Белорусский Государственный Университет, Минск
Физический факультет WS 2011/2012
Я.М. Шнир

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И ТЕРМОДИНАМИКА

Задачи и упражнения 2

1. Рассмотрим двухуровневую квантовую систему собственные состояния которой $|a\rangle$ и $|b\rangle$ соответствуют собственным значениям энергии $\hbar\omega_a$ и $\hbar\omega_b$.

   (i) Записать уравнение, описывающее эволюцию состояния $|a\rangle$
   (ii) Рассмотрим чистое состояние, в момент времени $t = 0$ заданное как

   $$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|a\rangle + i|b\rangle\right)$$

   Записать уравнение, описывающее эволюцию этого состояния со временем.
   (iii) Рассмотрим смешанное состояние, которое в момент времени $t = 0$ задано как смесь 3 состояний:
   $|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|a\rangle + |b\rangle\right)$ - с вероятностью 25 %;
   $|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|a\rangle - |b\rangle\right)$ - с вероятностью 25 %;
   $|\Psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|a\rangle + i|b\rangle\right)$ - с вероятностью 50 %.
   Найти матрицу плотности этой системы в базисе состояний $|a\rangle$ и $|b\rangle$. при $t = 0$

   (iv) Записать уравнение, описывающее эволюцию матрицы плотности со временем.
   (v) Проверить, что построенная матрица удовлетворяет всем свойствам матрицы плотности и вычислить параметр чистоты построенного выше смешанного состояния.

2. Матрица плотности двухуровневой системы, поляризация.
   Эрмитова матрица плотности ρ двухуровневой системы может быть разложена по базису матриц Паули:

   $$\rho = a_0 I + a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 + a_3\sigma_3$$

   где a_k - коэффициенты разложения.

   (i) Выразить эту матрицу через компоненты вектора поляризации $P_k = \langle\sigma_k\rangle$.
   (ii) Диагонализовать полученную матрицу и определить в этом представлении собственные значения оператора $(\vec{\sigma}\cdot\vec{P})$.
   (iii) Определить, при каких условиях на вектор поляризации система будет находится в чистом состоянии.

3. Предположим, что имеется 2 типа бактерий: “красные” и “зеленые”, которые ничем кроме цвета не отличаются. Бактерии размножаются простым делением пополам один раз в час и не скрещиваются между собой. Колонии из 5000 “красных” и 5000 “зеленых” особей предоставлена еда без ограничений, но в

какой-то момент времени в колонию запущен хищник, поддерживающий стабильность популяции за счет поедания случайно выбранных 10000 особей в час.

(i) Каково распределение вероятности числа "красных" бактерий после длительного промежутка времени?

(ii)Как долго следует ожидать этого ответа?

(iii) Какой эффект на результаты пунктов (i) и (ii) произведет 1%-ное предпочтение хищника в отношении "красных" бактерий?

4. Рассмотрим одномерную цепочку атомов с периодом решетки a. Атом может перескакивать через одну позицию в любом направлении каждые τ секунд. Вероятность скачков влево и вправо равна p и $q = 1 - p$ соответственно.

   (i) Определить среднюю позицию атома $\langle x \rangle$ после большого промежутка времени $t = N\tau, \quad N \gg 1$

   (ii) Вычислить среднеквадратичную флуктуацию позиции атома $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ в момент t.

Решения

1. (i) Уравнение, описывающее эволюцию состояния $|a\rangle$ со временем:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|a\rangle = H|a\rangle; \quad \Longrightarrow \quad |a(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|a(0)\rangle$$

Если $H|a(0)\rangle = \hbar\omega|a(0)\rangle$, то $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|a(0)\rangle = e^{-i\omega t}|a(0)\rangle$

(ii) Уравнение, описывающее эволюцию состояния $\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle+i|b\rangle)$ со временем:

$$|\phi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\left(|a\rangle + i|b\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-i\omega_a t}|a\rangle + ie^{-i\omega_b t}|b\rangle\right]$$

(iii) Оператор плотности чистого состояния $|\Psi_k\rangle$ определен как $\rho_k = |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|$. Для смеси состояний $\rho = \sum\limits_k P_k\rho_k$, где $\sum\limits_k P_k = 1$ и P_k - вероятность нахождения системы в состоянии $|\Psi_k\rangle$. В рассматриваемом случае

$$\rho = \frac{1}{4}|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + \frac{1}{4}|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| + \frac{1}{2}|\Psi_3\rangle\langle\Psi_3|$$

Матрица плотности в базисе состояний $\{|a\rangle, |b\rangle\}$ имеет структуру

$$\rho = \begin{pmatrix} \langle a|\rho|a\rangle & \langle a|\rho|b\rangle \\ \langle b|\rho|a\rangle & \langle b|\rho|b\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{aa} & \rho_{ab} \\ \rho_{ba} & \rho_{bb} \end{pmatrix}$$

Элементы этой матрицы могут быть вычислены с помощью соотношений

$$\begin{aligned}
\langle a|\Psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle a|\left[|a\rangle + |b\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}; & \langle b|\Psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle b|\left[|a\rangle + |b\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{2}};\\
\langle a|\Psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle a|\left[|a\rangle - |b\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}; & \langle b|\Psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle b|\left[|a\rangle - |b\rangle\right] = -\frac{1}{\sqrt{2}};\\
\langle a|\Psi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle a|\left[|a\rangle + i|b\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}; & \langle b|\Psi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle b|\left[|a\rangle + i|b\rangle\right] = \frac{i}{\sqrt{2}}
\end{aligned}$$

и сопряженных к ним. Тогда

$$\begin{aligned}
\rho_{aa} &= \langle a|\left[\frac{1}{4}|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + \frac{1}{4}|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| + \frac{1}{2}|\Psi_3\rangle\langle\Psi_3|\right]|a\rangle = \\
&= \frac{1}{4}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{4}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

и аналогичным образом,

$$\rho_{ab} = -\frac{i}{4}; \qquad \rho_{ba} = \frac{i}{4}; \qquad \rho_{bb} = \frac{1}{2}$$

Окончательно

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

(iv) Эволюцию матрицы плотности со временем описывается уравнением Лиувилля-Неймана

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\rho, H]$$

(v) Свойства матрицы плотности

(a) $\mathrm{Tr}\ \rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & 1 \end{pmatrix} = 1$

(b) $\rho^\dagger = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & 1 \end{pmatrix} = \rho$ - эрмитовость

(c) Собственные значения и собственные векторы матрицы ρ:

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}; \qquad \Phi_2 = \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix}; \qquad \lambda_1 = 1/4; \quad \lambda_2 = 3/4$$

- матрица плотности положительно определена.

(d) Параметр чистоты (состояние смешанное!):

$$\mu = \mathrm{Tr}\ (\rho)^2 = \frac{1}{4}\cdot\frac{5}{2} = \frac{5}{8} < 1$$

2. (i) Рассмотрим разложение $\rho = a_0 I + a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 + a_3\sigma_3$

Поскольку $\mathrm{Tr}\ (\rho) = 1$, $\mathrm{Tr}\ I = 2$ и $\mathrm{Tr}\ (\sigma_k) = 0$, $a_0 = 1/2$. Чтобы определить значения других коэффициентов a_k, рассмотрим средние значения операторов σ_k:

$$\langle\sigma_k\rangle = \mathrm{Tr}\ (\rho\sigma_k) = a_i \mathrm{Tr}\ (\sigma_k\sigma_i) = 2a_k$$

где мы учли что $\mathrm{Tr}\ (\sigma_i\sigma_k) = 2\delta_{ik}$. Таким образом, $P_k = \langle\sigma_k\rangle$ и

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \vec{P}\cdot\sigma) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1-P_z \end{pmatrix}$$

(ii) Диагонализация матрицы плотности приводит к

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+P & 0 \\ 0 & 1-P \end{pmatrix}$$

где $P = \pm|P| = \pm\sqrt{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}$. Следовательно, $P^2 = 1 - 4\mathrm{det}\ \rho$ и при выборе базиса в котором $P_x = P_y = 0$ матрица плотности диагональна и $P = P_z$. При этом

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{P}) = \begin{pmatrix} P_z & 0 \\ 0 & -P_z \end{pmatrix}$$

и собственные вектора оператора $(\vec{\sigma} \cdot \vec{P})$ представляют собой соответственно состояния “спин вверх”:

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{P})|\uparrow\rangle = P|\uparrow\rangle$$

и "спин вниз":

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{P})|\downarrow\rangle = -P|\downarrow\rangle$$

При этом вероятность найти систему в состоянии “спин вверх” равна $\frac{1+P}{2}$, а вероятность найти систему в состоянии “спин вниз” - $\frac{1-P}{2}$.

(iii) Если $P = 0$, то

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

и Tr $(\rho^2) = 1/2$ - система полностью разупорядочена и деполяризована. Условие чистоты состояний означает что $\rho^2 = \rho$, или

$$\rho^2 = \frac{1}{4}\left[I + 2(\vec{\sigma} \cdot \vec{P}) + (\vec{\sigma} \cdot \vec{P})^2\right] = \frac{1}{4}\left[I + 2(\vec{\sigma} \cdot \vec{P}) + P^2\right] = \rho = \frac{1}{2}\left[I + (\vec{\sigma} \cdot \vec{P})\right]$$

что возможно если $P^2 = 1$ или имеются 2 чистых состояния $P = \pm 1$:

$$\rho_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \rho_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

В полностью разупорядоченной системе

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\rho_\uparrow + \frac{1}{2}\rho_\downarrow = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- смесь двух полностью поляризованных состояний. В общем случае

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+P & 0 \\ 0 & 1-P \end{pmatrix} = P\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + (1-P)\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

- смесь полностью поляризованной и полностью деполяризованной компонент, отношение

$$\frac{P}{1-P}$$

называется степенью поляризации.

3. (i) $n = 10000$ бактерий случайно выбраны хищником из $N \gg n$ бактерий. При этом вероятность выбора “красной” или “зеленой” бактерии одинакова. Всего у хищника имеется 2^n вариантов выбора и имеется C_m^n способов выбрать m “красных” бактерий. Следовательно, распределение вероятности числа “красных” бактерий есть

$$\frac{1}{2^n}C_m^n = \frac{1}{2^n} \cdot \frac{n!}{m!(n-m)!}, \quad m = 0, 1, 2 \ldots n$$

(ii) Поскольку условие $N \gg 1$ означает что $\frac{N}{n} \gg 1$, что практически выполняется при $\frac{N}{n} \sim 100$. Поскольку $N = 2^t \cdot n$, то $\frac{N}{n} = 2^t \approx 100$ при $t \sim 6 - 7$ часов.

(iii) Если хищник предпочитает "красные" бактерии, то вероятность их съедения есть $\frac{1}{2} + p$, где $p = 0.01$. Тогда вероятность съедения "зеленых" бактерий равна $\frac{1}{2} - p$ и распределение вероятности принимает вид:

$$C_m^n \left(\frac{1}{2} + p\right)^m \left(\frac{1}{2} - p\right)^{n-m} = \frac{n!}{m!(n-m)!} \cdot \left(\frac{1}{2} + p\right)^m \left(\frac{1}{2} - p\right)^{n-m}$$

При этом ответ на второй вопрос не изменяется.

4. (i) Пусть начальная позиция атома выбрана в точке $x_0 = 0$ и ось координат направлена направо. Тогда по формуле $\langle x \rangle = \sum_n P_n x$

$$\langle x \rangle = \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} \left[(2n - N)a\right] p^n q^{N-n} = 2ap\frac{\partial}{\partial p}\left(\sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}\right) - Na$$

где смещение после n скачков есть $x = (2n - N)a$, $n = 0$ соответствует (крайне маловероятной!) ситуации когда все скачки происходили влево от начальной точки, $n = N$ - ситуации в которой все скачки происходили вправо от начальной точки и т.д. Поскольку выражение в скобках представляет собой биномиальный ряд, то

$$\langle x \rangle = 2ap\frac{\partial}{\partial p}(p+q)^N - Na = 2apN[(p+q)^{N-1}] - Na = 2apN \cdot 1^{N-1} - Na = Na(p-q)$$

(ii) По аналогии,

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} \left[(2n-N)a\right]^2 p^n q^{N-n} \\ &= 4a^2p^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}(p+q)^N - 4(N-1)a^2p\frac{\partial}{\partial p}(p+q)^N + N^2a^2 \\ &= Na^2\left[(N-1)(p-q)^2 + 1\right]\end{aligned}$$

Окончательно,

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2 = 4Na^2pq$$