Moderne Theoretische Physik III (Theorie F – Statistische Mechanik) SS 17

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Janina Klier

Blatt 4
Besprechung: 19.05.2017

---

1. Teilchen mit f Freiheitsgraden: (8+12=20 Punkte)

Für ein ideales Gas aus N klassischen Teilchen (Molekülen) mit f Freiheitsgraden pro Molekül gilt:

$$U = \frac{f}{2} N k_B T, \quad pV = N k_B T. \tag{1}$$

(a) Betrachten Sie eine *adiabatische* Zustandsänderung bei konstanter Teilchenzahl, und zeigen Sie über den 1. Hauptsatz, dass gilt:

$$pV^{(f+2)/f} = \text{const.}, \quad VT^{f/2} = \text{const.}$$

Lösung:
1. Hauptsatz:

$$\mathrm{d}U = \delta Q - p\,\mathrm{d}V + \mu\,\mathrm{d}N.$$

Adiabatische Zustandsänderung: $\delta Q = 0$, konstante Teilchenzahl: $\mathrm{d}N = 0$, also:

$$\mathrm{d}U = -p\,\mathrm{d}V.$$

In einem thermisch isolierten Gas in einem geschlossenen Behälter kann sich die innere Energie nur durch mechanische Arbeit ändern. Bekannt ist außerdem:

$$U = \frac{f}{2} N k_B T \quad \to \quad \mathrm{d}U = \frac{f}{2} N k_B\,\mathrm{d}T, \tag{2}$$

$$pV = N k_B T \quad \to \quad p\,\mathrm{d}V + V\,\mathrm{d}p = N k_B\,\mathrm{d}T\,, \tag{3}$$

zusammen

$$\mathrm{d}U = \frac{f}{2}[p\,\mathrm{d}V + V\,\mathrm{d}p].$$

Mit dem 1. Hauptsatz von eben gilt:

$$\left(1 + \frac{f}{2}\right) p\,\mathrm{d}V = -\frac{f}{2} V\,\mathrm{d}p,$$

was jetzt integriert werden kann, von einem thermodynamischen Zustand 0 zu einem anderen 1 über einen reversiblen Weg,

$$\left(1 + \frac{f}{2}\right) \int_0^1 \frac{\mathrm{d}V}{V} = -\frac{f}{2} \int_0^1 \frac{\mathrm{d}p}{p}$$

Daraus folgt, mit $V_1 \equiv V$, $p_1 \equiv p$, denn der Zustand 1 ist beliebig,

$$\left(1 + \frac{f}{2}\right) \ln \frac{V}{V_0} = -\frac{f}{2} \ln \frac{p}{p_0} \quad \Rightarrow \quad \boxed{p\,V^{(1+2/f)} = \text{const.}}$$

Analog ergibt sich aus

$$\mathrm{d}U = -p\,\mathrm{d}V = \frac{f}{2}Nk_B\,\mathrm{d}T$$

und

$$pV = Nk_BT \quad \Rightarrow \quad p = \frac{Nk_BT}{V}$$

unmittelbar

$$\frac{Nk_B}{V}\mathrm{d}V = -\frac{f}{2}\frac{Nk_B}{T}\mathrm{d}T.$$

Also

$$\ln\frac{V}{V_0} = -\frac{f}{2}\ln\frac{T}{T_0} \quad \Rightarrow \quad \boxed{V\,T^{f/2} = \text{const.}}$$

(b) Ausgehend von Gl. (1), berechnen Sie die Entropie

$$S(U,V,N) = S_0\frac{N}{N_0} + Nk_B\left[\frac{f}{2}\ln\left(\frac{U}{U_0}\right) + \ln\left(\frac{V}{V_0}\right) - \frac{f+2}{2}\ln\left(\frac{N}{N_0}\right)\right]$$

wobei S_0, U_0, V_0, N_0 Integrationskonstanten sind. Diskutieren Sie den 3. Hauptsatz der Thermodynamik für ein ideales Gas.
Hinweis. Zeigen Sie zunächst: $T\mathrm{d}s = \mathrm{d}u + p\mathrm{d}v$ mit $s = S/N$, $u = U/N$, $v = V/N$.
Lösung:
Die "Fundamentalbeziehung" lautet:

$$TS = U + pV - \mu N \quad \Rightarrow \quad S = \frac{1}{T}U + \frac{p}{T}V - \frac{\mu}{T}N.$$

Mit $S = S(U,V,N)$ folgt

$$\mathrm{d}S = \frac{1}{T}\mathrm{d}U + \frac{p}{T}\mathrm{d}V - \frac{\mu}{T}\mathrm{d}N.$$

Es ist jetzt praktisch, Dichten einzuführen:

$$s = S/N\,, u = U/N\,, v = V/N \quad \Rightarrow \quad s = \frac{1}{T}u + \frac{p}{T}v - \frac{\mu}{T}\,.$$

Mit $S = S(U,V,N)$ hängt s nicht explizit von N ab, also:

$$\boxed{s = s(u,v), \quad \mathrm{d}s = \frac{1}{T}\mathrm{d}u + \frac{p}{T}\mathrm{d}v.}$$

Jetzt läßt $\mathrm{d}s$ sich integrieren, wenn man T und p rauswirft:

$$U = \frac{f}{2}Nk_BT \;\Rightarrow\; u = \frac{f}{2}k_BT \;\Rightarrow\; \frac{1}{T} = \frac{f}{2}\frac{k_B}{u}, \qquad pV = Nk_BT \;\Rightarrow\; \frac{p}{T} = \frac{k_B}{v},$$

$$\mathrm{d}s = \frac{f}{2}k_B\frac{\mathrm{d}u}{u} + k\frac{\mathrm{d}v}{v} \;\Rightarrow\; s - s_0 = \frac{f}{2}k_B\ln\frac{u}{u_0} + k_B\ln\frac{v}{v_0}.$$

Die Integrationskonstanten sind $s_0 = S_0/N_0\,, u_0 = U_0/N_0\,, v_0 = V_0/N_0\,$, einsetzen liefert

$$\begin{aligned} S &= S_0\frac{N}{N_0} + Nk_B\left[\frac{f}{2}\left(\ln\frac{U}{U_0} + \ln\frac{N_0}{N}\right) + \left(\ln\frac{V}{V_0} + \ln\frac{N_0}{N}\right)\right] \\ &= S_0\frac{N}{N_0} + Nk_B\left[\frac{f}{2}\ln\left(\frac{U}{U_0}\right) + \ln\left(\frac{V}{V_0}\right) - \left(\frac{f}{2}+1\right)\ln\left(\frac{N}{N_0}\right)\right]. \end{aligned}$$

3. Hauptsatz der Thermodynamik. Nehmen wir nun an, dass das Gas aus $N = N_0$ Teilchen besteht und im konstanten Volumen $V = V_0$ eingeschlossen ist, dann hängt U von der Temperatur über $U = \frac{f}{2} N_0 k_B T$ ab, also, mit $U_0 \equiv \frac{f}{2} N_0 k_B T_0$, $T_0 = \text{const.}$,

$$S(T) = S_0 + \frac{f}{2} N_0 k_B \, \ln \frac{T}{T_0}.$$

Für $T \to 0$ divergiert dies, es läßt sich kein S_0 finden, so dass $S(T \to 0) = 0$ wäre. Das "ideale Gas" ist eine brauchbare Näherung für ideale Gase nur bei hohen Temperaturen. Bei $T \to 0$ muss die Quantennatur der Teilchen (Fermionen oder Bosonen) berücksichtigt werden, die zu einem nichtentarteten Grundzustand des Gases führt. Dann folgt: $S(T \to 0) = 0$.

2. **Gas in Bewegung:** (6+6+8+10=30 Punkte)

   Betrachten Sie ein System von N klassischen nicht-wechselwirkenden Teilchen im D-dimensionalen Raum. Die Teilchen haben keine internen Freiheitsgrade. Nehmen Sie an, dass der Gesamtimpuls $\vec{P} = \sum_i \vec{p}_i$ erhalten bleibt.

   (a) Betrachten Sie eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\vec{x}, t)$, wobei $\vec{x} = (\vec{q}, \vec{p})$ für einen vollen Satz von Koordinaten und Impulsen im Phasenraum steht. Zeigen Sie, dass jede Funktion im Phasenraum, die die Form

$$\rho(\vec{x}) = \rho(H(\vec{x}), \vec{P}(\vec{x}))$$

hat, eine stationäre Lösung der Liouville-Gleichung mit der Hamilton-Funktion $H(\vec{x})$ ist.

Lösung:

Die klassische Liouville Gleichung lautet

$$i \frac{\partial \rho}{\partial t} = -i \big\{ H \, , \, \rho \big\}. \tag{4}$$

Die Poissonklammer ist im D-dimensionalen Raum folgendermaßen definiert:

$$\big\{ f \, , \, g \big\} = \sum_{j=1}^{ND} \left(\frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q_j} - \frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} \right). \tag{5}$$

Impulserhaltung:

$$\{P_\alpha, H\} = 0, \qquad \alpha = 1 \dots D.$$

Für

$$f(\vec{x}) = f(J_0(\vec{x}), J_2(\vec{x}), \dots J_m(\vec{x})) \tag{6}$$

gilt:

$$\begin{aligned}\{f(\vec{x}), g(\vec{x})\} &= \sum_{i=1}^{ND} \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right) \\ &= \sum_{i=1}^{ND} \sum_{\alpha=0}^{m} \left(\frac{\partial f}{\partial J_\alpha} \frac{\partial J_\alpha}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial J_\alpha} \frac{\partial J_\alpha}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right) = \sum_{\alpha=0}^{m} \frac{\partial f}{\partial J_\alpha} \{J_\alpha, g\}. \end{aligned} \tag{7}$$

Es folgt mit $J_0(\vec{x}) = H(\vec{x})$, $J_1(\vec{x}) = P_1(\vec{x})$, $\dots$, $J_D(\vec{x}) = P_D(\vec{x})$:

$$\{\rho(\vec{x}), H(\vec{x})\} = \frac{\partial \rho}{\partial H} \{H, H\} + \sum_{\alpha=1}^{D} \frac{\partial \rho}{\partial P_\alpha} \{P_\alpha, H\} = 0. \tag{8}$$

(b) Wir verallgemeinern nun das fundamentale Postulat der klassischen Statistischen Mechanik indem wir postulieren, dass die Gleichgewichtsverteilung eine uniforme Verteilung über die Hyperfläche im Phasenraum ist, die durch konstante Energie E und konstanten Impuls $\vec{P}$ beschrieben wird. Finden Sie einen expliziten Ausdruck für die *normierte* Gleichgewichtsverteilung $\rho(\vec{x})$ des Systems für $D = 1$.

Hinweis. Ein System mit endlichem Volumen bei gleichzeitig erhaltener Translationsinvarianz kann durch Teilchen auf einem Kreis mit Umfang L modelliert werden. Für den Normierungsfaktor ist es ausreichend nur die Gesamtenergie- und Gesamtimpulsabhängigkeit zu bestimmen. *Für die explizite Berechnung des Normierungsintegrals erhalten Sie 5 Bonuspunkte.*

Bemerkung: Die Normierung der Verteilung $\rho(\vec{x})$ ist durch

$$\int d\vec{x} \rho(\vec{x}) = 1$$

gegeben, wobei $d\vec{x} = C_N d^{ND}p d^{ND}q$ und C_N so gewählt wird, dass $d\vec{x}$ dimensionlos ist. Quantenmechanik:

$$C_N = \frac{1}{N!} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{DN}},$$

wobei der Faktor $1/N!$ die Ununterscheidbarkeit der Partikel widerspiegelt.

Lösung:

Konstante Energie E:

$$\sum_i \frac{p_i^2}{2m} = E.$$

Konstanter Impuls $\vec{P}$:

$$\sum_i p_i = P.$$

Mikrokanonische Gleichgewichtsverteilung (eine uniforme Verteilung über die Hyperfläche im Phasenraum):

$$\rho(\vec{x}) = A(E, P, N)\ \delta\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} - E\right) \delta\left(\sum_{i=1}^{N} p_i - P\right). \tag{9}$$

Mit $d^{ND}pd^{ND}q = \prod_{i=1}^{N} dp_i dq_i$ bestimmen wir die Normierungsfaktor $A(E, P, N)$ wie folgt:

$$\begin{aligned} 1 &= AC_N \int \prod_{i=1}^{N} dp_i dq_i\ \delta\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} - E\right)\ \delta\left(\sum_{i=1}^{N} p_i - P\right) \\ &= AC_N L^N \int \prod_{i=1}^{N} d\tilde{p}_i\ \delta\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\tilde{p}_i^2}{2m} - \tilde{E}\right)\ \delta\left(\sum_{i=1}^{N} \tilde{p}_i\right) \\ &= AC_N L^N\, (2m)^{N/2}\, \tilde{E}^{N/2-1} \int \prod_{i=1}^{N} dz_i\ \delta\left(\sum_{i=1}^{N} z_i^2 - 1\right)\ \delta\left(\sum_{i=1}^{N} z_i\right), \end{aligned} \tag{10}$$

wobei

$$\tilde{p}_i = p_i - \frac{P}{N}, \quad \tilde{E} = E - \frac{P^2}{2mN} > 0, \quad z_i = \frac{\tilde{p}_i}{\sqrt{2m\tilde{E}}}. \tag{11}$$

Damit erhalten wir den Normierungsfaktor in der Form:

$$A(E,P,N) = \frac{1}{(2m)^{N/2}\,(E - P^2/2mN)^{N/2-1}\,L^N\,C_N\,I_N}, \tag{12}$$

wobei

$$I_N = \int \prod_{i=1}^{N} dz_i\;\delta\!\left(\sum_i z_i^2 - 1\right)\,\delta\!\left(\sum_i z_i\right) \tag{13}$$

nur von N abhängt.

Die Berechnung dieses Integrals war nicht explizit gefordert. Lösung:
Die erste Delta-Funktion in Gl. (13) definiert eine Hypersphäre mit dem Einheitsradius im N-dimensionalen Raum: $\sum_i z_i^2 = 1$. Die Delta-Funktion von $\sum_i z_i$ in Gl. (13) definiert eine Hyperebene im N-dimensionalen Raum, die den Koordinatenursprung durchläuft und orthogonal zu den Einheitsvektor

$$\vec{e}_\perp = \frac{1}{\sqrt{N}}\,(1,\,\ldots,\,1)^T$$

ist:

$$\vec{z}\cdot\vec{e}_\perp = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N} z_i = 0,$$

wobei

$$\vec{z} = (z_1, z_2,\,\ldots,\,z_N)^T\,.$$

Das Produkt von zwei Delta-Funktionen in Gl. (13) definiert den Querschnitt, der wiederum eine Hypersphäre eines Einheitsradius ist, aber jetzt im $(N-1)$-dimensionalen Raum. Zum Beispiel ist der Querschnitt einer Einheitskugel im dreidimensionalen Fall mit einer Ebene, die durch den Ursprung geht, ein Kreis mit dem Einheitsradius.

Durch die lineare Variablensubstitution $\{z_1,\ldots,z_N\} \to \{\tilde{z}_1,\ldots,\tilde{z}_{N-1}, z_\perp = \vec{z}\cdot\vec{e}_\perp\}$ mit Koordinaten $\{\tilde{z}_1,\ldots,\tilde{z}_{N-1}\}$ in der Hyperebene ergibt das Integral über $\tilde{z}_i$ die Oberfläche σ_{N-1} einer Einheitskugel im $(N-1)$-dimensionalen Raum, die man entweder selbst ausrechnen oder nachschlagen kann:

$$\begin{aligned} I_N &= \int dz_\perp \underbrace{\prod_{i=1}^{N-1} d\tilde{z}_i}_{dV_{N-1}}\;\delta\!\left(\sum_{i=1}^{N-1}\tilde{z}_i^2 + z_\perp^2 - 1\right)\,\delta\!\left(\sqrt{N}z_\perp\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}}\underbrace{\int dV_{N-1}}_{\sigma_{N-1}\int_0^\infty d\tilde{r}\,\tilde{r}^{N-2}}\;\delta\!\left(\tilde{r}^{\,2}-1\right) = \frac{\sigma_{N-1}}{\sqrt{N}}\int_0^\infty d\tilde{r}\,\tilde{r}^{N-2}\frac{\delta(\tilde{r}-1)}{\tilde{r}+1} = \frac{\sigma_{N-1}}{2\sqrt{N}}, \end{aligned} \tag{14}$$

wobei

$$\sigma_N = \frac{2\,\pi^{N/2}}{\Gamma(N/2)}$$

und $\Gamma(x)$ die Eulersche Gamma-Funktion ist.

(c) Bestimmen Sie nun die 1-Teilchen-Verteilungsfunktion

$$\rho_1(q_1, p_1) = \int \prod_{i=2}^{N} dp_i dq_i \, \rho(\vec{x}) \tag{15}$$

und dadurch die 1-Teilchen-Geschwindigkeitsverteilung $f(v)$. Drücken Sie das Ergebnis für $f(v)$ durch die Energie pro Teilchen $\bar{\epsilon} = E/N$ aus.

Lösung:

Das Integral ist durch

$$\begin{aligned}
\rho_1\left(q_1, p_1\right) &= A \int \prod_{n=2}^{N} dp_i dq_i \; \delta\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} - E\right) \delta\left(\sum_i p_i - P\right) \\
&= AL^{N-1} \int \prod_{i=2}^{N} d\tilde{p}_i \; \delta\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\tilde{p}_i^2}{2m} - \tilde{E}\right) \delta\left(\sum_i \tilde{p}_i\right) \\
&= AL^{N-1} \int \prod_{i=2}^{N} d\tilde{p}_i \; \delta\left(\sum_{i=2}^{N} \frac{\tilde{p}_i^2}{2m} - \left(\tilde{E} - \frac{\tilde{p}_1^2}{2m}\right)\right) \delta\left(\sum_{i=2}^{N} \tilde{p}_i + \tilde{p}_1\right)
\end{aligned} \tag{16}$$

gegeben, wobei $\tilde{p}$ und $\tilde{E}$ durch Gl. (11) gegeben sind. Durch die Variablensubstitution

$$\tilde{\tilde{p}}_i = \tilde{p}_i + \frac{\tilde{p}_1}{N-1}, \quad \tilde{\tilde{E}} = \tilde{E} - \frac{\tilde{p}_1^2}{2m} + \frac{\tilde{p}_1^2}{2m(N-1)} \tag{17}$$

erhalten wir folgendes Integral

$$\rho_1\left(q_1, p_1\right) = AL^{N-1} \int \prod_{n=2}^{N} d\tilde{\tilde{p}}_i \, \delta\left(\sum_{i=2}^{N} \frac{\tilde{\tilde{p}}_i^2}{2m} - \tilde{\tilde{E}}\right) \delta\left(\sum_{i+2}^{N} \tilde{\tilde{p}}_i\right). \tag{18}$$

Wir sehen damit, dass wir ein Integral der Form (10) erhalten. Im Vergleich zu (10) werden $\tilde{E}$ zu $\tilde{\tilde{E}}$ und N zu $N-1$ ersetzt. Das Resultat ist daher

$$\rho_1\left(q_1, p_1\right) = AI_{N-1} L^{N-1} (2m)^{\frac{N-1}{2}} \tilde{\tilde{E}}^{\frac{N-1}{2}-1}, \tag{19}$$

wobei die explizite Abhängigkeit von $\tilde{\tilde{E}}$ vom Impuls p_1 durch

$$\tilde{\tilde{E}} = E - \frac{P^2}{2mN} - \frac{\left(p_1 - P/N\right)^2}{2m} \frac{N-2}{N-1} \tag{20}$$

gegeben ist. Die normierte 1-Teilchen-Geschwindigkeitsverteilung ($p_1 = mv$) lautet daher

$$\begin{aligned}
f(v) &= AC_{N-1} I_{N-1} L^{N-1} m (2m)^{\frac{N-1}{2}} \left[N\left(\bar{\epsilon} - \frac{\bar{p}^2}{2m}\right) - \frac{\left(mv - \bar{p}\right)^2}{2m} \frac{N-2}{N-1}\right]^{\frac{N-3}{2}} \\
&= B \left[1 - \frac{\left(mv - \bar{p}\right)^2}{2mN\left(\bar{\epsilon} - \frac{\bar{p}^2}{2m}\right)} \frac{N-2}{N-1}\right]^{\frac{N-3}{2}},
\end{aligned} \tag{21}$$

wobei $\bar{\epsilon} = E/N$, $\bar{p} = P/N$ und die Normierungskonstante B die Geschwindigkeitsunabhängigen Faktoren zusammenfasst.

(d) Finden Sie im Limes $N \gg 1$ die wahrscheinlichste Geschwindigkeit v^*, die durch

$$\left.\frac{\partial f}{\partial v}\right|_{v=v^*} = 0$$

definiert ist, die mittlere Geschwindigkeit $\langle v \rangle$ und die Kumulante $\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2$.

Lösung:

Durch

$$\left(1 - \frac{x}{N}\right)^N \to e^{-x}, \quad N \gg 1$$

kann die 1-Teilchen-Geschwindigkeitsverteilung im Limes $N \gg 1$ als

$$f(v) \overset{N\gg 1}{\approx} B \, \exp\left[-\frac{(mv - \bar{p})^2}{4m\left(\bar{\epsilon} - \frac{\bar{p}^2}{2m}\right)}\right] \tag{22}$$

geschrieben werden. Mit

$$\bar{\epsilon} - \frac{\bar{p}^2}{2m} = \frac{k_B T}{2}$$

entspricht Gl. (22) der Maxwellschen Geschwindigkeitsverteilung um $\bar{p}/m$:

$$f(v) = B \, \exp\left(-\frac{m\tilde{v}^2}{2k_B T}\right), \tag{23}$$

wobei $\tilde{v} = v - \bar{p}/m$.

Unter Normierung der 1-Teilchen-Geschwindigkeitsverteilung, $\int dv f(v) = 1$, ergibt sich

$$f(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{m\tilde{v}^2}{2k_B T}\right) \tag{24}$$

Die wahrscheinlichste Geschwindigkeit ergibt sich aus

$$\left.\frac{\partial f}{\partial v}\right|_{v=v^*} = -\sqrt{\frac{m^3}{2\pi (k_B T)^3}} \left(v^* - \frac{\bar{p}}{m}\right) e^{-\frac{m(v^* - \bar{p}/m)^2}{2k_B T}} = 0 \tag{25}$$

Dies ist erfüllt für

$$v^* = \frac{\bar{p}}{m}.$$

Die mittlere Geschwindigkeit ist durch

$$\langle v \rangle = \int dv v f(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \int dv v e^{-\frac{m(v-\bar{p}/m)^2}{2k_B T}} = \frac{\bar{p}}{m} = v^* \tag{26}$$

gegeben. Weiterhin gilt

$$\langle v^2 \rangle = \int dv v^2 f(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \int dv v^2 e^{-\frac{m(v-\bar{p}/m)^2}{2k_B T}} = \frac{k_B T}{m} + \frac{\bar{p}^2}{m^2}. \tag{27}$$

Die Kumulante ist

$$\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 = \frac{k_B T}{m}. \tag{28}$$

3. Dichtematrix für den Spin-1/2: (6+14=20 Punkte)

Für einen Spin-1/2 kann man die Dichtematrix durch den Polarisationsvector $\mathbf{P}$ ausdrücken:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(1 + \hat{\mathbf{P}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right). \tag{29}$$

(a) Zeigen Sie, dass wenn $|\mathbf{P}| = 1$, dann ist der Spin in einem reinen Zustand, der mit der folgenden Wellenfunktion dargestellt werden kann:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ e^{i\phi}\sin\theta/2 \end{pmatrix}. \tag{30}$$

Die zwei Winkel legen die Richtung von $\mathbf{P}$ fest:

$$\mathbf{P} = |\mathbf{P}|(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta).$$

Lösung:

Wenn das System nur aus einem reinen Zustand besteht, dann gilt für die Dichtematrix

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}.$$

Für einen Spin-1/2

$$\hat{\rho}^2 = \frac{1}{4}\left(1 + \hat{\mathbf{P}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)\left(1 + \hat{\mathbf{P}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) = \frac{1}{4}\left(1 + |\mathbf{P}|^2 + 2\hat{\mathbf{P}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) = \hat{\rho} + \frac{1}{4}\left(|\mathbf{P}|^2 - 1\right).$$

Es folgt dass wenn der Spin in einem reinen Zustand ist, dann $|\mathbf{P}| = 1$.

Weiterhin, kann man die Dichtematrix eines reinen Zustandes durch die Wellenfunktion des gleichen Zustandes ausdrücken:

$$\rho_{\sigma\sigma'} = \Psi_\sigma \Psi^*_{\sigma'}.$$

Es erfolgt

$$\begin{aligned}
\Psi\Psi^* &= \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ e^{i\phi}\sin\theta/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\theta/2 & e^{-i\phi}\sin\theta/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} & \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\cos\theta & \sin\theta(\cos\phi - i\sin\phi) \\ \sin\theta(\cos\phi + i\sin\phi) & 1-\cos\theta \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\left[1 + \cos\theta\ \hat{\sigma}_z + \sin\theta\cos\phi\ \hat{\sigma}_x + \sin\theta\sin\phi\ \hat{\sigma}_y\right] = \frac{1}{2}\left(1 + \hat{\mathbf{P}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right),
\end{aligned}$$

wobei

$$\mathbf{P} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta); \quad |\mathbf{P}| = 1.$$

(b) Betrachten Sie nun ein System, das aus zwei Spin-1/2-Teilchen besteht. Berechnen Sie für alle vier Quantenzustände des Gesamtsystems $|S, S^z\rangle$, wobei $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$, die reduzierte Dichtematrix des Teilchens 1:

$$\hat{\rho}_1 = \mathrm{Tr}_2\hat{\rho} = \sum_{s_2^z}\langle s_2^z|\hat{\rho}|s_2^z\rangle. \tag{31}$$

Die Dichtematrix $\hat{\rho}$ des Gesamtsystems ist durch

$$\hat{\rho} = |S, S^z\rangle\langle S, S^z|$$

gegeben. In welchen der vier Zustände befindet sich das Teilchen 1 in einem reinen Zustand? Berechnen Sie $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_1 \ln \hat{\rho}_1]$ für alle vier Zustände.

Lösung:

Laut Definition

$$(\rho_1)_{\sigma\sigma'} = \mathrm{Tr}_2 \hat{\rho} = \sum_{\sigma_2} \Psi_{S,S^z}(\sigma, \sigma_2) \Psi^*_{S,S^z}(\sigma', \sigma_2).$$

Hier $\Psi_{S,S^z}(\sigma, \sigma_2)$ ist die Wellenfunktion des Systems im Zustand $|S, S^z\rangle$, die in dem Basis ausdrücken wird, das aus Eigenvectoren von s_1^z und s_2^z besteht. Diese Wellenfunktionen sind

$$\Psi_{11} = |1, 1\rangle = |{\uparrow_1}\rangle\, |{\uparrow_2}\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2;$$

$$\Psi_{1,-1} = |1, -1\rangle = |{\downarrow_1}\rangle\, |{\downarrow_2}\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2;$$

$$\Psi_{1,0} = |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|{\uparrow_1}\rangle\, |{\downarrow_2}\rangle + |{\downarrow_1}\rangle\, |{\uparrow_2}\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right].$$

$$\Psi_{0,0} = |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|{\uparrow_1}\rangle\, |{\downarrow_2}\rangle - |{\downarrow_1}\rangle\, |{\uparrow_2}\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right].$$

Nach der einfachen Matrizenmultiplikation bekommen wir

$$\hat{\rho}_1(S = 1, S^z = 1) = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(1 + \hat{\sigma}_z\right), \tag{32}$$

$$\hat{\rho}_1(S = 1, S^z = -1) = \begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(1 - \hat{\sigma}_z\right), \tag{33}$$

$$\hat{\rho}_1(S = 0, S^z = 0) = \hat{\rho}_1(S = 1, S^z = 0) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}. \tag{34}$$

In den ersten zwei Zustände ($S = 1$, $S^z = \pm 1$) befindet sich das Teilchen 1 in einem reinen Zustand, weil es aus Gl. (32) und Gl. (33) folgt, dass $\mathbf{P} = (0, 0, \pm 1)$.

Im Gegenteil, werden die Zustände mit $S^z = 0$ sich durch $\mathbf{P} = 0$ ausgezeichnet.

Benutzen wir die Gleichungen (32), (33), und (34). Der Matrixlogarithmus ist als inverse des Matrixpotentials definiert, d.h. die Matrix $L = \ln \rho$ können wir schreiben als $\rho = \exp L$. Die obigen Matrizen sind alle diagonal, deshalb können wir ausnutzen, dass $e^{\mathrm{diag}(x_1,\ldots,x_N)} = \mathrm{diag}\left(e^{x_1}, \ldots, e^{x_N}\right)$. Es erfolgt:

$$S = 0, 1,\ S^z = 0: \qquad \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_1 \ln \hat{\rho}_1] = -\ln 2, \tag{35}$$

$$S = 1,\ S^z = \pm 1: \qquad \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_1 \ln \hat{\rho}_1] = 0. \tag{36}$$

Bemerkung: Die Spur $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_1 \ln \hat{\rho}_1]$ ergibt die von-Neumann-Entropie des Spins 1:

$$\mathrm{S}_1 = -k_B \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_1 \ln \hat{\rho}_1] = -k_B \langle \ln \rho_1 \rangle_1.$$