Freie Universität Berlin
Fachbereich Physik

WS 2005/2006
17.11.2006

Statistische Physik - Theorie der Wärme

(PD Dr. M. Falcke)

Übungsblatt 6: Spuroperator, Dichtematrix, Dekohärenz

Aufgabe 1 (4 Punkte)

Zeigen Sie die folgenden Eigenschaften des Spuroperators:

a. $\mathrm{Sp}\,A$ ist invariant unter Basistransformation.

b. Die Spurbildung ist eine lineare Abbildung, d.h. additiv und homogen.

c. $\mathrm{Sp}(|\psi\rangle\langle\phi|) = \langle\phi|\psi\rangle$.

d. Die Spur ist zyklisch invariant, d.h. $\mathrm{Sp}(AB) = \mathrm{Sp}(BA)$, wenn sowohl $\mathrm{Sp}(AB)$ als auch $\mathrm{Sp}(BA)$ existieren.

e. Sei $\mathcal{H}$ ein Hilbertraum derart, daß $\mathcal{H} = \mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b$ gilt. Seien A und B Operatoren, die jeweils nur auf die Hilberträume $\mathcal{H}_a$ bzw. $\mathcal{H}_b$ wirken. Dann faktorisiert die Spur, d.h. $\mathrm{Sp}(AB) = \mathrm{Sp}_a(A)\,\mathrm{Sp}_b(B)$.

f. Sei $\rho(t)$ ein zeitabhängiger Dichteoperator, dann ist $\mathrm{Sp}\left(\rho^2(t)\right)$ zeitunabhängig, d.h. ein reiner Zustand bleibt rein, ein gemischter Zustand bleibt gemischt.

Aufgabe 2 (2 Punkte)

Zeigen Sie, daß die Entropie $S = -k_B\,\mathrm{Sp}(\rho\ln\rho)$ eines quantenmechanischen Systems bei unitärer Zeitentwicklung zeitlich konstant bleibt.

Hinweis: Benutzen Sie die Entwicklung: $\ln x = \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^{k+1}(x-1)^k/k,\ 0 < x \leq 2$.

Aufgabe 3 (4 Punkte)

Gegeben sei ein Zwei-Energieniveau-System. Die normierten Energiezustände seien mit $|E_1\rangle$ und $|E_2\rangle$ bezeichnet. Ein beliebiger Zustand $|\psi(t)\rangle$ des Systems besitzt dann die Darstellung

$$|\psi(t)\rangle = c_1 e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}}|E_1\rangle + c_2 e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}|E_2\rangle$$

wobei E_1 und E_2 die zugehörigen Energieeigenwerte und c_1 und c_2 komplexwertige Normierungskonstanten sind. Der diesem Zustand zugeordente Dichteoperator sei mit $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ bezeichnet. Zeigen Sie, dass der zeitgemittelte Dichteoperator $\overline{\rho(t)} = \frac{1}{T}\int_0^T \rho(t)dt$ für Zeiten T, die sehr groß gegenüber $\hbar/|E_2 - E_1|$ sind, in den eines Gemisches übergeht.

Abgabetermin: Mittwoch, 29.11.2006 vor Beginn der Vorlesung.

Lösungen

Aufgabe 1

a. Seien $\{|n\rangle\}$ und $\{|n\rangle\}$ zwei Basissysteme, dann gilt nach Einschieben des Eins-Operators:

$$\sum_n \langle n|A|n\rangle = \sum_{n,m} \langle n|A|m\rangle\langle m|n\rangle = \sum_{n,m} \langle m|n\rangle\langle n|A|m\rangle = \sum_m \langle m|A|m\rangle\,. \tag{1}$$

b. Die Spurbildung ist additiv, da die Mittelwertbildung additiv ist:

$$\mathrm{Sp}(A+B) = \sum_n \langle n|A+B|n\rangle = \sum_n \langle n|A|n\rangle + \sum_n \langle n|B|n\rangle = \mathrm{Sp}\,A + \mathrm{Sp}\,B\,. \tag{2}$$

Sei $\lambda \in \mathbb{C}$, dann folgt die Homogenität aus

$$\mathrm{Sp}(\lambda A) = \sum_n \langle n|\lambda A|n\rangle = \lambda \sum_n \langle n|A|n\rangle = \lambda\,\mathrm{Sp}\,A\,. \tag{3}$$

c. Es gilt

$$\mathrm{Sp}(|\psi\rangle\langle\phi|) = \sum_n \langle n|\psi\rangle\langle\phi|n\rangle = \sum_n \langle\phi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle\,. \tag{4}$$

d. Seien $\{|n\rangle\}$ und $\{|n\rangle\}$ wiederum zwei Basissysteme, so erhalten wir

$$\begin{aligned}\mathrm{Sp}(AB) &= \sum_n \langle n|AB|n\rangle = \sum_{n,m} \langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle = \sum_{n,m} \langle m|B|n\rangle\langle n|A|m\rangle \\ &= \sum_m \langle m|BA|m\rangle = \mathrm{Sp}(BA)\,.\end{aligned} \tag{5}$$

e. Die Basis des Produkthilbertraumes $\mathcal{H} = \mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b$ sei $\{|n_a\rangle|n_b\rangle\}$. Dann ist

$$\mathrm{Sp}(AB) = \sum_{n_a,n_b} \langle n_b|\langle n_a|AB|n_a\rangle|n_b\rangle = \sum_{n_a,n_b} \langle n_b|B|n_b\rangle\langle n_a|A|n_a\rangle = \mathrm{Sp}\,A\,\mathrm{Sp}\,B\,. \tag{6}$$

f. Sei $\rho(t)$ der zeitabhängige Dichteoperator, dann gilt nach Aufgabe 2 mittles des unitären Zeitentwicklungsoperators $U(t,t_0)$: $\rho(t) = U^\dagger(t,t_0)\rho(t_0)U(t,t_0)$. Somit finden wir

$$\begin{aligned}\mathrm{Sp}\,\rho^2(t) &= \mathrm{Sp}\left(U^\dagger(t,t_0)\rho(t_0)\underbrace{U(t,t_0)U^\dagger(t,t_0)}_{\mathrm{Id}}\rho(t_0)U(t,t_0)\right) \\ &= \mathrm{Sp}\left(U^\dagger(t,t_0)\rho(t_0)\rho(t_0)U(t,t_0)\right) = \mathrm{Sp}\left(U(t,t_0)U^\dagger(t,t_0)\rho^2(t_0)\right) = \mathrm{Sp}\,\rho^2(t_0)\,.\end{aligned} \tag{7}$$

Hierbei haben wir verwendet, daß für unitäre Operatoren $UU^\dagger = \mathrm{Id}$ gilt und daß die Spurbildung zyklisch invariant ist.

Aufgabe 2

Die zeitliche Entwicklung eines Operators im Heisenberg Bild wird durch den Zeitentwicklungsoperator $U(t,t_0)$ bestimmt, der eine formale Lösung der Schrödingergleichung ist, also:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$$

$$\psi(t) = U(t,t_0)\psi(t_0) = T\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')dt'\right)\psi(t_0),$$

wobei T den Zeitordnungsoperator bezeichnet. Insbesondere gilt für zeitunabhängige Hamiltonoperatoren

$$U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right).$$

Die Zeitentwicklung eines Operators folgt nun unmittelbar aus zeitlichen Entwicklung von Erwartungswerten

$$\begin{aligned}\langle A\rangle(t) &= \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle \\ &= \langle\psi(t_0)|U^\dagger(t,t_0)AU(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ &= \langle\psi(t_0)|A(t)|\psi(t_0)\rangle\end{aligned}$$

mit $A(t) = U^\dagger(t,t_0)AU(t,t_0)$. Insbesondere gilt also für den Dichteoperator $\rho(t) = U^\dagger(t,t_0)\rho(t_0)U(t,t_0)$ und damit für die zeitliche Entwicklung der Entropie

$$S(t) = -k_B\,\mathrm{Sp}\left(\rho(t)\ln(\rho(t))\right) = -k_B\,\mathrm{Sp}\left(U^\dagger(t,t_0)\rho(t_0)U(t,t_0)\ln\left(U^\dagger(t,t_0)\rho(t_0)U(t,t_0)\right)\right).$$

Betrachten wir im Folgenden das allgemeine Glied

$$\left(U^\dagger\rho(t_0)U - \mathrm{Id}\right)^n = \left(U^\dagger\rho(t_0)U - U^\dagger U\right)^n$$

in der Entwicklung des Logarithmus

$$\ln\rho = \rho - \mathrm{Id} - \frac{(\rho-\mathrm{Id})^2}{2} + \frac{(\rho-\mathrm{Id})^3}{3} - + \ldots,$$

in der Operatorpotenzen $\rho^n = \underbrace{\rho\circ\rho\circ\ldots\circ\rho}_{\text{n-Faktoren}}$ wohldefiniert sind und der Einheitsoperator wegen der Unitarität von U, d.h. wegen $U^\dagger = U^{-1}$, als $\mathrm{Id} = U^\dagger U$ aufgelöst werden kann:

$$\begin{aligned}\left(U^\dagger\rho(t_0)U - U^\dagger U\right)^n &= \underbrace{\left(U^\dagger\rho(t_0)U - U^\dagger U\right)\circ\ldots\circ\left(U^\dagger\rho(t_0)U - U^\dagger U\right)}_{\text{n Faktoren}} \\ &= U^\dagger\left[(\rho(t_0)-\mathrm{Id})\underbrace{UU^\dagger}_{\mathrm{Id}}(\rho(t_0)-\mathrm{Id})\,U\circ\ldots\circ U^\dagger\,(\rho(t_0)-\mathrm{Id})\underbrace{UU^\dagger}_{\mathrm{Id}}(\rho(t_0)-\mathrm{Id})\right]U \\ &= U^\dagger\left(\rho(t_0)-\mathrm{Id}\right)^n U.\end{aligned}$$

Hieraus folgt für den Logarithmus

$$\ln\left(U^\dagger(t,t_0)\rho(t_0)U(t,t_0)\right) = U^\dagger(t,t_0)\ln\rho(t_0)U(t,t_0)$$

und damit für die Entropie

$$\begin{aligned}S(t) &= -k_B\,\mathrm{Sp}\left(U^\dagger(t,t_0)\rho(t_0)U(t,t_0)\ln\left(U^\dagger(t,t_0)\rho(t_0)U(t,t_0)\right)\right) \\ &= -k_B\,\mathrm{Sp}\left(U^\dagger(t,t_0)\rho(t_0)\underbrace{U(t,t_0)U^\dagger(t,t_0)}_{\mathrm{Id}}\ln\rho(t_0)U(t,t_0)\right) \\ &\overset{\text{zykl. Inv.}}{=} -k_B\,\mathrm{Sp}\left(\rho(t_0)\ln\rho(t_0)\underbrace{U(t,t_0)U^\dagger(t,t_0)}_{\mathrm{Id}}\right) \\ &\equiv S(t_0)\end{aligned}$$

wobei wir im vorletzten Schritt die zyklische Invarianz der Spur Operation verwendet haben.

Aufgabe 3

Der zu dem Zustand $|\psi(t)\rangle$ adjungierte Zustand $\langle\psi(t)|$ ist

$$\langle\psi(t)| = c_1^* e^{i\frac{E_1 t}{\hbar}} \langle E_1| + c_2^* e^{i\frac{E_2 t}{\hbar}} \langle E_2|.$$

Da der Zustand $\psi(t)$ als normiert vorausgesetzt wird, gilt

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = |\psi(t)|^2 = |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

Der zugeordnete Dichteoperator ergibt sich zu

$$\begin{aligned}
\rho(t) &= |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \\
&= |c_1|^2 \, |E_1\rangle\langle E_1| + |c_2|^2 \, |E_2\rangle\langle E_2| + c_1 c_2^* e^{i\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}} |E_1\rangle\langle E_2| + c_1^* c_2 e^{-i\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}} |E_2\rangle\langle E_1|.
\end{aligned}$$

Durch Zeitmittelung erhalten wir zunächst

$$\begin{aligned}
\overline{\rho(t)} &= \frac{1}{T}\int_0^T \rho(t)dt \\
&= |c_1|^2 \, |E_1\rangle\langle E_1| + |c_2|^2 \, |E_2\rangle\langle E_2| \qquad (8) \\
&+ c_1 c_2^* |E_1\rangle\langle E_2| \frac{1}{T}\int_0^T e^{i\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}} dt + c_1^* c_2 |E_2\rangle\langle E_1| \frac{1}{T}\int_0^T e^{-i\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}} dt.
\end{aligned}$$

Nun sieht man aber, dass die beiden Interferenzterme in der letzten Zeile für Zeiten T, die sehr groß gegenüber $\hbar/|E_2 - E_1|$ sind, verschwinden, denn

$$\begin{aligned}
0 \leq \left| \frac{1}{T}\int_0^T e^{i\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}} dt \right| &= \left| \frac{\hbar}{iT(E_2 - E_1)} \left(e^{\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)T} - 1 \right) \right| \\
&= \frac{\hbar}{T\,|E_2 - E_1|} \underbrace{\left| e^{\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)T} - 1 \right|}_{\leq 2} \to 0
\end{aligned}$$

für $T \gg \hbar/|E_2 - E_1|$. Eine analoge Abschätzung für das zweite Integral in (8) zeigt, dass dieses ebenfalls verschwindet falls die Zeitmittelung groß genug ist, sodass der zeitgemittelte Dichteoperator übergeht in

$$\overline{\rho(t)} = \overline{\rho} = |c_1|^2 \, |E_1\rangle\langle E_1| + |c_2|^2 \, |E_2\rangle\langle E_2|$$

was einem Gemisch der Zustände $|E_1\rangle$ und $|E_2\rangle$ entspricht. Das sieht man am einfachsten anhand der Matrixdarstellung von $\overline{\rho}$ in der Basis $\{|E\rangle\} = \{|E_1\rangle, |E_2\rangle\}$, in der $\overline{\rho}$ diagonal ist

$$\langle E|\overline{\rho}|E\rangle = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & 0 \\ 0 & |c_2|^2 \end{pmatrix}.$$

Daraus erhält man

$$\langle E|\overline{\rho^2}|E\rangle = \begin{pmatrix} |c_1|^4 & 0 \\ 0 & |c_2|^4 \end{pmatrix},$$

also $\overline{\rho} \neq \overline{\rho^2}$ und insbesondere $|c_1|^4 + |c_2|^4 < 1$ während $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$.
Zusammenfassend gilt also: Wenn die Zeitmittelung T groß gegenüber den inversen Übergangsfrequenzen $1/\omega_{12} = 1/|\omega_2 - \omega_1|$ des Zwei-Niveau-Systems ist, kommt es zur Dekohärenz des ursprünglich reinen Zustandes, was sich im verschwinden der Interferenzterme in (8) äußert.