Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Übungen zur Theoretischen Physik F SS 11

Prof. Dr. A. Shnirman
Dr. B. Narozhny

Lösungsvorschlag zu Blatt 3
06.05.2011

---

1. Gaußverteilung für mehrere Variablen:

Wir betrachten die charakteristische Funktion

$$\phi(\lambda_1, \ldots, \lambda_M) = \langle e^{i\sum_{j=1}^M \lambda_j \xi_j} \rangle$$

Es ergibt sich

$$\phi(\lambda_1, \ldots, \lambda_M) = \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)^{M/2}} \int_{-\infty}^{\infty} d^M\xi \; e^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^M \xi_i A_{ij} \xi_j + i\sum_{j=1}^M \lambda_j \xi_j}$$

Zur Berechnung des Integrals wird der Exponent mittels quadratischer Ergänzung (mehrdimensional !) umgeschrieben:

$$-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^M \xi_i A_{ij} \xi_j + i\sum_{j=1}^M \lambda_j \xi_j + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^M \lambda_i G_{ij} \lambda_j - \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^M \lambda_i G_{ij} \lambda_j$$

mit $G_{ij} = [A^{-1}]_{ij}$.

Es gilt

$$A_{ij} = A_{ji} \quad \Rightarrow \quad G_{ij} = G_{ji}, \quad \sum_{j=1}^M A_{ij} G_{jk} = \delta_{ik}, \quad \sum_{j=1}^M G_{ij} A_{jk} = \delta_{ik}.$$

Die ersten drei Summanden können zusammengefasst werden zu

$$-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^M \left(\xi_i - i\sum_k \lambda_k G_{ki}\right) A_{ij} \left(\xi_j - i\sum_k G_{jk}\lambda_k\right) = -\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^M y_i A_{ij} y_j$$

mit $y_j = \xi_j - i\sum_k G_{jk}\lambda_k = \xi_j - i\sum_k \lambda_k G_{kj}$.

Wir erhalten somit schließlich

$$\phi(\lambda_1, \ldots, \lambda_M) = \underbrace{\frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)^{M/2}} \int_{-\infty}^{\infty} d^M y \; e^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^M y_i A_{ij} y_j}}_{=1 \quad \text{(Normierung)}} e^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^M \lambda_i G_{ij} \lambda_j}$$

$$\phi(\lambda_1, \ldots, \lambda_M) = e^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^M \lambda_i G_{ij} \lambda_j}$$

Daraus ergibt sich

(a)

$$\langle \xi_i \rangle = \frac{1}{i}\frac{d}{d\lambda_i}\phi(\lambda_1,\dots,\lambda_M)\Big|_{\lambda_1=\dots=\lambda_M=0} = -\frac{1}{i}\sum_{j=1}^{M} G_{ij}\lambda_j\Bigg|_{\lambda_j=0} = 0$$

(b)

$$\langle \xi_i^2 \rangle - \langle \xi_i \rangle^2 = -\frac{d^2}{d\lambda_i^2}\phi(\lambda_1,\dots,\lambda_M)\Big|_{\lambda_1=\dots=\lambda_M=0} = G_{ii}$$

(c)

$$\langle \xi_i \xi_j \rangle = -\frac{d^2}{d\lambda_i d\lambda_j}\phi(\lambda_1,\dots,\lambda_M)\Big|_{\lambda_1=\dots=\lambda_M=0} = G_{ij}$$

(d)

$$\langle e^{i\beta\sum_{k=1}^M \xi_k} \rangle = \phi(\beta,\beta\ \dots,\beta) = e^{-\frac{\beta^2}{2}\sum_{i,j=1}^M \langle \xi_i\xi_j\rangle}.$$

Hier setzen wir $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_M = \beta$ und substituieren $\langle \xi_i\xi_j\rangle$ für G_{ij}.

(e) Wir definieren $t_i = i\Delta t$, $\Delta t = \frac{\tau}{M}$, $i = 1,\dots,M$ (wir können t_i auch um $\frac{\Delta t}{2}$ verschieben, das gibt dasselbe). Genau betrachtet erhalten wir damit das Intervall $[\Delta t, \tau]$ und nicht $[0,\tau]$, aber für große M verschwindet diese Diskrepanz. Integale diskretisieren wir folgendermaßen

$$\int_0^\tau dt f(t) \quad \to \quad \sum_i \Delta t \cdot f(t_i)\ .$$

Damit wird

$$\rho\left(\{\xi(t)\}\right) \sim e^{-\frac{1}{2}\sum_{ij=1}^M \xi(t_i)(\Delta t)^2 g^{-1}(t_i-t_j)\xi(t_j)}$$

Um die Verbindung zur diskreten Verteilungsfunktion aus Aufgabe 1 herzustellen, setzen wir

$$\xi_i = \xi(t_i), \quad A_{ij} = (\Delta t)^2 g^{-1}(t_i - t_j).$$

(f) Wir führen die Bezeichnungsweisen $\langle A\rangle_c$ für die Mittelung mit der kontinuierliche Verteilungsfunktion, und $\langle A\rangle_d$ für die Mittelung mit der diskreten Verteilungsfunktion ein. Wir diskretisieren $\langle \exp\left[i\int_0^\tau dt\xi(t)\right]\rangle_c$, und erhalten $\langle \exp\left[i\Delta t\sum_{k=1}^M \xi_k\right]\rangle_d$. Aus Aufgabe 1 wissen wir jedoch, dass

$$\left\langle \exp\left[i\Delta t\sum_{k=1}^M \xi_k\right]\right\rangle_d = \exp\left[-\frac{(\Delta t)^2}{2}\sum_{ij=1}^M \langle \xi_i\xi_j\rangle_d\right].$$

Damit ergibt sich, nachdem wir auf der rechten Seite die Doppelsumme im Exponenten wieder durch ein Doppelintegral ersetzen, die gesuchte Beziehung:

$$\left\langle \exp\left[i\int_0^\tau dt\xi(t)\right]\right\rangle_c = \exp\left[-\frac{1}{2}\int_0^\tau dt\int_0^\tau dt'\langle \xi(t)\xi(t')\rangle_c\right].$$

(g) Wir finden t_i am nächsten zu t und t_j am nächsten zu t'.
Da $\langle \xi_i \xi_j \rangle_d = G_{ij} = [A^{-1}]_{ij}$, benötigen wir A^{-1}.
Ein kurzer Ausflug in die Theorie der (linearen) Integralgleichungen:
Die Gleichung $x = Ky$ sei wie folgt zu verstehen:

$$x(r) = \int K(r, r') y(r') dr' \ , \tag{1}$$

wobei $K(r, r')$ der Integralkern ist. Die Lösung dieser Gleichung ist dann

$$y(r) = \int \bar{K}(r, r') x(r') dr' \ . \tag{2}$$

Mit $\bar{K} \equiv K^{-1}$ erhalten wir $y = K^{-1}x$. Also K^{-1} ist einfach das Inverse des Integralkerns.

Nun betrachten wir als definierende Gleichung für $g(t - t')$ folgenden Ausdruck (Beachte, dass $g^{-1}(t - t')$ nicht die Umkehrfunktion ist, wie man sie in Analysis I oder HM I kennenlernt...):

$$\int_0^\tau dt'' \ g^{-1}(t - t'') g(t'' - t') = \delta(t - t').$$

Diskretisiert lautet diese Gleichung

$$\Delta t \sum_{j=1}^{M} g^{-1}(t_i - t_j) g(t_j - t_k) = \underbrace{\frac{\delta_{ik}}{\Delta t}}_{\text{(diskretisierte Deltafunktion)}}$$

Warum? Die diskretisierte Form der Deltafunktion, $\delta_D(t_i - t_j)$, erhält man aus der Normierung für die Deltafunktion:

$$\int_0^\tau dt \ \delta(t - t') = 1 \quad \Rightarrow \quad \Delta t \sum_{j=1}^{M} \underbrace{\delta_D(t_i - t_j)}_{\delta_{ij}/\Delta t} = 1.$$

Also folgt $\sum_{j=1}^{M} [g^{-1}]_{ij} \, g_{jk} = \delta_{ik}/(\Delta t)^2$. Da aber andrerseits $(\Delta t)^2 \, [g^{-1}]_{ij} = A_{ij} \Rightarrow \sum_{j=1}^{M} A_{ij} g_{jk} = \delta_{ik}$ ist, folgt $[A^{-1}]_{ij} = g_{ij} = g(t_i - t_j)$.

Damit erhalten wir die gesuchte Beziehung:

$$\underbrace{\langle \xi(t) \xi(t') \rangle_c}_{\text{``Korrelationsfunktion''}} = \underbrace{g(t - t')}_{\text{(Maß für Korrelationen)}} .$$

Näherung gut, wenn Δt klein gegenüber der Reichwerte der Korrelationen ist, d.h. $g(\Delta t) \approx g(0)$.

2. Stationäre Lösung der Liouville-Gleichung:

Die klassische Liouville Gleichung (vergleiche QM: von Neumann Gleichung) lautet

$$i\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i\{H\,,\,\rho\}. \tag{3}$$

Hierbei bezeichnet $\{\cdot,\cdot\}$ die klassiche Poisson-Gleichung und nicht etwa den Antikommutator. Die Poissonklammer ist folgendermaßen definiert:

$$\{A\,,\,B\} = \sum_{j=1}^{3N}\left(\frac{\partial A}{\partial p_j}\frac{\partial B}{\partial q_j} - \frac{\partial A}{\partial q_j}\frac{\partial B}{\partial p_j}\right) \tag{4}$$

Es bleibt also zu zeigen, dass $\{H(\boldsymbol{x}), \rho(H(\boldsymbol{x}))\} = 0$ ist ($\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$).

$$\{H(\boldsymbol{x}), \rho(H(\boldsymbol{x}))\} = \sum_{j=1}^{3N}\left(\frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial \rho}{\partial H}\frac{\partial H}{\partial q_j} - \frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial \rho}{\partial H}\frac{\partial H}{\partial p_j}\right) = 0\ , \tag{5}$$

da alle (klassischen) Größen miteinander vertauschen.

3. Dichtematrix für den Spin-1/2:

(a) 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

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

Die allgemeine Wellenfunktion des Spins-1/2 ist

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

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) 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

$$\Psi_{11} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2; \quad \Psi_{1,-1} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2;$$

$$\Psi_{1(0),0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 \pm \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right].$$

Nach der einfachen Matrizenmultiplikation bekommen wir

$$\hat{\rho}_1(S=1, S^z=1) = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1+\hat{\sigma}_z), \tag{6}$$

$$\hat{\rho}_1(S=1, S^z=-1) = \begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1-\hat{\sigma}_z), \tag{7}$$

$$\hat{\rho}_1(S=1(0), S^z=0) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}. \tag{8}$$

In den ersten zwei Zustände ($S = 1$, $S^z = \pm 1$) befindet sich das Teilchen 1 in einem reinen Zustand, weil es aus Gl. (6) und Gl. (7) folgt, dass $\mathbf{P} = (0, 0, \pm 1)$.
Im Gegenteil, werden die Zustände mit $S^z = 0$ sich durch $\mathbf{P} = 0$ ausgezeichnet.

(c) Benutzen wir die Gleichungen (6), (7), und (8).
Es erfolgt für die Entropie

$$S[\hat{\rho}_1(S=1(0), S^z=0)] = \ln 2, \quad S[\hat{\rho}_1(S=1, S^z=\pm 1)] = 0.$$