Institut für Theoretische Physik
TU Dresden

Prof. Dr. M. Vojta
PD Dr. M. Garst

Thermodynamik und Statistische Physik — Übung 6

Wintersemester 2018/19

Link: https://tu-dresden.de/mn/physik/itp/tfp/studium/lehre/ws18/tds

1. Eigenschaften der Spur (9 Punkte)

Die Spur eines Operators $\hat{A}$ ist mit Hilfe eines vollständigen Orthonormalsystems (VON) $\langle\phi_k|\phi_{k'}\rangle = \delta_{k,k'}$ definiert,

$$\mathrm{Sp}\{\hat{A}\} \equiv \sum_k \langle\phi_k|\hat{A}|\phi_k\rangle. \tag{1}$$

Beweisen Sie folgende Eigenschaften der Spur für Operatoren $\hat{A}, \hat{B}$ und $\hat{C}$ und für komplexe Zahlen α und β.

a) Die Spur eines Operators ist unabhängig von dem zur Berechnung benutzten VON.

b) Ist $\hat{U}$ ein unitärer Operator, so gilt $\mathrm{Sp}\{\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}\} = \mathrm{Sp}\{\hat{A}\}$.

c) $\mathrm{Sp}\{|\psi\rangle\langle\varphi|\} = \langle\varphi|\psi\rangle$

d) (i) $\mathrm{Sp}\{\hat{A}^\dagger\} = (\mathrm{Sp}\{\hat{A}\})^*$, (ii) $\mathrm{Sp}\{\alpha\,\hat{A}+\beta\,\hat{B}\} = \alpha\,\mathrm{Sp}\{\hat{A}\}+\beta\,\mathrm{Sp}\{\hat{B}\}$, (iii) $\mathrm{Sp}\,\{\hat{A}^\dagger\hat{A}\} \geq 0$

e) (i) $\mathrm{Sp}\{\hat{A}\hat{B}\} = \mathrm{Sp}\{\hat{B}\hat{A}\}$, (ii) $\mathrm{Sp}\{[\hat{A},\hat{B}]\} = 0$

f) $\mathrm{Sp}\{\hat{A}\hat{B}\hat{C}\} = \mathrm{Sp}\{\hat{B}\hat{C}\hat{A}\} = \mathrm{Sp}\{\hat{C}\hat{A}\hat{B}\}$

2. Kanonischer Dichteoperator (5 Punkte)

a) Wie lauten die allgemeinen Eigenschaften eines Dichteoperators?

b) Sei $\hat{H}$ ein Hamilton-Operator. Zeigen Sie, dass der Operator $\hat{\varrho} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{\mathrm{Sp}\{e^{-\beta\hat{H}}\}}$ ein Dichteoperator ist.

3. Dichteoperator eines Spin-1/2-Gemisches (7 Punkte)

Wir betrachten den Dichteoperator $\hat{\varrho}$ eines Spin-1/2-Gemisches. Dieser kann durch eine Linearkombination aus dem Eins-Operator und den Pauli-Matrizen $\hat{\sigma}_i$, mit $i = 1, 2, 3$,

$$\hat{\varrho} = \frac{1}{2}\left\{\mathbb{1} + n_x\,\hat{\sigma}_x + n_y\,\hat{\sigma}_y + n_z\,\hat{\sigma}_z\right\} \tag{2}$$

dargestellt werden.

a) Bestimmen Sie die Eigenschaften des Vektors $\vec{n}^T = (n_x, n_y, n_z)$, so dass $\hat{\varrho}$ die Eigenschaften eines Dichteoperators erfüllt.

b) Zeigen Sie, dass für die Erwartungswerte der drei Pauli-Matrizen in dem durch $\hat{\varrho}$ beschriebenen Zustand gilt: $\langle\hat{\sigma}_i\rangle = n_i$.

c) Die Polarisation eines Gemisches von Spin-1/2-Teilchen mit Dichtematrix $\hat{\varrho}$ wird durch

$$\Pi \equiv \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} \tag{3}$$

definiert, wobei $\lambda_{1/2}$ die Eigenwerte von $\hat{\varrho}$ sind. Bestimmen Sie den Zusammenhang zwischen der Polarisation Π und den Komponenten des Vektors $\vec{n}$.

4. Zeitentwicklung des Dichteoperators (8 Punkte)

Betrachten Sie ein freies Teilchen mit Masse m in einer Raumdimension mit dem Ortsoperator $\hat{x}$, dem Impulsoperator $\hat{p}$ und dem Hamilton-Operator $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$. Zur Zeit $t = 0$ sei das System durch den Dichteoperator

$$\hat{\rho}(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma V} \exp\{-\hat{x}^2/(2\sigma^2)\} \tag{4}$$

beschrieben mit $\sigma > 0$. V ist ein Faktor, der die Normierung des Dichteoperators garantiert. *Hinweis:* $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/(2\sigma^2)+ix/x_0} = \sqrt{2\pi}\sigma e^{-\sigma^2/(2x_0^2)}$.

a) Bestimmen Sie die Matrixelemente von $\hat{\rho}(0)$ sowohl in der Ortsbasis, $\rho_{xx'}(0) = \langle x|\hat{\rho}(0)|x'\rangle$, als auch in der Impulsbasis, $\rho_{pp'}(0) = \langle p|\hat{\rho}(0)|p'\rangle$.

b) Bestimmen Sie die Zeitentwicklung, $t \geq 0$, des Dichteoperators in der Impulsbasis $\rho_{pp'}(t)$, indem Sie die von-Neumann-Bewegungsgleichung explizit lösen.

c) Wie lautet der Dichteoperator $\rho_{xx'}(t)$ für $t > 0$ in der Ortsbasis? Wie verhält sich insbesondere $\rho_{xx}(t)$? *Hinweis*: Führen Sie Relativ- und Schwerpunktskoordinaten ein.