Technische Universität
Wien

PD Dr. J. Tomczak, Prof. A. Toschi, Prof. K. Held

3. Übung zur Quantentheorie II

Wintersemester 2019/2020

<u>TUTORIUM</u>: Freitag, 8.11.2019.

6. Realisierung von Qubits mit Quantenpunkten *1+1+2+1=5 Punkte*

Wir betrachten zwei gekoppelte Quantenpunkte ("u", "d" in der Mitte der Figur, siehe unten), deren Ladung und Anbindung an die Außenwelt (Source "S" und Drain "D" Elektrode) durch die Gate-Spannungen 1-4 kontrollierbar ist. Binäre Qubits lassen sich entweder durch die Ladung (vorhanden/nicht vorhanden: $N_u = 0,1$, $N_d = 0,1$ in der Skizze) oder durch den Spinzustand (up/down) realisieren. Im einfachsten Fall lässt sich die Kopplung der Qubits durch einen Hamilton Operator der Form

$$\hat{H} = -\frac{g}{\hbar}\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \tag{1}$$

ausdrücken, den Sie schon aus Aufgabe **5** der 2. Übung kennen. Im Fall der Ladung beschreibt $\mathbf{S}_i = \frac{\hbar}{2}(\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$ einen Pseudospin, ansonsten den physikalischen Spin des Quantenpunkts i.

a) Wie lautet der Dichteoperator des Gesamtsystems $\hat{\rho}(t \geq 0)$ für den Zustand $|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$ (aus Aufgabe **5b**) in der Gesamtdrehimpulsbasis?

b) Berechnen Sie das Zeitmittel des Dichteoperators: $\overline{\hat{\rho}} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_0^T dt\, \hat{\rho}(t)$.
War das entsprechende Ergebnis zu erwarten?

c) Wie lautet der auf den Spin 1 reduzierte Dichteoperator $\hat{\rho}_1(t) = \sum_{m_2=\uparrow,\downarrow} {}_2\langle m_2|\hat{\rho}(t)|m_2\rangle_2$ (in der Basis $\{|\uparrow\rangle_1, |\downarrow\rangle_1\}$) zur Zeit $t \geq 0$? Wie lautet $\hat{\rho}_2(t)$?

d) Zu welchem Zeitpunkt entspricht die totale Dichtematrix aus **a)** bzw. die reduzierte Dichtematrix aus **c)** einem reinen Zustand? Vergleichen Sie die entsprechenden Zeiten auch mit dem Ergebnis aus Punkt **5c)** des letzten Übungsblattes. Was fällt Ihnen auf?

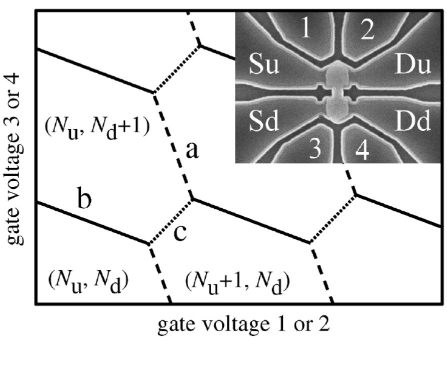

Abbildung 1: Gekoppelte Quantenpunkte (A. Hübel, K. Held, J. Weis, K. v. Klitzing: PRL 101, 186804 (2008)).

7. Dichteoperator für das kanonische Ensemble *2+1+1+1+1=6 Punkte*

Um thermische Fluktuationen zu vermeiden, werden Quantenpunktexperimente oft bei Temperaturen im milli-Kelvin Bereich ausgeführt. Hier betrachten wir den Fall endlicher Temperaturen für die Entropie der durch Gleichung (1) gekoppelten Quantenpunkte aus Aufgabe **6**.

a) Vergleichen Sie die Entropie des Gesamtsystems, berechnet (i) aus der Helmholtzschen freien Energie und (ii) vermöge des Dichteoperators und der von Neumann Entropie für das kanonische Ensemble.

b) Zeigen Sie, dass mit $\hat{\rho} = \hat{\rho}_{12}$ und $\hat{\rho}_i$ (i=1,2) aus Aufgabe 6. gilt: $S(\hat{\rho}_{12}) \leq S(\hat{\rho}_1) + S(\hat{\rho}_2)$.

Wir wollen nun zeigen, dass die von-Neumann Entropie des Gesamtsystems im Generellen kleiner ist als die Summe der Entropien der Einzelsysteme. Dazu brauchen wir einige Hilfsmittel: Eine differenzierbare Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ heißt konkav, falls gilt: $\forall x, y : f(y) - f(x) \leq (y - x)f'(x)$.

c) Zeigen Sie, dass für Observablen $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ und konkaves f die Klein'sche Ungleichung

$$\mathrm{Tr}\left[f(\mathbf{B}) - f(\mathbf{A})\right] \leq \ \mathrm{Tr}\left[(\mathbf{B} - \mathbf{A})f'(\mathbf{A})\right] \tag{2}$$

gilt und dass $f(x) = -x \ln x$ für $x > 0$ konkav ist.

Man bezeichnet $S(\hat{\rho}_1|\hat{\rho}_2) = +k_B \ \mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_1(\ln\hat{\rho}_1 - \ln\hat{\rho}_2)\right]$ als die *relative Entropie* der zwei, auf denselben Hilbertraum wirkenden, Dichteoperatoren $\hat{\rho}_i$ $(i = 1, 2)$.

d) Zeigen Sie, dass für alle derartigen $\hat{\rho}_1$, $\hat{\rho}_2$ gilt: $S(\hat{\rho}_1|\hat{\rho}_2) \geq 0$

e) Benutzen Sie die Nichtnegativität der relativen Entropie, um die *Subadditivität* der Entropie

$$S(\hat{\rho}_{12}) \leq S(\hat{\rho}_1) + S(\hat{\rho}_2) \tag{3}$$

zu beweisen. *Hinweis:* betrachten Sie die relative Entropie von $\hat{\rho}_{12}$ und $\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$.

8. Green'sche Funktion des Streuproblems *3+1=4 Punkte*

Ausgehend von der stationären Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\mathbf{r})\right)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{4}$$

und der Umbenennung $U(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r})$ ergibt sich eine lineare inhomogene Differentialgleichung der Form $D_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \Lambda_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ mit dem Helmholtz'schen Differentialoperator $D_{\mathbf{k}} = \Delta + \mathbf{k}^2$. Die mit der homogenen Gleichung $D_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0$ assoziierte Green'sche Funktion erfüllt $D_{\mathbf{k}}G_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$.

a) Bestimmen Sie die Green'sche Funktion. *Hinweis:* Lösen Sie die Bestimmungsgleichung im Impulsraum und Fouriertransformieren Sie das Resultat zurück in den Ortsraum. Wählen Sie dabei die Hilfswege der Integration in der komplexen Ebene in geeigneter Weise, um die auslaufende Green'sche Funktion, in der Vorlesung mit $G^+_{\mathbf{k}}$ bezeichnet, zu erhalten.

b) Berechnen Sie die Teilchenstromdichte, die sich aus der Green'schen Funktion ergibt:

$$J(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2im}\left[G^*(\mathbf{r})\nabla G(\mathbf{r}) - G(\mathbf{r})\nabla G^*(\mathbf{r})\right]. \tag{5}$$

Was erhalten Sie für die Winkelabhängigkeit und wieso?