

1. Ein Spin-1/2-Teilchen befindet sich in einem äußeren Magnetfeld $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, das in z -Richtung wirkt und zeitlich konstant ist. Diese Situation wird durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B} = -\frac{2\mu_B B}{\hbar} \hat{\sigma}_z \quad \text{mit } \mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \quad (\text{Bohr'sches Magneton})$$

beschrieben. Hier bezeichnet $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ den Vektor des Drehimpulsoperators des Teilchens. In der orthogonalen Basis aus Eigenvektoren $|\uparrow\rangle_z, |\downarrow\rangle_z$ von $\hat{\sigma}_z$, mit $\hat{\sigma}_z |\uparrow\rangle_z = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle_z$ und $\hat{\sigma}_z |\downarrow\rangle_z = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle_z$ lauten die Komponenten von $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$,

$$\hat{\sigma}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(Pauli-Matrizen).

- (a) Stellen Sie die Liouville-von-Neumann Gleichung in Matrix-Schreibweise in der Basis $|\uparrow\rangle_z, |\downarrow\rangle_z$ auf. Finden Sie die Lösung

$$\hat{\rho}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) \end{pmatrix}$$

der Dichtematrix zu einem beliebigen Zeitpunkt t bei gegebener Dichtematrix zum Zeitpunkt $t = 0$, $\hat{\rho}(t = 0)$.

- (b) Zeigen Sie, dass die Zustandsvektoren $|\uparrow\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_z + |\uparrow\rangle_z)$ und $|\downarrow\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_z - |\uparrow\rangle_z)$ Eigenvektoren des Operators $\hat{\sigma}_x$, d.h. der x -Komponente des Drehimpulses, sind. Bestimmen Sie die zugehörigen Eigenwerte.
- (c) Die Dichtematrix sei zum Ausgangszeitpunkt durch ein Gemisch aus den Zuständen $|\uparrow\rangle_x$ und $|\uparrow\rangle_z$ gegeben, d.h.

$$\hat{\rho}(t = 0) = p_x |\uparrow\rangle_x \langle\uparrow|_x + p_z |\uparrow\rangle_z \langle\uparrow|_z,$$

mit den zugehörigen Wahrscheinlichkeiten p_x und p_z . Formulieren Sie $\hat{\rho}(t = 0)$ in Matrixschreibweise in der Basis $|\uparrow\rangle_z, |\downarrow\rangle_z$. Berechnen Sie daraus $\hat{\rho}(t)$ mit Hilfe der allgemeinen Lösung aus (a).

- (d) Berechnen Sie für die Ausgangssituation aus (c) den Erwartungswert $\langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}\rangle(t) = \text{Sp}(\hat{\rho}(t) \hat{\boldsymbol{\sigma}})$ aller drei Komponenten des Spins als Funktion der Zeit. Diskutieren Sie die physikalische Bedeutung dieser Bewegung. Diskutieren Sie ferner die zwei Spezialfälle $p_x = 0$ ($p_z = 1$) und $p_x = 1$ ($p_z = 0$).

2. In einer orthogonalen Basis aus genau drei Basisvektoren $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ sind folgende zwei Dichtematrizen gegeben,

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\rho}_2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Berechnen Sie jeweils die Entropie $S = -k_B \text{Sp}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$ dieser Dichtematrizen. Entscheiden Sie anhand der Entropie, ob es sich um einen reinen oder einen gemischten Zustand handelt. *Hinweis:* Bestimmen Sie jeweils die Eigenwerte p_1, p_2, p_3 der Dichtematrizen und berechnen Sie S aus $S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i$.

3. Gegeben sei ein System aus N Spin-1/2-Teilchen, d.h. eine Erweiterung des in Aufgabe 2 des 6. Übungsblattes betrachteten Systems. Der Zustandsraum werde demnach von den Produktzuständen $|\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N\rangle$, mit $\sigma_i \in \{\uparrow, \downarrow\}$ aufgespannt. Aufgrund von Wechselwirkungen zwischen den Spins liege bei tiefen Temperaturen mit einer Wahrscheinlichkeit von 1/2 ein sogenannter ferromagnetischer Zustand $|\uparrow \uparrow \dots \uparrow\rangle$ (alle Spins im Zustand $\uparrow$) und mit einer Wahrscheinlichkeit von 1/2 ein sogenannter antiferromagnetischer Zustand $|\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots\rangle$ (Wechsel der Orientierung zwischen nächsten Nachbarn) vor. Die Dichtematrix sei also durch

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} |\uparrow \uparrow \dots \uparrow\rangle \langle \uparrow \uparrow \dots \uparrow| + \frac{1}{2} |\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots\rangle \langle \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots|$$

gegeben. Berechnen Sie die reduzierten Dichtematrizen jeweils für den Spin am Platz 1 und den Spin am benachbarten Platz 2. Wie groß sind die Erwartungswerte $\langle \hat{\sigma}_1 \rangle$ und $\langle \hat{\sigma}_2 \rangle$?