Übungen zur Theoretischen Physik F SS 14

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Dr. Peter Orth, Dr. Una Karahasanovic

Blatt 12
Besprechung 11.07.2014

---

1. Dichtematrix für einen Spin mit $S = 1/2$ $(10 + 10 + 10 = 30$ Punkte, mündlich)

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

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

(a) Zeigen Sie, dass der Spin in einem reinen Zustand ist falls $|\mathbf{P}| = 1$, und durch die folgende Wellenfunktion dargestellt werden kann:

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

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

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

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

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

Hier bezeichnet $\hat{\rho}$ die Dichtematrix des Gesamtsystems. Für welchen der vier Zustände befindet sich das Teilchen 1 in einem reinen Zustand?
Hinweis: Die Dichtematrix des Gesamtsystems ist durch

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

gegeben.

(c) Berechnen Sie für alle vier Zustände die von-Neumann-Entropie des Teilchens 1

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

Interpretieren Sie Ihr Ergebnis.

2. Mikroskopische Herleitung der Langevingleichung ($10 + 20 + 10 + 20 + 10 = 70$ Punkte, schriftlich)

Betrachten Sie die Dynamik eines (schweren) Teilchen mit Masse M, das an seine Umgebung gekoppelt ist. Die Umgebung sei durch eine Menge von harmonischen Oszilloren beschrieben, die z.B. Phononen oder andere harmonische Anregungen darstellen können. Das Teilchen sei durch einen Impuls P und einen Ortsvektor X beschrieben und bewege sich in einem Potential $V(X)$. Der Hamiltonian lautet

$$H_S = \frac{P^2}{2M} + V(X)\,. \tag{1}$$

Die harmonischen Oszillatoren der Umgebung seien durch Impulse p_i und Ortsvektoren x_i beschrieben mit $i = 1, \ldots, N$, so daß der Hamiltonian der Umgebung (des Reservoirs) durch

$$H_R = \sum_{i=1}^{N} \Big(\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 x_i^2 \Big) \tag{2}$$

gegeben ist. Hier bezeichnen $\omega_i > 0$ die Frequenzen der individuellen Badoszillatoren. Die Kopplung des Teilchen an jede individuelle harmonische Mode sei proportional zum Invervsen des Volumen der Umgebung und daher schwach für eine makroskopische Umgebung (großes N). Die Kopplung zwischen dem Teilchen und den Moden ist daher in sehr guter Näherung linear in den Umgebungskoordinaten x_i und gegeben durch

$$H_{SR} = -\sum_{i=1}^{N} \lambda_i X x_i + \sum_{i=1}^{N} \frac{\lambda_i^2 X^2}{2m_i \omega_i^2} \tag{3}$$

mit Kopplungskonstante $\lambda_i > 0$. Hier haben wir zusätzlich angenommen, dass die Kopplung auch linear in X ist. Dieser Fall ist in vielen experimentellen Situationen realisiert. Wir haben außerdem einen x_i-unabhängigen Korrekturterm hinzugefügt, der die Renormierung des Potentials $V(X)$ durch die Kopplung an die Badoszillatoren aufhebt. Das Bad sorgt dann nur für Dissipation, für die wir uns hier interessieren und nicht noch zusätzlich für eine triviale Renormierung des Potentials $V(X)$. Der Hamiltonian des Gesamtsystems ist gegeben durch

$$H = H_S + H_R + H_{SR} = \frac{P^2}{2M} + V(X) + \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \Big(x_i - \frac{\lambda_i}{m_i \omega_i^2} X \Big)^2 \right) \tag{4}$$

Der Einfachheit halber betrachten wir in dieser Aufgabe den klassischen Grenzfall, der bei hohen Temperaturen gültig ist, und nehmen an, dass $\{X, P, x_i, p_i\}$ klassische Variablen sind. Bei tiefen Temperaturen ist es notwendig den Operatorcharakter dieser Größen zu beachten.

(a) Stellen Sie, ausgehend von den klassischen Hamiltongleichungen, die gekoppelten Bewegungsgleichungen des Systems auf, und eliminieren Sie die Impulse $\{P, p_i\}$.

(b) Lösen Sie die Gleichungen für die Koordinaten $x_i(t)$ mit Hilfe der Methode der Greenschen Funktion. Die Lösung ist eine Superposition der homogenen Lösung mit Anfangsbedingungen $x_i(0)$ und $p_i(0)$ und der speziellen Lösung, wobei die Inhomogenität von $X(t)$ abhängt.

(c) Setzen Sie Ihre Lösung für $x_i(t)$ in die Bewegungsgleichung für $X(t)$ ein und führen Sie eine partielle Integration, um die Gleichung auf die Form der Langevingleichung zu bringen

$$M\ddot{X} + \frac{d}{dX}V(X) + M\int_0^t dt'\gamma(t-t')\dot{X}(t') = \xi(t)\,. \tag{5}$$

Bestimmen Sie den Dämpfungskern $\gamma(t)$ und die stochastische Kraft $\xi(t)$.

(d) Berechnen Sie die statistischen Eigenschaften der stochastischen Kraft $\xi(t)$, d.h. berechnen Sie die statistischen Momente $\langle\xi(t)\rangle_{\rho_R}$ und $\langle\xi(t)\xi(0)\rangle_{\rho_R}$. Hier bezeichnet $\langle A\rangle_{\rho_R} = \int_{-\infty}^{\infty}\prod_i dx_i(0)\int_{-\infty}^{\infty}\prod_i dp_i(0)A\rho_R$ die Mittelung bezüglich einer klassischen thermischen Gleichgewichtsverteilung der Anfangsimpulse -und koordinaten der Badmoden $p_i(0)$ und $x_i(0)$:

$$\rho_R = Z^{-1}\exp\Big[-\beta\sum_{i=1}^{N}\Big(\frac{p_i(0)^2}{2m_i} + \frac{m_i\omega_i^2}{2}\Big(x_i(0) - \frac{\lambda_i}{m_i\omega_i^2}X(0)\Big)^2\Big)\Big]\,. \tag{6}$$

Die Größe Z ist die Zustandssumme, die der Normierung von ρ_R dient und $\beta = 1/k_BT$.

(e) Ihr Resultat sollte von der Form $\langle\xi(t)\xi(0)\rangle_{\rho_R} = Mk_BTf(t)$, wobei $f(t)$ eine Summation über die Badmoden $\sum_i$ enthält. Ersetzen Sie diese Summation durch eine Frequenzintegration $\int_{-\infty}^{\infty}d\omega$ mit Hilfe der spektralen Funktion $J(\omega) = \frac{\pi}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{\lambda_i^2}{m_i\omega_i}\delta(\omega-\omega_i)$. Nehmen Sie an, dass

$$J(\omega) = 2\pi\alpha\omega|\omega|^{s-1} \tag{7}$$

mit Badexponenten $s > 0$ und Dämpfungsstärke $\alpha > 0$. Man erhält die zeitlichen Korrelationseigenschaften der stochastischen Kraft, indem man das Frequenzintegral ausführt. Für welchen Badexponenten s ist die Kraft zeitlich δ-korreliert, d.h. $f(t) \sim \delta(t)$? Diskutieren Sie qualitativ (in Worten) welche Korrelationseigenschaften der Kraft man für andere Badexponenten erhält.