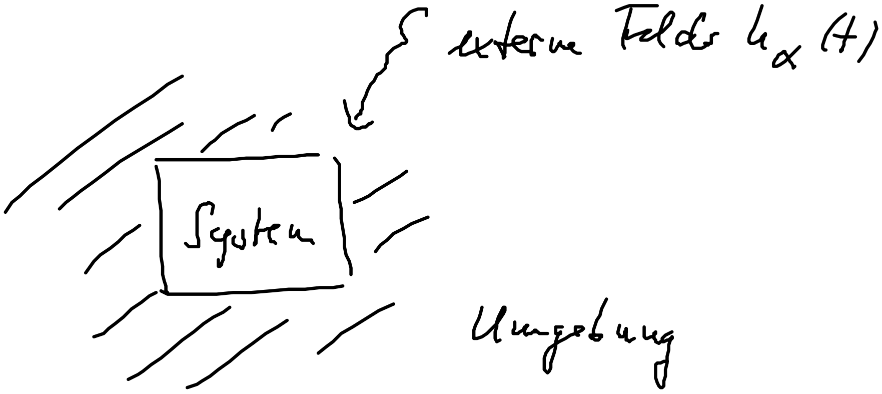
2.1.4. Wechselwirkung von System und Umgebung



$$H_{ges} = H + H_B + H_{SB}$$

System Umgebg WW System / Umgebg.

$$H = H_S + H_S^\alpha(t)$$

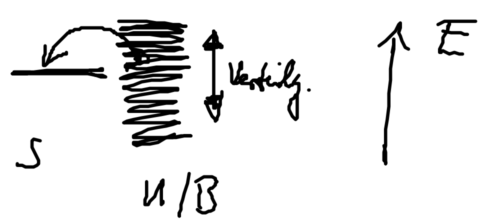
System H ohne h_α externe Felder

interessiert

H_B Umgebung = „Bad"

Umgebg. wird oft Bad genannt:

– viele Freiheitsgrade / Zustände



Umgebg. wird durch die viel Freihts-grad nicht v. System beeinflußt

→ Analogie zu <u>Badewanne</u>

(so wird Irreversibilität erklärt)

Gesamtwellenfunktion $i\hbar \partial_t \chi = H_{ges} \chi$

$$|\chi\rangle = \sum_{n,b} c_{nb}(t) \, |n\rangle |b\rangle$$

$$H_S \, |n\rangle = \varepsilon_n \, |n\rangle$$

$$H_B \, |b\rangle = \varepsilon_b \, |b\rangle$$ → da brauche gar nicht!

wollen nicht $|\chi\rangle$ haben

eigentlich sind Erwartungswerte $\langle O_S \rangle$ des System S gesucht:

Systemoperator

$$\langle O_S \rangle = \langle \chi | O_S | \chi \rangle =$$

$$\sum_{n,n',b,b'} c^*_{n'b'} \, c_{nb} \, \langle n' | \langle b' | O_S \, |b\rangle |n\rangle =$$

wirkt nicht auf O_S

mit $\langle b | b' \rangle = \delta_{bb'}$

$$\langle O_s \rangle = \sum_{uu'} \underbrace{\sum_b c^*_{u'b} \, c_{ub}}_{\text{Bad Info ist nur in } b\text{-Summe} \;\equiv\; \rho_{u'u}} \; \overbrace{\langle u' | O_s | u \rangle}^{\text{analog zur bisherigen QM}}$$

$\rho_{uu'}$ heißt Dichtematrix, enthält die Information zur Umgebung:

$\rho_{uu'}$ ist hermitesch $\longrightarrow$ kann diagonalisiert werden

nach Interpretation der QM muß folgendes gelten:

a) $|c_{ub}|^2 \in [0, 1]$, weil Wahrscheinlichkeit

b) $\sum_u \sum_b |c_{ub}|^2 = \sum_u \rho_{uu} = 1$

$\longrightarrow$ Die Spur der Dichtematrix ist 1.

um physikalisch zu interpretieren ordnen wir $\rho_{uu'}$

den Dichteoperator ρ zu: (statistischer Operator: andere Bezeichnung)

$$\langle \chi | O_s | \chi \rangle = \sum_{u,u'} \langle u | \rho | u' \rangle \langle u' | O_s | u \rangle$$

Vollständigkeit: $1 = \sum_{u'} |u'\rangle\langle u'|$

$$= \sum_u \langle u | \rho \, O_s | u \rangle$$

Erwartungswert ein Systemoperators:

$$\langle O_s \rangle = sp(\rho(t)\, O_s)$$

$$sp(\dots) \equiv \sum_n \langle n| \dots |n\rangle$$

↗ vollständiges System

Diese Glg. ist die Verallgemeinerung f. Erwartungswerte in der statistischen Physik.

Was wissen wir über ρ?

a) in Eigendarstellg. kann man ρ schreiben:

$$\rho = \sum_i w_i\, |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

Schrödingerbild, daher $|\psi_i(t)\rangle$

ρ wirkt nur in Systemraum

$$\rightarrow \quad i\hbar\, \partial_t |\psi_i\rangle = H |\psi_i\rangle$$

↗ System-H

b) Interpretation von ρ:

$$\langle O_s \rangle = sp(\rho\, O_s) = \sum_n \langle n | \rho\, O_s | n \rangle$$

$$= \sum_n \langle n | \underbrace{\sum_i w_i | \psi_i \rangle}_{\text{zahlen}} \langle \psi_i | O_s | n \rangle$$

mit $1 = \sum_n |n\rangle\langle n|$ folgt $= \sum_i w_i \langle \psi_i | O_s | \psi_i \rangle$

$$\langle O_s \rangle = \sum_i \underbrace{w_i}_{\substack{\text{diagonalisierte} \\ \text{Dichtematrix:} \\ \sum_i w_i = 1 \\ w_i \in [0,1]}} \underbrace{\langle \psi_i | O_s | \psi_i \rangle}_{\substack{\text{Bildg. v. Erwartgswerten in QM,} \\ \text{zu verschied. Zuständ } |\psi_i\rangle}}$$

In der statist. Physik wird mit $\sum_i$ über ein Ensemble $\{|\psi_i\rangle\}$ mit der Wahrscheinlichkeitsverteilg w_i nochmal über die Quantenerwartungswerte $\langle \psi_i | O_s | \psi_i \rangle$ gemittelt.

resultiert aus Umgebung, so ist es abgeleitet.

c) w_i ist zeitlich konstant und z. B. unbekannt

die bleiben zeitlich konstant bis Messg. erfolgt d/ <u>reiner Zustand</u> : $w_{i_0} = 1$, alle andere sind $w_i = 0$

kann nur ohne Umgebg. beobachtet werden,
kann i.a. nicht präpariert werden

$$\langle O_s \rangle = sp(\rho O_s) = sp(|\psi_{i0}\rangle\langle\psi_{i0}| O_s)$$

$$= \sum_n \underbrace{\langle n|\psi_{i0}\rangle\langle\psi_{i0}|O_s|n\rangle}_{\text{Identität}} = \langle\psi_{i0}|O_s|\psi_{i0}\rangle$$

↑ QM ohne Umgebg.

<u>gemischter Zustand</u>

weil keine exakte Präparation mögl. ist,
sind in allgemein mehrere $w_i \neq 0$

2.1.5. Beispiel f. gemischten Zustand

Photon mit 2 senkrechten Polarisations mögl.: $|\uparrow\rangle$ $|\rightarrow\rangle$

reiner Zustand: $|\psi_{i0}\rangle = a|\rightarrow\rangle + b|\uparrow\rangle$

mit a, b beliebig aber $|a|^2 + |b|^2 = 1$

$$\rho_{rein} = |\psi_{i0}\rangle\langle\psi_{i0}| =$$

$$(a|\rightarrow\rangle + b|\uparrow\rangle)(a^*\langle\rightarrow| + b^*\langle\uparrow|) =$$

$$a a^* |\rightarrow\rangle\langle\rightarrow| + a b^* |\rightarrow\rangle\langle\uparrow|$$

$$+ a^* b |\uparrow\rangle\langle\rightarrow| + b b^* |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$$

$$\rho^{\text{rein}}_{uu'} = \begin{pmatrix} |a|^2 & a b^* \\ a^* b & |b|^2 \end{pmatrix}$$

f. reinen Zustand,

a, b belieb.: $\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}$

$1, 0$

$u = 1 = |\rightarrow\rangle$

$u = 2 = |\uparrow\rangle$

gemischter Zustand

$$\rho = \sum_i w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

$$= \frac{1}{3} |\rightarrow\rangle\langle\rightarrow| + \frac{2}{3} |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$$

$a = 1$, $b = 0$ $\qquad$ $b = 1$, $a = 0$

Gemisch aus ⊥ zueinander polarisiertem Licht.

$$\rho_{uu'} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

Kriterium für Unterscheidg.

man berechne $\operatorname{tr}(\rho^2)$,

wenn $\operatorname{tr}(\rho^2) = 1 \Rightarrow$ reiner Zustand

$\operatorname{tr}(\rho^2) < 1 \Rightarrow$ gemischter Zustand

<u>weil</u>:

$$\operatorname{tr}(\rho^2) = \sum_i w_i^2 \;\begin{cases} \nearrow = 1 & \text{wenn nur 1 } w_i \text{ besteht} \\ \searrow \le \left(\sum_i w_i\right)^2 = 1 \end{cases}$$

2.1.6. Aufgabe der statistischen Physik

mindestens 4 Aufgaben

1) Gleichg. für $\underline{\underline{\rho(t)}}$ bestimmen, und lösen

$\rightarrow$ $\underline{sp(\rho(t)\, O_s) = \langle O_s \rangle}$

analog zu Schrödinger $\langle \Psi | O_s | \Psi \rangle = \langle O_s \rangle$

2) Anfangsbedingg. für die Gleichg. festlegen,
ist identisch mit der Festlegg. der $\underline{\underline{w_i}}$

3) w_i soll nicht kompliziert sein,

Umgebg. ($\sum_b$ ...) soll in wenige

Parameter ($T, \mu, \ldots$) gepackt werden

4/ Anwendungen

2.2. Dynamik des statistischen Operators

$$\rho = \sum_\alpha w_\alpha \, |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|$$

von rechts

wissen $\quad i\hbar \, |\dot\psi_\alpha\rangle = H \, |\psi_\alpha\rangle \qquad | \cdot \langle\psi_\alpha| w_\alpha$

konjugiert: $\quad -i\hbar \, \langle\dot\psi_\alpha| = \langle\psi_\alpha| H \qquad | \cdot w_\alpha \, |\psi_\alpha\rangle$

von links

Differenz bilden:

$$i\hbar \, \partial_t \left(w_\alpha \, |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha| \right) = w_\alpha \left(H|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha| - |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|H \right)$$

$\sum_\alpha$ nehmen:

$$i\hbar \, \partial_t \rho = [H, \rho] \longrightarrow \langle O_s\rangle = \mathrm{tr}(\rho O_s)$$

Bewegungsgleichung d. Dichteoperators ρ (von Neumanngl.)

ersetzt die Schrödingergl. in der statistischen Physik.

2.2.2. Interpretation und Bewegungsgleichg. d. Dichtematrix

$$\langle O_s \rangle = \sum_{n,n'} \rho_{nn'}(t)\, O^s_{nn'}$$

? wie sehen diese Matrixelemente aus ?

wie ρ_{nn}, $\rho_{nn'}$ interpretiert ?

wenn Messg. an Observable mit Eigenfunktionssystem $|n\rangle$ geschieht und vorher $|\psi\rangle$ vorliegt, so ist

$\langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle = |c_n|^2$ die Wahrscheinlichkeit, das System in Zustand $|n\rangle$ zu finden

offensichtlich ist $|n\rangle\langle n|$ der Operator f. diese Wahrscheinlichkeit.

Übertragung auf Statistik:

$$sp(\rho\, |n\rangle\langle n|) = \sum_j \langle j | \underbrace{\sum_i w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|}_{} n\rangle\langle n | j \rangle$$

$$= \underline{\sum_i} w_i \underline{\langle n | \psi_i \rangle} \langle \psi_i | n \rangle = \langle n | \rho | n \rangle = \rho_{nn}$$

Die Diagonalelemente des statistischen Operators ρ_{nn}

sind die Wahrscheinlichkeit, das System im Zustand $|n\rangle$ zu finden.

Gleichg. f. Diagonalelemente: $i\hbar\dot{\rho} = [H,\rho]$ $\Big/ \langle n| \cdots |n\rangle$

$$i\hbar\dot{\rho}_{nn} = \langle n| H\rho - \rho H |n\rangle$$

$$1 = \sum_m |m\rangle\langle m|$$

$$i\hbar\dot{\rho}_{nn} = \sum_m \left(H_{nm}\rho_{mn} - \rho_{nm}H_{mn}\right) \qquad (1)$$

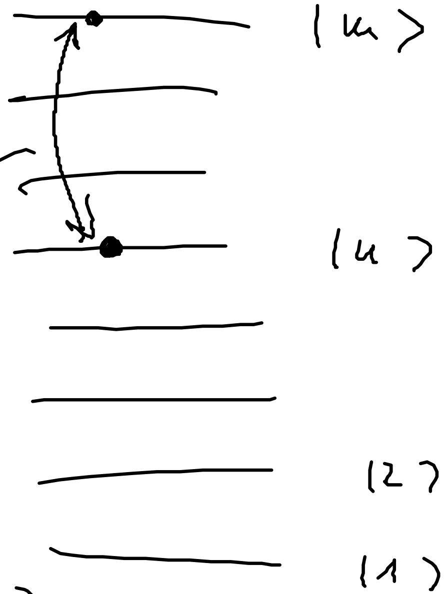
Die Wahrscheinlichkeit das System in $|n\rangle$ zu finden kann mit dieser Gleichg. berechnet werden, $H_{nm} = \langle n|H|m\rangle$

allerdings: sind verkoppelt mit den Nichtdiagonalelementen ρ_{nm}

$$i\hbar\dot{\rho}_{mn} = \sum_i \left(H_{mi}\rho_{in} - \rho_{mi}H_{in}\right) \qquad (2)$$

(1+2) bilden die Dichtematrixgleichungen.

Interpretation



$\rho_{mm} \;\hat{=}\;$ Wahrscheinlichkeit System im Zustand $|m\rangle$ zu finden

$\rho_{nn} \;\hat{=}\;$ Wahrscheinlichkeit System im Zustand $|n\rangle$ zu finden

$\underbrace{\rho_{mn}, \rho_{nm}}$

Wahrscheinlichkeitsamplitude daß System von $|n\rangle \to |m\rangle$ übergeht.

(z. B. durch zeitabhängige Felder)