Übungsblatt Nr.9

Diskussionsthema / Kontrollfragen:

Warum werden Wahrscheinlichkeiten benutzt, um makroskopische Systeme zu beschreiben? Warum liefert eine solche Beschreibung fast sichere Ergebnisse?

24. Eigenschaften des Dichteoperators

Der Dichteoperator ist gegeben durch

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\,\psi_i\rangle\langle\psi_i\,|, \tag{1}$$

wobei die Wahrscheinlichkeiten p_i nicht-negativ sind und $\sum_i p_i = 1$ genügen, und $|\psi_i\rangle$ beliebige (d.h. insbesondere in der Regel nicht-orthogonale) Zustände des Systems sind.

i. Beweisen Sie die folgenden Eigenschaften des Dichteoperators (Tr bezeichnet die Spur):

a) $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1$

b) $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$ dann und nur dann, wenn sich das System in einem reinen Zustand $|\psi_j\rangle$ befindet, d.h. $p_i = \delta_{ij}$.

ii. Die Größe S sei definiert durch $S(\hat{\rho}) \equiv -\mathrm{Tr}\big(\hat{\rho}\ln(\hat{\rho})\big)$.

a) Zeigen Sie, dass $S = -\sum_n P_n \ln P_n$, wobei die $\{P_n\}$ die Eigenwerte des Dichteoperators sind.

b) Zeigen Sie, dass $S = 0$, wenn sich das System in einem reinem Zustand befindet.

25. Dichteoperator

Sei auf einem zweidimensionalen Hilbert-Raum mit Orthonormalbasis $\{|\!\uparrow\rangle, |\!\downarrow\rangle\}$ der Operator

$$\hat{\rho} = \alpha|\!\uparrow\rangle\langle\uparrow\!| + \frac{1}{2}|x\rangle\langle x| \quad \text{mit} \quad |x\rangle = \frac{|\!\uparrow\rangle + |\!\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \tag{2}$$

i. Bestimmen Sie α so, dass $\hat{\rho}$ ein Dichteoperator ist.

ii. Was ist die Matrixdarstellung des Dichteoperators in der Basis $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ mit $|y\rangle = \dfrac{|\!\uparrow\rangle - |\!\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$?

iii. Das System durchläuft eine Apparatur (z.B. eine Stern–Gerlach-Apparatur), welche nur die Zustände $|\!\uparrow\rangle$ durchlässt. Wie sieht der Dichteoperator des Systems nach Verlassen der Apparatur aus?

26. Maxwell-Verteilung

Die Geschwindigkeitsverteilung der Atome eines klassischen idealen Gases im thermodynamischen Gleichgewicht bei der Temperatur T ist gegeben durch die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p_{\vec{v}}(\vec{v}) = C\exp\left(-\frac{m\vec{v}^{\,2}}{2k_{\mathrm{B}}T}\right) \tag{3}$$

mit der Masse m der Atome, der Boltzmann-Konstante k_{B} und einer Normierungskonstante C.

i. Berechnen Sie die Normierungskonstante.

ii. Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle v_x^2\rangle$ und $\langle\vec{v}^{\,2}\rangle$.

iii. Wie groß ist die mittlere kinetische Energie eines Atoms?

iv. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit $p_E(E)\,\mathrm{d}E$, dass sich die kinetische Energie eines Atoms im Intervall $[E, E+\mathrm{d}E]$ befindet.

27. Stirling-Formel

Die sogenannte *Stirling-Formel*

$$n! \underset{n\gg 1}{\sim} \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{\mathrm{e}}\right)^n \tag{4}$$

liefert eine für große n gute Näherung der Fakultät, die Sie in dieser Aufgabe herleiten werden.

i. Gehen Sie dazu von der folgenden Darstellung der Fakultät aus:

$$n! = \int_0^\infty t^n\, \mathrm{e}^{-t}\, \mathrm{d}t \tag{5}$$

und entwickeln Sie den Logarithmus des Integranden um seinen Maximalwert in eine Taylor-Reihe in t.

ii. Vergleichen Sie (mit Hilfe eines kurzen Mathematica- oder Python-Scripts?) die Näherung mit den exakten Ergebnissen für $n = 3, 4, 5, 6, 7$. Wie groß ist jeweils der relative Fehler $1 - \sqrt{2\pi n}\,(n/\mathrm{e})^n/n!$?

iii. Wenn Sie noch Zeit haben, können Sie auch die Gl. (5) herleiten.

Bemerkung: Das Integral auf der rechten Seite der Gl. (5) mit $z-1$ anstelle von n definiert eine Funktion $\Gamma(z)$, die die Fakultät für komplexes z mit $\mathrm{Re}(z) > 0$ problemlos erweitert. Offensichtlich gilt $\Gamma(n) = (n-1)!$ für $n \in \mathbb{N}$. Wenn Sie Gl. (5) hergeleitet haben, wird Ihnen auch die Eigenschaft $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ klar sein. Dazu können Sie vielleicht noch $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$ herleiten.