WS 2011/12 TPIV: Quantenphysik und statistische Physik Blatt 11

Vorrechnen des Übungsblattes: Freitag, 27.01. und Montag 30.01.2012

26. Eigenschaften der Spur von beliebigen Matrizen

A, B, C seien komplexe $N \times N$-Matrizen, die nicht notwendigerweise hermitesch sind. Mit a und b seien im Folgenden komplexe Zahlen gemeint.

(a) Zeigen Sie, dass die Spur folgenden Eigenschaften besitzt:

(i) $\mathrm{Sp}\,(aA + bB) = a\,\mathrm{Sp}(A) + b\,\mathrm{Sp}(B)$

(ii) $\mathrm{Sp}\,(A^\dagger) = \Big(\mathrm{Sp}(A)\Big)^*$

(iii) $\mathrm{Sp}\,(ABC) = \mathrm{Sp}\,(CAB)$

(iv) $\mathrm{Sp}\,(S^{-1}AS) = \mathrm{Sp}\,(A)$, wobei S eine invertierbare $N \times N$-Matrix ist.

(2 Punkte)

(b) Beweisen Sie danach mit Hilfe der Jordanschen Normalform von A:

(i) $\mathrm{Sp}\,(A) = \sum\limits_{n=1}^{N} \lambda_n$, wobei λ_i die Eigenwerte von A sind.

(ii) $\det\left(e^A\right) = e^{\mathrm{Sp}(A)}$

(3 Punkte)

27. Dichteoperator eines Spin-$\frac{1}{2}$-Systems

(a) Zeigen Sie: Jeder beliebige, lineare Operator $\hat{A}$ eines zweidimensionalen Hilbertraums lässt sich mit $\hat{\sigma}_0 := \mathbb{1}_2$ und $c_j \in \mathbb{C}$ als Linearkombination

$$\hat{A} = \sum_{j=0}^{3} c_j\,\hat{\sigma}_j$$

der Pauli-Spin-Matrizen und der Identitätsmatrix schreiben. Verwenden Sie hierzu die Matrixdarstellung der Pauli-Spin-Matrizen

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

und die des Operators $\hat{A}$. Welchen Bedingungen genügen die Koeffizienten c_j, wenn $\hat{A}$ ein hermitescher Operator ist?

(2 Punkte)

(b) Der Dichteoperator $\hat{\rho}$ eines physikalischen Systems ist durch die folgenden drei Eigenschaften definiert:

(i) $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$ (hermitescher Operator)

(ii) $\langle\psi|\,\hat{\rho}\,|\psi\rangle \geq 0 \quad \forall \quad |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (positiv semidefiniter Operator)

(iii) $\mathrm{Sp}(\hat{\rho}) = 1$ (Normierung).

Beweisen Sie, dass durch diese Bedingungen der Dichteoperator für ein Spin-$\frac{1}{2}$-System durch die Parameter $|\vec{s}\,| \leq 1$ gemäß

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + s_1\hat{\sigma}_1 + s_2\hat{\sigma}_2 + s_3\hat{\sigma}_3\right) = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + \vec{s}\cdot\hat{\vec{\sigma}}\right),$$

vollständig charakterisiert wird. Zeigen Sie desweiteren, dass $\langle\hat{\sigma}_i\rangle = s_i \;(i = 1,2,3)$ bzw. $\langle\hat{\vec{\sigma}}\rangle = \vec{s}$ gilt.

(3 Punkte)

(c) Zeigen Sie, dass die Entropie $S = -k\,\langle\ln\hat{\rho}\rangle = -k\,\mathrm{Sp}(\hat{\rho}\ln\hat{\rho})$ als Funktion von $s = |\vec{s}\,|$ abnimmt. Skizzieren Sie $S(s)$. Wie sieht die Entropie für einen reinen Zustand aus? Wann wird die Entropie maximal?

(2 Punkte)

(d) Von einem Elektronenstrahl wissen wir aufgrund der Präparation, dass die Elektronen entweder in positiver x-Richtung oder in negativer x-Richtung polarisiert sind. Die Wahrscheinlichkeiten hierfür seien gleich groß. Zeigen Sie, dass die zugehörige Dichtematrix immer maximale Entropie hat. Wie ändert sich die Entropie, wenn die Elektronen mit gleicher Wahrscheinlichkeit in positiver und negativer x-Richtung und in positiver und negativer y-Richtung polarisiert sind? Wie ändert sich die Entropie, wenn die Elektronen mit gleicher Wahrscheinlichkeit in positiver x- und y-Richtung polarisiert sind?

(2 Punkte)

28. Thermischer Zustand unterscheidbarer Teilchen in einem harmonischen Oszillator

In dieser Aufgabe betrachten wir N unterscheidbare Teilchen der Masse m, die nicht miteinander wechselwirken und sich in einem eindimensionalen harmonischen Potential befinden. Ziel ist es die Ortsdarstellung des kanonischen Dichteoperators für die Maxwell-Boltzmann Statistik abzuleiten. Der Hamilton-Operator der N-Teilchen im harmonischen Oszillatorpotential

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^{N} \hat{H}_k = \sum_{k=1}^{N}\left[\frac{\hat{p}_k^2}{2m} + \frac{m}{2}\,\omega^2\,\hat{x}_k^2\right]$$

erfüllt die Eigenwertgleichung

$$\hat{H}\,\varphi_{n_1\ldots n_N}(x_1,\ldots,x_N) = E_{n_1\ldots n_N}\,\varphi_{n_1\ldots n_N}(x_1,\ldots,x_N)\,,$$

wobei die Energie-Eigenwerte durch

$$E_{n_1\ldots n_N} = \hbar\omega\,(n_1 + \ldots n_N + N/2)\,, \qquad n_1,\ldots n_N \in \mathbb{N}_0$$

und die zugehörigen Eigenfunktionen durch die Produktzustände

$$\varphi_{n_1\ldots n_N}(x_1,\ldots x_N) = \varphi_{n_1}(x_1)\ldots\varphi_{n_N}(x_N)$$

gegeben sind. Die Einteilchen-Eigenfunktionen lauten hierbei

$$\varphi_n(x) = \langle x|n\rangle = \sqrt{\frac{\kappa}{\sqrt{\pi}\,2^n\,n!}}\,H_n(\kappa x)\,e^{-\frac{1}{2}\kappa^2x^2} \quad \text{mit} \quad \kappa = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,.$$

(a) Zeigen Sie, dass sich der kanonische Dichteoperator von N nichtwechselwirkenden, unterscheidbaren Teilchen

$$\hat{\rho}_{\text{kan}} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\mathrm{Sp}_{1\ldots N}\left\{e^{-\beta \hat{H}}\right\}}\,, \qquad \beta = \frac{1}{kT}$$

mit Hamiltonian $\hat{H} = \sum_{k=1}^{N} \hat{H}_k$ als Produkt der Einteilchen-Dichteoperatoren schreiben lässt:

$$\hat{\rho}_{\text{kan}} = \hat{\rho}_{\text{kan},1} \otimes \ldots \otimes \hat{\rho}_{\text{kan},N}\,, \quad \text{wobei} \quad \hat{\rho}_{\text{kan},k} = \frac{e^{-\beta \hat{H}_k}}{\mathrm{Sp}_k\left\{e^{-\beta \hat{H}_k}\right\}}\,.$$

(1 Punkt)

(b) Bringen Sie den Einteilchen-Dichteoperator $\hat{\rho}_{\text{kan},k}$ für das harmonische Oszillatorpotential in die folgende Darstellung

$$\hat{\rho}_{\text{kan},k} = (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n_k} \, |n_k\rangle\langle n_k|\,.$$

Dieser Einteilchen-Dichteoperator $\hat{\rho}_{\text{kan},k}$ wird auch als thermischer Zustand bezeichnet.

(2 Punkte)

(c) Der Einteilchen-Dichteoperator lautet in Ortsdarstellung

$$\hat{\rho}_{\text{kan},k} = \int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} dx' \, \rho_{\text{kan},k}(x,x') |x\rangle_k \langle x'| \quad \text{mit} \quad \rho_{\text{kan},k}(x,x') = {}_k\langle x| \, \hat{\rho}_{\text{kan},k} \, |x'\rangle_k\,.$$

Zeigen Sie mit Hilfe der Relation

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{2^n \, n!} \, H_n(x) \, H_n(y) = \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \, e^{-\frac{z^2}{1-z^2}(x^2+y^2) + \frac{2z}{1-z^2}xy}\,, \quad \mathrm{Re}(1-z^2) \geq 0\,,$$

dass $\rho_{\text{kan},k}(x,x')$ einer Gauß-Verteilung entspricht

$$\rho_{\text{kan},k}(x,x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \, e^{-\frac{1}{8\sigma^2}(x+x')^2 - \frac{1}{2}\kappa^4\sigma^2(x-x')^2}\,, \quad \sigma = \left(2\kappa^2 \tanh\left(\beta\hbar\omega/2\right)\right)^{-\frac{1}{2}}\,.$$

(3 Punkte)

(d) Wie lautet die Wahrscheinlichkeitsdichte $w_k(x) = \mathrm{Sp}\{\hat{\rho}_{\text{kan},k} \, |x\rangle_k\langle x|\}$ das k-te Teilchen am Ort x zu finden, wenn wir uns nicht näher für die Orte der anderen Teilchen interessieren. Betrachten Sie insbesondere die Grenzfälle $T \to \infty$ und $T \to 0$ für $w_k(x)$. In welchem Grenzfall finden wir ein klassisches Verhalten der Wahrscheinlichkeitsdichte $w_k(x)$ und in welchem ein rein quantenmechanisches? Begründen Sie ihre Argumente analytisch.

(3 Punkte)