Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie
der Kondensierten Materie

Moderne Theoretische Physik IIIa WS 18/19

Prof. Dr. Alexander Mirlin
Dr. Stefan Rex

Lösungen zu Blatt 4
Besprechung: 04.12.2018

---

1. Random Walk $(6 + 6 + 3 = 15$ Punkte)

Ein orientierungsloser Erstsemesterstudent sucht die Mensa. Er startet am Ort $(x, y) = (0, 0)$ und geht pro Zeitintervall $\Delta t = 10\,\mathrm{s}$ genau $10\,\mathrm{m}$ weit, wobei die Richtung jeweils zufällig entlang der Koordinatenachsen gewählt wird, also (mit gleicher Wahrscheinlichkeit) entlang $\pm\hat{\mathbf{e}}_x$ oder $\pm\hat{\mathbf{e}}_y$.

(a) Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Ortes nach N Zeitintervallen. Um was für eine (aus der Vorlesung bekannte) Art der Verteilung handelt es sich? Welche Verteilung erhält man für großes N?

(b) Bestimmen Sie die mittlere Entfernung vom Ausgangspunkt als Funktion der Zeit für $t \gg \Delta t$! Welcher Wert ergibt sich für $t = 1\,\mathrm{h}$?

(c) Sie treffen den Studenten zufällig am Gerthsen-Hörsaal und weisen ihm den Weg in positiver x-Richtung, wo sich die Mensa in einem Abstand von $400\,\mathrm{m}$ befindet. Der Student ändert nun sein Vorgehen und geht pro Zeitintervall konstant $10\,\mathrm{m}$ in x-Richtung und außerdem $10\,\mathrm{m}$ entweder in positive oder negative y-Richtung (mit gleicher Wahrscheinlichkeit). Wie wahrscheinlich ist es, dass der Student höchstens $100\,\mathrm{m}$ neben der Mensa (in y-Richtung) ankommt?

Hinweis: Es kann hilfreich sein, den Prozess für (a) und (b) in einem um $45°$ rotierten Koordinatensystem zu beschreiben.

Bemerkung: Das hier verwendete Modell bezeichnet man als diskreten Random Walk in zwei Dimensionen. Es kann auf beliebige Dimensionen und kontinuierliche Bewegung verallgeminert werden. Random Walks sind sehr nützlich zur Beschreibung wichtiger physikalischer Prozesse, z.B. der Diffusionsbewegung von Teilchen.

Lösung:

(a) Wir rotieren das Koordinatensystem um $45°$ und nennen die neuen Koordinaten x', y'. Dann gilt in jedem Schritt des Prozesses $\Delta x' = \pm\Delta s'$ (jeweils Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$) mit $\Delta s' = \Delta s/\sqrt{2}$, $\Delta s = 10\,\mathrm{m}$, und unabhängig davon $\Delta y' = \pm\Delta s'$ (ebenfalls Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ für jedes Vorzeichen). Ohne die Koordinatentransformation gäbe es jeweils drei mögliche Ereignisse ($\pm\Delta s$ und 0, außerdem Δx und Δy nicht unabhängig), was etwas aufwändiger ist. Für binäre Zufallsereignisse gilt (siehe Vorlesung) die Binomialverteilung,

$$\rho_N^{\text{bin.}}(n) = \binom{N}{n} p^n q^{N-n} = \binom{N}{n} \left(\frac{1}{2}\right)^N ,$$

wobei in unserem Fall n die Anzahl der Teilstrecken in positive Koordinatenrichtung und $N-n$ die Anzahl der Teilstrecken in negativer Koordinatenrichtung ist. Es gilt

$$x'_N = n\Delta s' - (N-n)\Delta s' = (2n-N)\Delta s' \quad \text{bzw.} \quad n(x') = \frac{1}{2}\left(\frac{x'}{\Delta s'} + N\right),\ \mathrm{d}n = \frac{\mathrm{d}x'}{2\Delta s'}$$

und analog für y'. Somit ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Ort nach N Zeitintervallen gegeben durch

$$\rho_N(x', y') = \frac{1}{4(\Delta s')^2}\rho_N^{\text{bin.}}[n(x')]\rho_N^{\text{bin.}}[n(y')]\,.$$

In der Vorlesung wurde mithilfe der Stirling-Formel gezeigt, dass die Binomialverteilung für $N \gg 1$ in eine Gaußverteilung übergeht, wobei wir $\langle n\rangle = pN = \frac{1}{2}N$ und $\sigma^2 = pqN = \frac{1}{4}N$ einsetzen:

$$\begin{aligned}
\rho_N(x', y') &\overset{N\gg 1}{=} \frac{1}{4(\Delta s')^2}\frac{2}{\pi N}\exp\left[-\frac{\left(n(x') - \frac{1}{2}N\right)^2}{\frac{1}{2}N}\right]\exp\left[-\frac{\left(n(y') - \frac{1}{2}N\right)^2}{\frac{1}{2}N}\right] \\
&= \frac{1}{2\pi N(\Delta s')^2}\exp\left[-\frac{1}{2N}\left(\frac{x'}{\Delta s'}\right)^2\right]\exp\left[-\frac{1}{2N}\left(\frac{y'}{\Delta s'}\right)^2\right]
\end{aligned}$$

(b) Mit obiger Verteilung berechnen wir den mittleren Abstand vom Ausgangspunkt:

$$\begin{aligned}
\left\langle\sqrt{(x')^2 + (y')^2}\right\rangle &= \frac{1}{2\pi N(\Delta s')^2}\int_{\mathbb{R}^2}\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y'\,\sqrt{(x')^2 + (y')^2}\exp\left[-\frac{(x')^2 + (y')^2}{2N(\Delta s')^2}\right] \\
&= \frac{1}{2\pi N(\Delta s')^2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^2\exp\left[-\frac{r^2}{2N(\Delta s')^2}\right] \\
&= \sqrt{\frac{\pi}{2}}\,(\Delta s')\sqrt{N} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}(\Delta s)\sqrt{N}
\end{aligned}$$

Als Funktion der Zeit mit $N = t/\Delta t$:

$$\langle r\rangle(t) = \sqrt{\frac{\pi}{\Delta t}}\frac{\Delta s}{2}\sqrt{t}\,.$$

Mit den gegebenen Werten erhält man nach einer Stunde ($N = 360$) den mittleren Abstand 168 m.

(c) Nun ist nur noch in y-Richtung ein Zufallsprozess vorhanden (Binomialverteilung analog zu (a)), während aus der x-Richtung $N = 40$ folgt. Dies ist ein ausreichend großer Wert, um die Gaußverteilung zu verwenden:

$$\rho_N(y) = \frac{1}{\Delta y}\frac{1}{\sqrt{2\pi N}}\exp\left[-\frac{1}{2N}\left(\frac{y}{\Delta y}\right)^2\right]$$

Wir berechnen nun die Wahrscheinlichkeit, dass $y \in [-100\,\mathrm{m}, 100\,\mathrm{m}]$ bei $N = 40$ mit der Fehlerfunktion:

$$w = \mathrm{Erf}\left(\frac{100\,\mathrm{m}}{\sqrt{2}\sigma}\right) = \mathrm{Erf}\left(\frac{100\,\mathrm{m}}{\sqrt{2\times 40}\times 10\,\mathrm{m}}\right) = 0{,}89\,.$$

2. Ergodizität (4 + 5 + 6 = 15 Punkte)

Wiederholen Sie die Ergodenhypothese aus der Vorlesung. Wir wollen untersuchen, welche der folgenden drei klassischen Systeme ergodisch sind:

(a) ein eindimensionaler harmonischer Oszillator, $V(x) = V_0 x^2$

(b) eine Kugel in 2D in einem kreisrunden Billard, d.h. im Potential $V(\vec{x}) = V_0\theta(\vec{x}^2 - R^2)$ mit $V_0 \to \infty$ und der Theta-Funktion θ

(c) ein Teilchen in einem Doppelmuldenpotential in 1D, wobei $V(x)$ genau zwei lokale Minima an x_1, x_3 mit $V(x_1) = V(x_3) < 0$ und ein lokales Maximum an x_2 mit $V(x_2) = 0$, $x_1 < x_2 < x_3$ haben soll und $V(x) \longrightarrow \infty$ für $x \longrightarrow \infty$.

Überlegen Sie dazu, welche Parameter in einem Ensemble (hier: Realisierungen desselben Systems mit gleicher Energie) statistisch verteilt sein können. Vergleichen Sie dann, als Beispiel, den Mittelwert von x^2, der sich aus der Ensemblemittelung ergibt, mit dem zeitlichen Mittel eines einzelnen Systems (bei (c) darf qualitativ ohne Rechnung argumentiert werden). Skizzieren Sie für die eindimensionalen Fälle (a) und (c) außerdem den Phasenraum mit einigen Trajektorien verschiedener Energie. Kommt ein System jedem Punkt gleicher Energie beliebig nahe?

Lösung

(a) Harmonische Oszillatoren gleicher Energie können sich nur in der Phase φ unterscheiden ($x(t) = A\cos(\omega t + \varphi)$). Für ein Ensemble mit gleichverteilten Phasen findet man

$$\left\langle x^2 \right\rangle_E = \frac{A^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos^2(\omega t + \varphi) \mathrm{d}\varphi = \frac{A^2}{2} \, .$$

Andererseits ergibt die Zeitmittelung

$$\left\langle x^2 \right\rangle_t = \frac{A^2}{T} \int_0^{T} \cos^2(\omega t + \varphi) \mathrm{d}t = \frac{A^2}{2} \, .$$

Also $\langle x^2 \rangle_E = \langle x^2 \rangle_t$, in Übereinstimmung mit der Ergodenhypothese. Der harmonische Oszillator ist tatsächlich ergodisch, wie auch aus dem Phasenraum ersichtlich ist: pro Zyklus wird jeder Punkt mit gleicher Energie einmal durchlaufen. Die Trajektorien für verschiedene Energien sind natürlich konzentrische Ellipsen um die Ruhelage $x = 0, p = 0$.

(b) Im Ensemble sind gleichverteilt alle Orte innerhalb des Billards vertreten. Der Impuls hat für feste Energie einen konstanten Betrag, die Richtung des Impulses ist aber wie der Ort statistisch verteilt. Man erhält das Ensemblemittel

$$\left\langle \vec{x}^2 \right\rangle_E = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^R r \, \mathrm{d}r \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \, r^2 = \frac{R^2}{2} \, .$$

Für das Zeitmittel genügt es, von einer Wandberührung zur nächsten zu integrieren, also über eine Sekante des Kreises. O.B.d.A. betrachten wir eine Sekante parallel zur x-Achse der Länge $L \leq 2R$. Diese wird mit konstanter Geschwindigkeit durchlaufen,

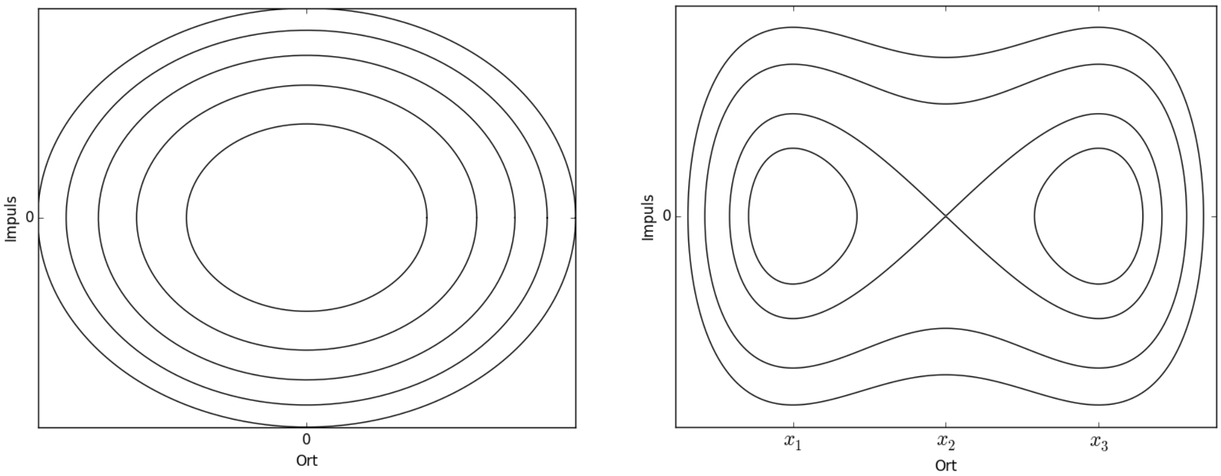

Abbildung 1: Phasenraum des harmonischen Oszillators und des Doppelmuldenpotentials mit einigen Bahnen konstanter Energie.

so dass das Integral über t durch ein Integral über x ersetzt werden kann.

$$\begin{aligned}\left\langle \vec{x}^2 \right\rangle_t &= \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} \vec{x}^2 \mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} \left(x^2+y^2\right)\mathrm{d}x \\ &= \frac{L^2}{12}+y^2 = \frac{1}{3}\left(R^2-y^2\right)+y^2 = \frac{R^2}{3}+\frac{2}{3}y^2\end{aligned}$$

Dabei ist y der minimale Abstand vom Mittelpunkt. Wir sehen das i.A. $\langle x^2\rangle_E \neq \langle x^2\rangle_t$, also für ein beliebiges System nicht das Zeitmittel durch das Ensemblemittel ersetzt werden darf. Somit ist das Kreisbillard nicht ergodisch. Man kann sich ebenfalls leicht überlegen, dass das System nicht allen Punkten gleicher Energie im Phasenraum beliebig nahe kommt, auch wenn sich der 4D-Phasenraum schlecht skizzieren lässt.

(c) Für $E > 0$ ist das Doppelmuldenpotential vergleichbar mit (a): ein Teilchen bewegt sich über das lokale Maximum hinweg durch beide Mulden. Dabei durchläuft die Trajektorie alle Phasenraumpunkte mit derselben Energie. Der einzige statistische Parameter im Ensemble ist wieder eine Phase, die beschreibt, wo sich ein Teilchen im Umlauf um beide Mulden befindet. Zeit- und Ensemblemittel liefern hier notwendig die gleichen Werte.

Anders verhält es sich für $E < 0$: Das Ensemble enthält sowohl Teilchen in der linken als auch Teilchen in der rechten Mulde. In jedem Einzelsystem ist das Teilchen aber in seiner Mulde gefangen. Es ist daher klar, dass das Ensemblemittel i.A. nicht gleich dem Zeitmittel sein kann. Im Phasenraum ist dies dadurch anschaulich, dass nicht alle Punkte gleicher Energie zusammenhängen. Für $E < 0$ gilt die Ergodenhypothese also nicht. Schließlich bleibt der Fall $E = 0$: auf der Separatrix im Phasenraum (der Trennlinie zwischen gebundenen und freien Zuständen) erreicht ein Teilchen das lokale Maximum erst für $t \longrightarrow \infty$, sodass das Zeitmittel wieder nur eine Mulde berücksichtigt. Die Ergodenhypothese gilt somit für $E \leq 0$ nicht, während sie für $E > 0$ anwendbar ist.

3. Dichtematrix (3 + 7 + 10 = 20 Punkte)

Wir betrachten ein quantenmechanisches Ensemble von Spins ($S = \frac{1}{2}\hbar$) in der Basis der Eigenzustände $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ des Spins in z-Richtung. Dieses wird durch den Dichteoperator

$$\hat{\rho} = \sum_{i,j=\uparrow,\downarrow} \rho_{ij} |i\rangle \langle j|$$

mit der Dichtematrix $\rho = (\rho_{ij})$ beschrieben.

(a) Welchen minimalen und maximalen Wert kann $\mathrm{Tr}(\rho^2)$ annehmen? Wie lautet der minimale Wert in einem d-dimensionalen Hilbertraum?
Bemerkung: Ist $\mathrm{Tr}(\rho^2)$ minimal, spricht man von einem maximal gemischten Zustand.

Lösung:
Für reine Zustände ist $\rho^2 = \rho$ (Vorlesung) und damit die Spur gleich 1. Das ist natürlich der maximale Wert, da die Gesamtwahrscheinlichkeit des Ensembles andernfalls größer als 1 wäre. Der kleinste mögliche Wert wird angenommen, wenn alle Basiszustände (in der Eigenbasis von $\hat{\rho}$) gleich wahrscheinlich sind, also für das Spinsystem jeweils die Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ haben. Dann ist $\mathrm{Tr}(\rho^2) = 2\times\frac{1}{4} = \frac{1}{2}$. In einem d-dimensionalen Hilbertraum erhält man entsprechend den Wert $\mathrm{Tr}(\rho^2) = 1/d$ für einen maximal gemischten Zustand, somit $\mathrm{Tr}(\rho^2) \to 0$ im unendlichdimensionalen Fall.

(b) Es sei

$$\rho_a = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad \rho_b = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{i}{3}\sqrt{2} \\ -\frac{i}{3}\sqrt{2} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}.$$

Entscheiden Sie jeweils, ob durch ρ_a bzw. ρ_b ein reiner oder ein gemischter Zustand beschrieben wird und schreiben Sie die Dichteoperatoren in Diagonalform, d.h. $\hat{\rho} = \sum_\alpha w_\alpha |\alpha\rangle \langle\alpha|$.

Lösung:

$$\mathrm{Tr}\left(\rho_a^2\right) = \mathrm{Tr}\begin{pmatrix} \frac{2}{9} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{5}{9} \end{pmatrix} \neq 1 \qquad \mathrm{Tr}\left(\rho_b^2\right) = \mathrm{Tr}\,\rho_b = 1$$

Somit beschreibt ρ_a einen gemischten Zustand, ρ_b hingegen einen reinen Zustand. Diagonalisieren der Matrizen ergibt:

$$\hat{\rho}_a = w_1 |1\rangle \langle 1| + w_2 |2\rangle \langle 2|$$

mit den Wahrscheinlichkeiten $w_{1,2} = \dfrac{1}{2} \pm \dfrac{\sqrt{5}}{6}$ für die Zustände

$$|1\rangle = \frac{\left(\sqrt{5}-1\right)|\uparrow\rangle + 2|\downarrow\rangle}{\sqrt{10-2\sqrt{5}}} \qquad |2\rangle = \frac{\left(\sqrt{5}+1\right)|\uparrow\rangle - 2|\downarrow\rangle}{\sqrt{10+2\sqrt{5}}}$$

und $\hat{\rho}_b = |\psi\rangle \langle\psi|$ mit

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|\uparrow\rangle - i\sqrt{\frac{2}{3}}|\downarrow\rangle$$

(c) Gegeben sei ein gemischter Zustand zur Zeit $t = 0$ mit einer Wahrscheinlichkeit von 20 % für einen Spin in positiver x-Richtung und 80 % für einen Spin in negativer x-Richtung. Das System befinde sich in einem äußeren Magnetfeld B in Richtung der z-Achse. Bestimmen Sie mithilfe der von-Neumann-Gleichung die Dichtematrix zu einer beliebigen Zeit $t > 0$ und berechnen Sie den Erwartungswert des Spins in x-, y- und z-Richtung als Funktion der Zeit.

Lösung:

Zu Beginn lautet der Dichteoperator

$$\hat{\rho}(t=0) = \frac{1}{5}\left|x+\right\rangle\left\langle x+\right| + \frac{4}{5}\left|x-\right\rangle\left\langle x-\right| \,,$$

und es folgt mit $\left|x\pm\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow\right\rangle \pm \left|\downarrow\right\rangle\right)$ die Dichtematrix in der z-Basis

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{3}{10} \\ -\frac{3}{10} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} - \frac{3}{5}\sigma_x\right) \,. \tag{1}$$

Jede Dichtematrix im Spinraum lässt sich in der allgemeinen Form $\rho = \frac{1}{2}[\mathbb{1} + \mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}]$ mit einem Vektor $\mathbf{b}$ (mit $|\mathbf{b}| \leq 1$) und dem Vektor der Paulimatrizen $\boldsymbol{\sigma}$ schreiben, was wir im Folgenden nutzen wollen.

Für die Zeitentwicklung des Dichteoperators gilt (siehe Vorlesung)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = \left[\hat{H}, \hat{\rho}(t)\right] \,.$$

Dabei enthält der Hamiltonoperator in unserem Fall nur einen Beitrag vom äußeren Magnetfeld:

$$\hat{H} = -\gamma\mathbf{S}\cdot\mathbf{B} = -\frac{1}{2}\gamma\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} = -\frac{1}{2}\gamma\hbar B\sigma_z$$

Dabei ist γ das gyromagnetische Verhältnis und $\mathbf{S}$ der Spin-Operator. Nun berechnen wir den Kommutator

$$\begin{aligned}
[H, \rho(t)] &= -\frac{1}{2}\gamma\hbar B\left[\sigma_z, \frac{1}{2}\left[\mathbb{1} + \mathbf{b}(t)\cdot\boldsymbol{\sigma}\right]\right] \\
&= -\frac{1}{4}\gamma\hbar B\left(b_x(t)\left[\sigma_z, \sigma_x\right] + b_y(t)\left[\sigma_z, \sigma_y\right]\right) \\
&= -\frac{1}{2}\gamma\hbar B\left(b_x(t)i\sigma_y - b_y(t)i\sigma_x\right)
\end{aligned}$$

Man beachte, dass wir sowohl $\hat{H}$ als auch $\hat{\rho}$ in Matrixform in der Spin-z-Basis geschrieben haben. Wir erhalten die Differentialgleichungen für die Komponenten von $\mathbf{b}$,

$$\begin{aligned}
\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial t}b_x(t) &= \frac{1}{2}i\gamma\hbar B b_y(t) \,, \\
\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial t}b_y(t) &= -\frac{1}{2}i\gamma\hbar B b_x(t) \,, \\
\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial t}b_z(t) &= 0 \,,
\end{aligned}$$

beziehungsweise

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} b_x(t) + (\gamma B)^2\, b_x(t) = 0\,,$$

mit den Lösungen

$$b_x(t) = -\frac{3}{5}\cos(\gamma B t)\,, \qquad b_y(t) = \frac{3}{5}\sin(\gamma B t)\,, \quad b_z(t) = 0.$$

wobei wir die Anfangsbedingungen $b_x(0) = -\frac{3}{5}$, $b_y(0) = 0$, $b_z(0) = 0$ berücksichtigt haben. Explizit lässt sich die Dichtematrix somit in der folgenden Form schreiben:

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\frac{3}{5}e^{\frac{i}{2}\gamma B t} \\ -\frac{3}{5}e^{-\frac{i}{2}\gamma B t} & 1 \end{pmatrix}$$

Schließlich berechnen wir die Spin-Erwartungswerte (für $i = x, y, z$):

$$\begin{aligned} \langle S_i\rangle(t) &= \frac{\hbar}{2}\langle\sigma_i\rangle(t) = \frac{\hbar}{2}\mathrm{Tr}\left(\rho(t)\sigma_i\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\left[\left(1 + \mathbf{b}(t)\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\sigma_i\right] \\ &= \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\left[b_x(t)\sigma_x\sigma_i + b_y(t)\sigma_y\sigma_i + b_z(t)\sigma_z\sigma_i\right] = \frac{\hbar}{2}b_i(t) \end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned} \langle S_x\rangle(t) &= -\frac{3\hbar}{10}\cos(\gamma B t) \\ \langle S_y\rangle(t) &= \frac{3\hbar}{10}\sin(\gamma B t) \\ \langle S_z\rangle(t) &= 0 \end{aligned}$$

Im allgemeinen Fall (beliebiger Anfangszustand, beliebige Feldrichtung) führt der Spin eine Präzession um das äußere Feld aus, was hier ein Kreisen in der xy-Ebene bedeutet.