned} \tag{2}
$$

Im letzten Schritt nutzt man die Reihendarstellung der Exponentialfunktion um ein übersichtlicheres Ergebnis zu erhalten. Ebenso definieren wir aus Gründen der Lesbarkeit eine neue Größe ξ:

$$\xi = \frac{2\pi}{h\beta\omega}$$

b.) Die großkanonische Zustandsdichte ist definiert als:

$$\rho_g(\mathbf{p}^N, \mathbf{q}^N) = \frac{1}{Z_g} \exp\{-\beta[\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p}) - \mu N]\} \tag{3}$$

Wir können für die Zustandssumme (1) verwenden und erhalten bei gegebener Hamiltonfunktion den folgen den Ausdruck:

$$
\begin{aligned}
P(N) &= \frac{1}{h^{3N} N!} \int d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N \, \rho_g(\mathbf{p}^N, \mathbf{q}^N) = \\
&= \frac{1}{h^{3N} N!} \frac{1}{Z_g} \int d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N \, \exp\{-\beta[\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p}) - \mu N]\} = \\
&= \frac{z^N}{h^{3N} N!} \frac{1}{Z_g} \prod_{i=1}^{3N} \left[\int dq \, \exp\left\{\frac{-\beta p^2}{2m}\right\}\right]\left[\int dp \, \exp\left\{\frac{-\beta m\omega^2}{2}q^2\right\}\right] = \\
&= \frac{z^N}{N!} \frac{1}{Z_g} \left[\frac{2\pi}{h\beta\omega}\right]^{3N} = \frac{[z\xi^3]^N}{N!} \exp\{-z\xi^3\}
\end{aligned} \tag{4}
$$

Dieser Ausdruck ist normiert, wie im folgenden schnell gezeigt werden kann. Wieder soll die Reihendarstellung der Exponentialfunktion ausgenutzt werden:

$$1 = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{[z\xi^3]^N}{N!} \exp\{-z\xi^3\} = \exp\{-z\xi^3\} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{[z\xi^3]^N}{N!} = \exp\{-z\xi^3\} \exp\{+z\xi^3\} = 1$$

Die Wahrscheinlichkeit in (4) kann allerdings auch mit der mittleren Teilchendichte angegeben werden. Jener Erwartungswert $\langle N \rangle_g$ ergibt:

$$\begin{aligned}
\langle N \rangle_g &= \sum_{N=0}^{\infty} \int \frac{d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N}{h^{3N} N!} N \rho_g(\mathbf{p}^N, \mathbf{q}^N) = \\
&= \frac{1}{Z_g} \sum_{N=0}^{\infty} \int \frac{d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N}{h^{3N} N!} N \exp\{-\beta[\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - \mu N]\} = \\
&= \frac{1}{Z_g} \sum_{N=0}^{\infty} \int \frac{d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N}{h^{3N} N!} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \exp\{-\beta[\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - \mu N]\} = \\
&= \frac{1}{Z_g} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{N=0}^{\infty} \int \frac{d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N}{h^{3N} N!} \exp\{-\beta[\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - \mu N]\} = \\
&= \frac{1}{Z_g} \frac{1}{\beta} \frac{\partial Z_g}{\partial \mu} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln(Z_g) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} z\xi^3 = \\
&= \frac{\xi^3}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} e^{\beta\mu} = \xi^3 e^{\beta\mu} = z\xi^3 \qquad (5)
\end{aligned}$$

Hier wurde ausgenutzt, dass die Ableitung nach dem chemischen Potential sowohl aus dem Integral, als auch aus der Summe gezogen werden kann. Aus der Definition der Zustandssumme (1) lässt sich der Ausdruck vereinfachen und führt zu einem übersichtlichen Ergebnis, welches wir nun in der Wahrscheinlichkeit in (4) wiederfinden. Wir können $P(N)$ weiter vereinfachen zu:

$$P(N) = \frac{[z\xi^3]^N}{N!} \exp\{-z\xi^3\} = \frac{\langle N \rangle_g^N}{N!} \exp\{-\langle N \rangle_g\} \qquad (6)$$

Das entspricht einer Poisson-Verteilung $P_\lambda(k) = (\lambda^N/N!) \exp\{-\lambda\}$, wobei die mittlere Teilchenanzahl analog zum Parameter λ ist.

c.) Analog zu $\langle N \rangle_g$ aus (5) kann auch die mittlere Energie als der Erwartungswert der

Hamiltonfunktion $\langle\mathcal{H}\rangle_g = \langle E\rangle_g$ berechnet werden:

$$\begin{aligned}
\langle E\rangle_g &= \sum_{N=0}^{\infty}\int \frac{d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N}{h^{3N}N!}\mathcal{H}\rho_g(\mathbf{p}^N,\mathbf{q}^N) = \\
&= \frac{1}{Z_g}\sum_{N=0}^{\infty}\int \frac{d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N}{h^{3N}N!}\mathcal{H}\exp\{-\beta[\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p})-\mu N]\} = \\
&= \frac{1}{Z_g}\sum_{N=0}^{\infty}\int \frac{d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N}{h^{3N}N!}\left[\mu N - \frac{\partial}{\partial\beta}\right]\exp\{-\beta[\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p})-\mu N]\} = \\
&= \mu\langle N\rangle_g - \frac{1}{Z_g}\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_{N=0}^{\infty}\int \frac{d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N}{h^{3N}N!}\exp\{-\beta[\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p})-\mu N]\} = \\
&= \mu\langle N\rangle_g - \frac{1}{Z_g}\frac{\partial Z_g}{\partial\beta} = \mu\langle N\rangle_g - \frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z_g) = \mu\langle N\rangle_g - \frac{\partial}{\partial\beta}z\xi^3 = \\
&= \mu\langle N\rangle_g - \left[\frac{2\pi}{h\omega}\right]^3\frac{\partial}{\partial\beta}[e^{\beta\mu}\beta^{-3}] = \\
&= \mu\langle N\rangle_g - \left[\frac{2\pi}{h\omega}\right]^3[\mu\beta^{-3}-3\beta^{-4}]e^{\beta\mu} = \\
&= \mu\langle N\rangle_g + z\xi^3\left[\frac{3}{\beta}-\mu\right] = 3k_B\langle N\rangle_g T
\end{aligned} \tag{7}$$

Wieder nutzen wir aus, dass die Ableitung nach β mit Summe und Integration vertauscht, wobei wir dieses mal berücksichtigen müssen, dass die Ableitung nach β auch auf die Fugazität wirkt. Wir können zudem mit (5) das Ergebnis recht kurz anschreiben. Für die Berechnung der spezifischen Wärmekapazität halten wir N konstant und leiten nach der Temperatur ab:

$$C_V = \left.\frac{\partial E}{\partial T}\right|_{V,N} = 3k_B\langle N\rangle_g \tag{8}$$

d.) Um das chemische Potential μ schnell zu bestimmen ziehen wir die Fugazität $z = \exp\{\beta\mu\}$ heran und setzten für z direkt (5) ein:

$$\mu = \frac{1}{\beta}\ln(z) = k_B T\ln\left(\frac{\langle N\rangle_g}{\xi^3}\right) \tag{9}$$

Das Produkt $\beta\mu$ so vereinfacht werden, dass der temperaturabhängige Teil leicht erkennbar wird:

$$\beta\mu = \ln\left(\frac{\langle N\rangle_g}{\xi^3}\right) = \ln(\text{const.}) - 3\ln(T)$$

Für große Temperaturen wird $\beta\mu$ immer kleiner, bei $T\to\infty$ wird schließlich auch $\beta\mu\to-\infty$.

T16. Betrachten Sie einen eindimensionalen, quantenmechanischen harmonischen Oszillator.

(a) Was sind die drei niedrigsten Energiezustände für drei Bosonen (Spin $s = 0$) in diesem Oszillator?

(b) Was sind die drei niedrigsten Energiezustände für drei Fermionen (Spin $s = 1/2$) in diesem Oszillator?

Betrachten Sie nunmehr ein einziges Boson in dem Oszillator. Der Zustand sei jeweils beschrieben durch einen Dichteoperator $\hat{\rho}$. Entspricht $\hat{\rho}$ einem reinen oder einem gemischten Zustand? Geben Sie jeweils die entsprechenden beteiligten Zustände und deren klassische Wahrscheinlichkeiten an. Berechnen Sie außerdem den Energieerwartungswert des Zustandes.

(c)
$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1| \right).$$

(d)
$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} \left(3\,|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1| \right).$$

(e)
$$\hat{\rho} = c \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} |n\rangle\langle n|.$$

(f)
$$\hat{\rho} = c \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!m!}} |m\rangle\langle n|.$$

Lösung:

(a) Bosonen haben ganzzahliges Spin, in diesem Fall $s = 0$, und können deswegen beliebig die Energiezustände besetzen. Fermionen, hier mit $s = 1/2$, müssen den Pauli Prinzip folgen und es können sich deswegen maximal 2 Teilchen in einem Energiezustand gleichzeitig befinden.

Im harmonischen Oszillator gilt: $E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.
Die ersten drei Energiezustände sind dann für 3 Bosonen:

1. $E = \frac{3\hbar\omega}{2}$ mit Entartung: 1

2. $E = \frac{\hbar\omega}{2} 2 + \frac{3\hbar\omega}{2} = \frac{5\hbar\omega}{2}$ mit Entartung: 1

3. $E = \frac{\hbar\omega}{2} + 3\hbar\omega = \frac{7\hbar\omega}{2}$ mit Entartung: 2

(b) Für die drei Fermionen erhalten wir hingegen:

1. $E = \frac{2\hbar\omega}{2} + \frac{3\hbar\omega}{2} = \frac{5\hbar\omega}{2}$ mit Entartung: 2

2. $E = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{3\hbar\omega}{2} 2 = \frac{7\hbar\omega}{2}$ oder

$E = \frac{2\hbar\omega}{2} 2 + \frac{5\hbar\omega}{2} = \frac{7\hbar\omega}{2}$ mit Entartung: 4

3. $E = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{3\hbar\omega}{2} + \frac{5\hbar\omega}{2} = \frac{9\hbar\omega}{2}$ mit Entartung: 10.

Wir betrachten jetzt nur ein einziges Boson im Oszillator.
Allgemeines “Kochrezept”:
1. Falls $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ dann ist der Zustand ein reiner Zustand. Ansonsten gemischt.
2. Für die klassischen Wahrscheinlichkeiten und die entsprechenden Zuständen lösen wir das Eigenwertproblem: $\hat{\rho}\,|\psi_n\rangle = p_n\,|\psi_n\rangle$.
3. Energieerwartungswert berechnen wir mit: $\langle E\rangle = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{H}\}$.

Hinweis: $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{n} + 1/2)$ und $\hat{n}\,|n\rangle = n\,|n\rangle$.

(c) 1.

$$\hat{\rho}^2 = \frac{1}{4}\left[2\,|0\rangle\langle 0| + 2\,|1\rangle\langle 0| + 2\,|0\rangle\langle 1| + 2\,|1\rangle\langle 1|\right] = \tag{10}$$

$$= \hat{\rho} \tag{11}$$

Es ist offensichtlich ein reiner Zustand.

2.
Wir definieren: $|0\rangle = (1,0)^{\mathrm{T}}$ und $|1\rangle = (0,1)^{\mathrm{T}}$.
Mit dieser Definition ergibt sich $\hat{\rho}$ zu:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{12}$$

Die Eigenwerte dieser Matrix sind: $p_0 = 0$ und $p_1 = 1$. Das sind die klassischen Wahrscheinlichkeiten. Diese Lösung bestätigt auch, dass es sich um einen reinen Zustand handelt! Die dazugehörigen Eigenvektoren (Zustände) lauten:

$$|\psi_1\rangle = (-1,1)^{\mathrm{T}}\frac{1}{\sqrt{2}}$$

und

$$|\psi_2\rangle = (1,1)^{\mathrm{T}}\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

3.

$$\langle E\rangle = \frac{1}{2}\sum_i \langle i|\left[|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1|\right]\hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right)|i\rangle = \tag{13}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\left[\langle 0|\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right)|0\rangle + \langle 1|\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right)|1\rangle\right] = \tag{14}$$

$$= \hbar\omega. \tag{15}$$

(d) 1.

$$\hat{\rho}^2 = \frac{1}{16}\left[10\,|0\rangle\langle 0| + 4\,|1\rangle\langle 0| + 4\,|0\rangle\langle 1| + 2\,|1\rangle\langle 1|\right] = \tag{16}$$

$$\neq \hat{\rho} \tag{17}$$

Es ist offensichtlich ein gemischter Zustand.

2.
Wir definieren: $|0\rangle = (1,0)^{\mathrm{T}}$ und $|1\rangle = (0,1)^{\mathrm{T}}$.
Mit dieser Definition ergibt sich $\hat{\rho}$ zu:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{18}$$

Die Eigenwerte dieser Matrix sind: $p_0 = \frac{2-\sqrt{2}}{4}$ und $p_1 = \frac{2+\sqrt{2}}{4}$. Das sind die klassischen Wahrscheinlichkeiten. Die dazugehörigen Eigenvektoren (Zustände) lauten:

$$|\psi_1\rangle = (1-\sqrt{2}, 1)^{\mathrm{T}} \frac{1}{2(2-\sqrt{2})}$$

und

$$|\psi_2\rangle = (1+\sqrt{2}, 1)^{\mathrm{T}} \frac{1}{2(2+\sqrt{2})}.$$

3.

$$\begin{aligned} \langle E\rangle &= \frac{1}{4}\sum_i \langle i| \left[3\,|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1|\right] \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right) |i\rangle = && (19) \\ &= \frac{1}{4}\hbar\omega \left[3\,\langle 0| \left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right) |0\rangle + \langle 1| \left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right) |1\rangle\right] = && (20) \\ &= \frac{3}{4}\hbar\omega. && (21) \end{aligned}$$

(e) 1.

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^2 &= c^2 \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\frac{1}{i!}\,|n\rangle\langle n|\,|i\rangle\langle i| = && (22) \\ &= c^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{n!}\right)^2 |n\rangle\langle n| && (23) \\ &\neq \hat{\rho}, && (24) \end{aligned}$$

wobei $\langle n|\,|i\rangle = \delta_{ni}$.

2.
Die Matrix ist schon diagonal, d.h. die Eigenwerte bzw. klassischen Wahrscheinlichkeiten, lauten: $p_n = \frac{c}{n!}$ für $n \in [0, \infty)$.

3.

$$\langle E\rangle = \sum_i \langle i| \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} |n\rangle\langle n|\right) \hbar\omega \left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right) |i\rangle = \tag{25}$$

$$= \hbar\omega c \sum_n \langle n| \left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right) |n\rangle = \tag{26}$$

$$= \hbar\omega c \sum_n \frac{2n+1}{n!} = \tag{27}$$

$$= \frac{\hbar\omega c}{2} 3e = \tag{28}$$

$$= \frac{3}{2}\hbar\omega. \tag{29}$$

Die Konstante c kann mithilfe der Normierung $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\} = 1$ berechnet werden.

$$1 = c \sum_n \sum_i \langle i| |n\rangle\langle n| |i\rangle \frac{1}{n!} = \tag{30}$$

$$= c \sum_n \frac{1}{n!} = \tag{31}$$

$$= ce. \tag{32}$$

Es folgt daraus, dass $c = 1/e$ ist. Hier haben wir die Reihendarstellung der Exponentialfunktion benutzt.

(f) 1.

$$\hat{\rho}^2 = c^2 \sum_{n,m,i,j} \frac{1}{\sqrt{n!m!i!j!}} |n\rangle\langle m| |j\rangle\langle i| = \tag{33}$$

$$= c^2 \sum_{n,m,j} \frac{1}{n!} \frac{1}{\sqrt{m!j!}} |j\rangle\langle m| = \tag{34}$$

$$= c^2 e \sum_{m,j} \frac{1}{\sqrt{m!j!}} |j\rangle\langle m| = \tag{35}$$

$$= \hat{\rho}, \tag{36}$$

wobei analog zu Unterpunkt (e): $c = 1/e$. Es ist ein reiner Zustand.

2.
Analog zu Unterpunkt (e) sind die klassischen Wahrscheinlichkeiten gegeben durch: $p_n = \frac{c}{n!}$ für $n \in [0, \infty)$.

Als Kontrolle kann man schauen ob die Summer aller Wahrscheinlichkeiten 1 ergibt:

$$\sum_n p_n = \sum_n \frac{c}{n!} = \frac{e}{e}.$$

3.

$$\langle E \rangle = \mathrm{Sp}\{\hat{\rho}\hat{H}\} = \tag{37}$$

$$= \sum_i \langle i| \left(c \sum_n \sum_m \frac{1}{\sqrt{n!m!}} |n\rangle\langle m| \right) \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) |i\rangle = \tag{38}$$

$$= \hbar\omega c \sum_{n,m,c} \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \langle i|\, |n\rangle\langle m| \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) |i\rangle = \tag{39}$$

$$= \hbar\omega c \sum_i \left[\frac{1}{i!} \frac{1}{i!} \left(i + \frac{1}{2} \right) \right] = \tag{40}$$

$$= \frac{\hbar\omega c}{2} \sum_i \left(\frac{2i+1}{i!} \right) = \tag{41}$$

$$= \frac{3}{2}\hbar\omega, \tag{42}$$

mit $c = 1/e$.

Zu kreuzen: 14a, 14b; 15a, 15b, 15cd; 16ab, 16cd, 16ef