Universität Würzburg
Wintersemester 2024/25

Prof. Dr. Giorgio Sangiovanni
Linus Aliani, Alexander Baum,
Max Fischer, Jonathan Karl, Niklas Witt

7. Übung Statistische Mechanik und Thermodynamik

Bitte laden Sie Ihre Lösungen bis Donnerstag, den 05.12.2024 um 16:00 Uhr auf WueCampus hoch.
Die Blätter dürfen Sie dabei in Zweiergruppen abgeben.

Aufgabe 1 *Beispiele für Dichteoperatoren* **4 P.**

In einem 2- bzw. 3-dimensionalen Hilbertraum seien folgende Operatoren in Matrixdarstellung bzgl. einer beliebigen Orthonormal-Basis vorgegeben:

$$\hat{\rho}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \qquad \hat{\rho}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\tanh(\beta t) \\ -\frac{1}{2}\tanh(\beta t) & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad t, \beta \in \mathbb{R},$$

$$\hat{\rho}_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & i \\ 1 & \frac{1}{4} & 0 \\ -i & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}, \qquad \hat{\rho}_4 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Kann es sich um Dichteoperatoren handeln? Wenn ja, beschreiben diese einen reinen oder gemischten Zustand?

Aufgabe 2 *Dichteoperator eines reinen und gemischten Zustands* **7 P.**

Betrachten Sie einen allgemeinen Dichteoperator

$$\hat{\rho} = \sum_{n=1}^{N} p_n \, |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \,, \tag{1}$$

wobei die Zustände $|\psi_n\rangle$ eine Orthonormalbasis des N dimensionalen Hilbertraums bilden. Für einen gemischten Zustand gilt $0 \leq p_n < 1$, während für einen reinen Zustand $p_n = \delta_{in}$ für ein festes $i \in \{1, ..., N\}$ gilt.

a) Zeigen Sie, dass für einen gemischten Zustand $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$ gilt, indem Sie $\hat{\rho}^2$ explizit berechnen. Argumentieren Sie, dass die Bedingung, dass $\hat{\rho}$ rein ist, äquivalent dazu ist, dass $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ gilt. *2 P.*

b) Zeigen Sie, dass für einen beliebigen Dichteoperator $\mathrm{tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1$ gilt. Begründen Sie, dass $\hat{\rho}$ genau dann rein ist, wenn $\mathrm{tr}(\hat{\rho}^2) = 1$ erfüllt ist. *2 P.*

c) Berechnen Sie explizit *3 P.*

$$S(\hat{\rho}) = -\mathrm{tr}(\hat{\rho}\, \ln(\hat{\rho}))\,, \tag{2}$$

für einen allgemeinen Dichteoperator. Zeigen Sie, dass $\hat{\rho}$ genau dann rein ist, wenn $S(\hat{\rho}) = 0$ gilt.

Bitte wenden!

Aufgabe 3 *Dichteoperator eines Zwei-Niveau-Systems* **4 P.**

Betrachten Sie ein quantenmechanisches Zwei-Niveau-System (ZNS) mit Zuständen $|0\rangle$ und $|1\rangle$. Gegeben sei ein allgemeiner Dichteoperator des ZNS in Matrixdarstellung

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{10} \\ \rho_{01} & \rho_{00} \end{pmatrix} , \tag{3}$$

wobei $\rho_{ij} = \langle i| \hat{\rho} |j\rangle$.

a) Wie viele unabhängige reele Parameter sind zur Bestimmung eines beliebigen Dichteoperators für ein ZNS nötig? Begründen Sie Ihre Antwort mit den allgemeinen Eigenschaften von Dichteoperatoren. *1 P.*

b) Berechnen Sie den Vektor $\vec{S} = \left(\langle\hat{\sigma}_x\rangle, \langle\hat{\sigma}_y\rangle, \langle\hat{\sigma}_z\rangle\right)^T$, der sich aus den Erwartungswerten der drei Pauli-Matrizen $\hat{\sigma}_{x,y,z}$ für einen allgemeinen Dichteoperator ergibt. Drücken Sie die Dichtematrix in Gleichung (3) durch die Erwartungswerte S_x, S_y und S_z aus. *1 P.*

c) Drücken Sie $\vec{S}$ in Polarkoordinaten aus und bestimmen Sie die Beziehung zwischen $(r,\, \theta,\, \phi)$ und den Elementen ρ_{ij}. *1 P.*

d) Berechnen Sie die Reinheit $R = \mathrm{tr}\{\hat{\rho}^2\}$ von $\hat{\rho}$ und drücken Sie das Resultat als Funktion der Matrixelemente ρ_{ij} und mithilfe der Polarkoordinatendarstellung von $\vec{S}$ aus. *1 P.*