Aufgabe 1 *Beispiele für matrizenwertige Funktionen* **4 P.**

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbb{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \mathbb{C} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathbb{D} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

a) Berechnen Sie die Funktionen: *2 P.*

$$e^{\mathbb{A}}, \ e^{\mathbb{B}}, \ e^{\mathbb{C}}, \ e^{\mathbb{D}}, \ \sin(\mathbb{A}), \ \cos(\mathbb{C}), \ \cosh(\mathbb{D})$$

$$e^A = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & e \end{pmatrix}$$

$$e^B = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & e^{-1} \end{pmatrix}$$

$$C^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$e^C = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} C^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} C^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} C^{2k+1}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \mathbb{1} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} C$$

$$= \cosh(1) \mathbb{1} + \sinh(1) C$$

Ähnlich ist $D^2 = \mathbb{1}$ und

$$e^D = \cosh(1) \mathbb{1} + \sinh(1) D$$

$$\sin(A) = \begin{pmatrix} \sin(1) & 0 \\ 0 & \sin(1) \end{pmatrix}$$

$$\cos(C) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} C^{2k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \mathbb{1}$$

$$= \cos(1) \mathbb{1}$$

$$\cosh(D) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} D^{2k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \mathbb{1} = \cosh(1) \mathbb{1}$$

b) Gilt: $e^{\mathbb{A}}e^{\mathbb{B}} = e^{\mathbb{A}+\mathbb{B}}$?

$$e^{A}e^{B} = \begin{pmatrix} e^{2} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \exp\left(\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\right) = \exp(A+B)$$

c) Kann man den Logarithmus einer Matrix angeben?

Ja.

Aufgabe 2 *Modell eines einfachen Paramagneten* **6 P.**

Gegeben sind N identische, nicht-wechselwirkende Teilchen mit Spin $1/2$, auf welche das externe Magnetfeld $B = (0, 0, B_z)$ einwirkt. Jedes Teilchen hat dann die zwei möglichen Spin-Zustände Up oder Down mit einem Spin, der entweder parallel oder antiparallel zum Magnetfeld B liegt.:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} g\mu_B \vec{B} \cdot \hat{\vec{S}}_i \tag{2}$$

a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme des Systems *2 P.*

Hinweis: Um die richtige Spur zur Berechnung der Zustandssume zu bilden, sollten Sie sich zuerst überlegen, welches die Basiszustände des Systems sind.

Basiszustände $= |s_1, \ldots, s_N\rangle, \quad s_i = \pm\frac{1}{2}$

$$Z = tr\left[e^{-\beta\hat{H}}\right]$$

$$= \sum_{s_1,\ldots s_N=-\frac{1}{2}}^{1/2} \langle s_1, \ldots s_N| e^{-\beta\hat{H}} |s_1, \ldots s_N\rangle$$

$$= \sum_{s_1,\ldots s_N=-\frac{1}{2}}^{1/2} \langle s_1, \ldots, s_N| e^{-g\mu_B \sum_{i=1}^{N} B s_i} |s_1, \ldots, s_N\rangle$$

$$= \sum_{s_1,\ldots s_N=-\frac{1}{2}}^{1/2} e^{-g\mu_B\beta \sum_{i=1}^{N} B s_i}$$

$$= \sum_{s_1,\ldots s_N=-\frac{1}{2}}^{1/2} \prod_{i=1}^{N} e^{-g\mu_B B s_i \beta}$$

$$= \prod_{i=1}^{N} \left[\sum_{s_i=-\frac{1}{2}}^{1/2} e^{-g\mu_B B s_i \beta}\right]$$

$$= \prod_{i=1}^{N} \left[e^{-g\mu_B B(\frac{1}{2})\beta} + e^{g\mu_B B(\frac{1}{2})\beta}\right]$$

$$= \prod_{i=1}^{N} \left[2\cosh\left[\frac{g\mu_B B\beta}{2}\right]\right]$$

$$= \left[2\cosh\left(\frac{g\mu_B \beta B}{2}\right)\right]^N$$

b) Berechnen Sie freie (F) und innere (U) Energie des Systems. *2 P.*

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z$$

$$= -\frac{\partial}{\partial\beta}\left[N\ln\left(2\cosh\frac{g\mu_B\beta B}{2}\right)\right]$$

$$= -\frac{N}{\cancel{2}\cosh\frac{g\mu_B\beta B}{2}}\left[\cancel{2}\sinh\frac{g\mu_B\beta B}{2}\right]\frac{g\mu_B B}{2}$$

$$= -\frac{Ng\mu_B B}{2}\left[\tanh\frac{g\mu_B\beta B}{2}\right]$$

$$F = -k_B T \ln 2$$
$$= -N k_B T \ln\left[2\cosh\frac{g\mu_B \beta B}{2}\right]$$

c) Berechnen Sie die durchschnittliche Magnetisierung $\langle M\rangle$ und die magnetische Suszeptibilität χ_M des Systems. Diese sind durch

$$\langle M\rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln(Z)}{\partial B}, \quad \chi_M = \frac{\partial\langle M\rangle}{\partial B} \tag{3}$$

gegeben.

$$M = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial B}\left[N\ln\left[2\cosh\frac{g\mu_B\beta B}{2}\right]\right]$$
$$= \frac{N}{\cancel{\beta}}\;\frac{1}{\cancel{2}\cosh\frac{g\mu_B\beta B}{2}}\left[\cancel{2}\sinh\frac{g\mu_B\beta B}{2}\right]\frac{g\mu_B\cancel{\beta}}{2}$$
$$= \frac{Ng\mu_B}{2}\tanh\frac{g\mu_B\beta B}{2}$$
$$\chi_M = \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{Ng\mu_B}{2}\left[\operatorname{sech}^2\left(\frac{g\mu_B\beta B}{2}\right)\right]\frac{g\mu_B\beta}{2}$$
$$= \frac{Ng^2\mu_B^2\beta}{2}\left[\operatorname{sech}^2\left(\frac{g\mu_B\beta B}{2}\right)\right]$$

d) Betrachten Sie die Magnetisierung des Systems in den Grenzfällen: $\beta B \ll 1$ und $\beta B \gg 1$. *1 P.*

$$M = \frac{Ng\mu_B}{2}\tanh\frac{g\mu_B\beta B}{2}$$

$\beta B \ll 1$: $$M \simeq \frac{Ng\mu_B}{2}\;\frac{g\mu_B\beta B}{2}$$
$$= \frac{Ng^2\mu_B^2\beta B}{4}$$

$\beta B \gg 1$: $$M \simeq \frac{Ng\mu_B}{2}$$

Aufgabe 3 *Beispiel für die Anwendung der Dichtematrix* **5 P.**

Betrachtet wird ein Quantensystem mit dem Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \epsilon \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \tag{4}$$

a) Lösen Sie die Schrödingergleichung als Eigenwertproblem und zeigen Sie, dass die Eigenwerte $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$ und dazugehörigen Eigenzustände $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle\}$ wie folgt lauten: *1 P.*

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_1 = 3\epsilon, \qquad \lambda_2 = \epsilon, \qquad \lambda_3 = 3\epsilon$$

$$H \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 3\varepsilon \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ist EV mit EW 3ε

Dann diagonalisieren wir $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$

$$\begin{vmatrix} 2-E & 1 \\ 1 & 2-E \end{vmatrix} = (2-E)^2 - 1 = E^2 - 4E - 3$$
$$= (E-3)(E-1)$$

$$\ker \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Normierung: $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ ist EV zum EW 1

$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ ist orthogonal diagonalisierbar!

$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ ist EV zum EW 3

b) Zeigen Sie, dasss die Dichtematrix $\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$ dieses Quantensystems in der Energiebasis $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle\}$ und mit $k_B = 1$ und $\beta = \frac{2}{\epsilon}$ gegeben ist durch: *2 P.*

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\epsilon^4 + 2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon^4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{5}$$

Hinweis: Nutzen Sie die Schrödingergleichung für die Eigenzustände, um die Dichtematrix durch die Energiezustände auszudrücken.

In der Energiebasis ist $\hat{H} = \varepsilon \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$

$$e^{-\beta \hat{H}} = e^{-\frac{2}{\varepsilon} \hat{H}} = \exp \begin{pmatrix} -6 & & \\ & -2 & \\ & & -6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-6} & & \\ & e^{-2} & \\ & & e^{-6} \end{pmatrix}$$

$$Z = \mathrm{tr}\left(e^{-\beta \hat{H}}\right) = 2e^{-6} + e^{-2}$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} = \frac{1}{2 + e^4} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & e^4 & \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

Ist $\varepsilon = e$?

c) Benutzen Sie die Dichtematrix, um den Energieerwartungswert des Systems zu berechnen. *1 P.*

$$\langle E \rangle = \mathrm{tr}\left[\rho e^{-\beta H}\right]$$

$$= \mathrm{tr}\left[\frac{1}{2+e^4}\begin{pmatrix} e^{-6} & & \\ & e^2 & \\ & & e^{-6}\end{pmatrix}\right]$$

$$= \frac{1}{2+e^4}\left(2e^{-6}+e^2\right) = \frac{2e^{-6}+e^2}{2+e^4}$$

d) Berechnen Sie die Wahscheinlichkeit, mit der eine Messung den Wert 3ϵ für die Energie des Systems liefert. *1 P.*

3ϵ = Zustand $|\phi_1\rangle$ oder $|\phi_3\rangle$

$$P(E=1) = \frac{2}{2+e^4}$$