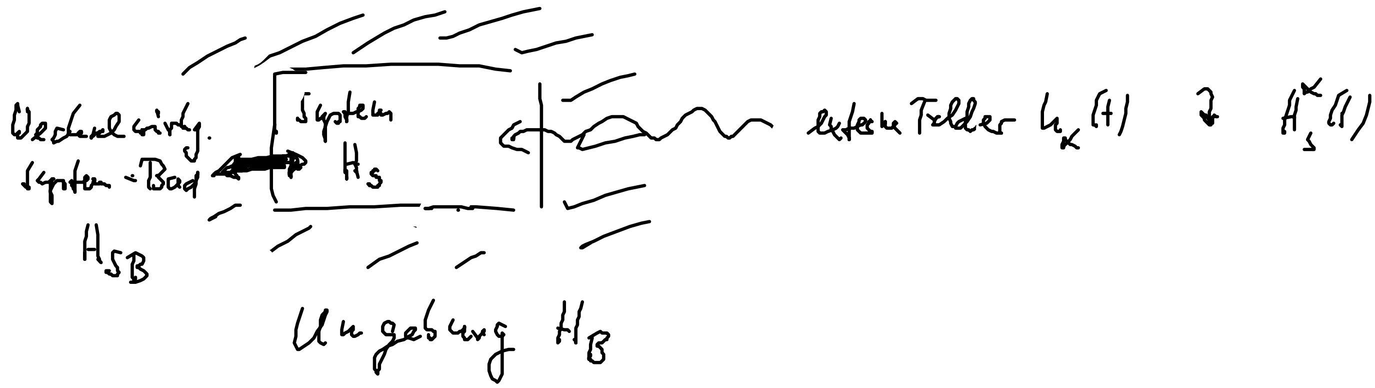
3. Wechselwirkung von System und Umgebung: statistischer Operator statt Wellenfunktion

$\hat{=}$ Wahrheit, aber eben nicht der ganzen Wahrheit ...



Hamiltonian des Gesamtsystems:

$$H_{ges} = H + H_B + H_{SB} \quad , \quad H = H_S + H_S^\alpha(t)$$

H_S : Hamiltonian des Systems

H_S^α : –"– der System - externe Feld Kopplung

H_B : –"– der Umgebung, oft „Bad" genannt (viele Freiheitsgrade, möglichst „groß" im Vgl. zum System: Umgebung soll nicht durch System beeinflußt sein → „Bad") von Interesse sind nur Systemoperatoren / Observable

nicht Badobservable

3.1. Statistischer Operator (Dichteoperator)

Gesamtwellenfunktion $|\chi\rangle$ des Gesamtsystems

$$|\chi\rangle = \sum_{n,b} c_{nb}(t)\, \underline{|n\rangle|b\rangle}$$ Produktbasis, χ kann nach Basis entwickelt werden

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

$$H_B\,|b\rangle = \varepsilon_b\,|b\rangle$$ isoliertes Bad

$|\chi\rangle$ enthält zu viel Info, Bad ist uninteressant:

suche Erwartungswert von Systemobservablen O_S

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

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

O_S wirkt nicht auf $|b\rangle$

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

$$= \sum_{nn'} \underbrace{\sum_b c^*_{n'b}\, c_{nb}}_{\varrho_{nn'}\ \text{„Dichtematrix"}} \underbrace{\langle n'|\,O_S\,|n\rangle}_{\text{Matrixelemente von Systemoperator}}$$

- Info über Umgebg. / Bad ist nur in b-Summe zu finden

- Matrix ist hermitesch, kann also auch diagonalisiert werden

Angaben zu $\rho_{nn'}$:

(i) Diagonalelemente gegeben durch $|c_{nb}|^2$

$|c_{nb}|^2 \in [0,1]$, denn das sind Wahrscheinlichkeiten, System in $|b\rangle|n\rangle$ zu finden

(ii) $\sum_{n,b} |c_{nb}|^2 = \sum_n \rho_{nn} = 1$

(Summe über alle Wahrscheinlichkeiten)

$\rightarrow$ Spur der Dichtematrix $= 1$

(iii)

$\rho_{nn'}$ ist offensichtlich Matrix die vom System abhängt und es muß ein dieser Matrix zugeordneter Operator existieren:

$$\langle \chi | O_s | \chi \rangle = \sum_{nn'} \rho_{nn'} \cdot O^s_{n'n}$$

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

mit $\underline{1} = \sum_{n'} |n'\rangle\langle n'|$

$$\langle O_s \rangle = \sum_n \langle n | \rho\, O_s | n \rangle$$

$$= Sp\,(\rho(t)\, O_s)$$

ρ wird als statistischer Operator eingeführt.

und der Erwartungswert in der Statistik wird mit

$$\boxed{\langle O_s \rangle = sp\,(\rho(t)\, O_s\,)}$$ berechnet.

$$sp\,(\dots) = \sum_n \langle n | \dots | n \rangle$$ Def. der Spur

ersetzt $\langle O_s \rangle = \langle \psi_s | O_s | \psi_s \rangle$ aus QM I

3.2. Eigenschaften d. statistischen Operators

stat. Operator enthält die Umgebungseigenschaften

a) in Eigendarstellung von ρ

$$\rho = \sum_i w_i \underbrace{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}_{\text{Systemwellenfunktion aus}}$$ muß existieren

$$i\hbar\,|\dot{\psi}_i\rangle = H\,|\psi_i\rangle$$

b) Interpretation von ρ und deren Wirkung auf O_s

$$\langle O_s \rangle = \mathrm{sp}(\rho\, O_s) = \sum_u \langle u | \rho\, O_s | u \rangle$$

$$= \sum_u \overbrace{\langle u | \underbrace{\sum_i w_i\, |\psi_i\rangle \langle \psi_i|}_{\rho}}^{\text{Zahlen}} O_s | u \rangle$$

$$= \sum_u \langle \psi_i | O_s | u \rangle \underline{\langle u |} \sum_i w_i | \psi_i \rangle$$

$$\boxed{\langle O_s \rangle = \sum_i w_i \langle \psi_i | O_s | \psi_i \rangle}$$

w_i : diagonalisierte Dichtematrix

$\sum_i w_i = 1$ (Diagonalisierung spurerhaltend)

ebenso: $w_i \in [0,1]$

In der statistischen Physik wird mit $\sum_i$ über ein Ensemble $\{|\psi_i\rangle\}$ mit der Wahrscheinlichkeitsverteilung w_i <u>noch einmal</u> über die Quantenerwartungswerte $\langle \psi_i | O_s | \psi_i \rangle$ gemittelt. Dies resultiert aus Umgebung.
„Scharmittel". Vorstellbar auch als Zeitmittel
(zeitlicher Durchlauf aller Zustände i).

Zentrale Aufgabe der Statistik ist w_i's zu ermitteln

c) Schrödinger Bild: Zeitabhängigkeit ist in $\Psi_i(t)$

w_i sind einmal fest festgelegt

d) Grenzfall <u>reiner</u> Zustand: $|\Psi_{i0}\rangle$:

$$w_{i0} = 1 \,, \quad \text{alle and. } w_i = 0$$

$$\langle O_s \rangle = sp(\rho\, O_s) = sp\big(\underbrace{|\Psi_{i0}\rangle\langle\Psi_{i0}|}_{\rho_{rein}}\, O_s\big)$$

$$= \sum_n \underbrace{\langle n|\Psi_{i0}\rangle}\langle\Psi_{i0}|\, O_s\, |n\rangle$$

$$\underline{\underline{\langle O_s\rangle_{rein} = \langle\Psi_{i0}|\, O_s\, |\Psi_{i0}\rangle}} \qquad \checkmark_{\text{QM I}}$$

e) <u>gemischter</u> Zustand:

i.a. mehrere $w_i \neq 0$

f) <u>Beispiele</u>

Zweizustandssystem Photon mit Polarisation $|\uparrow\rangle, |\rightarrow\rangle$

(i) allgemeinster reiner Zustand:

$$|\Psi_{i0}\rangle = a\,|\rightarrow\rangle + b\,|\uparrow\rangle$$

$$|a|^2 + |b|^2 = 1$$

$$\rho_{rein} = |\psi_{10}\rangle\langle\psi_{10}|$$

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

$$= aa^*\,|\rightarrow\rangle\langle\rightarrow| + ab^*\,|\rightarrow\rangle\langle\uparrow|$$

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

$$\hookrightarrow \quad \rho^{rein}_{nn'} = \begin{pmatrix} |a|^2 & ab^* \\ a^*b & |b|^2 \end{pmatrix}$$

$|\rightarrow\rangle$, $|\uparrow\rangle$

$n=1$ $\quad n=2$

(ii) gemischte Zustand

$$\rho = \sum_i w_i \underbrace{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}_{\text{wird aufgebaut aus reine Zuständen}}$$

<u>Bsp</u>: 2 reine Zustände überlagern

1) $a=1,\ b=0 \rightarrow |\rightarrow\rangle \qquad w_1 = \frac{1}{3}$

2) $a=0,\ b=1 \rightarrow |\uparrow\rangle \qquad w_2 = \frac{2}{3}$

alle and. $w_i(a,b) = 0$

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

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

g) Kriterium zur Unterscheidung zwischen rein u. gemischt:

wenn $\mathrm{Spur}(\rho^2) = 1 \Rightarrow$ reiner Zustand

(technisch: $\sum_n \langle n|\rho^2|n\rangle = \sum_{n,m} \langle n|\rho|m\rangle\langle m|\rho|n\rangle$

$$= \sum_{n,m} \rho_{nm}\rho_{mn})$$

wenn $\mathrm{Spur}(\rho^2) < 1 \Rightarrow$ gemischter Zustand

3.3. Dynamik d. statist. Operators

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

mit $i\hbar |\dot{\psi}_i\rangle = H|\psi_i\rangle \quad | \cdot \langle\psi_i| w_i$ von rechts

$-i\hbar \langle\dot{\psi}_i| = \langle\psi_i|H \quad | \; w_i|\psi_i\rangle \cdot$ von links

Differenz bilden

$$i\hbar\, \partial_t \left\{ w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right\} = w_i \left(H |\psi_i\rangle\langle\psi_i| - |\psi_i\rangle\langle\psi_i| H \right)$$

Summe über i nehmen:

$$\boxed{i\hbar\, \partial_t \rho = [H, \rho]}$$

Liouville von Neumann-Gleichung

Bewegungsgleichung d. statistischen Operators ρ,
ersetzt die Schrödingergleichung in der statistischen Physik.

3.4. Bewegungsgleichungen d. Dichtematrix

Dichtematrix $\rho_{nn'}$ nötig, weil $\langle O_S \rangle = \sum_{nn'} \underline{\underline{\rho_{nn'}}}\, O^S_{nn'}$, $\rho_{nn'} = \rho_{nn'}(t)$

Diagonalelemente: ρ_{nn}

$$i\hbar \dot\rho = [H, \rho] \qquad \Big|\ \langle n| \cdot |n\rangle$$

$$i\hbar\, \dot\rho_{nn} = \langle n| (H\rho - \rho H) |n\rangle = \sum_m \left(H_{nm}\, \rho_{mn} - \rho_{nm}\, H_{mn} \right)$$

n'

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

Nichtdiagonalelemente $\rho_{nn'}$

$$\boxed{i\hbar\, \dot\rho_{nn'} = \sum_m \left(H_{nm}\, \rho_{mn'} - \rho_{nm}\, H_{mn'}\right)}$$

Dichtematrixgleichungen

a/ Interpretation d. Dichtematrix

QM I: wenn System Zustand ψ ist, so ist

$\langle\psi|\underline{n\rangle\langle n}|\psi\rangle = |\langle n|\psi\rangle|^2$

die Wahrscheinlichkeit System in $|n\rangle$ zu finden

da $\langle\, \underline{|n\rangle\langle n|}\,\rangle$, kann also $|n\rangle\langle n|$

als Operator der entsprechenden Wahrscheinlichkeit

aufgefasst werden

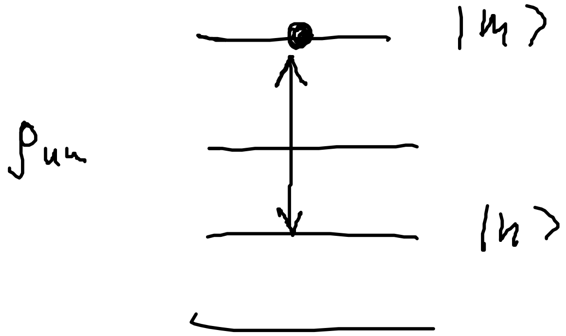
Statistik: $\langle\psi|\, n\rangle\langle n|\,\psi\rangle \longrightarrow sp\,(\rho\, |n\rangle\langle n|)$

$$= \sum_m \langle m|\,\rho\, |n\rangle\underbrace{\langle n|\, m\rangle}_{\delta_{nm}} = \rho_{nn}$$

Die Diagonalelemente ρ_{nn} d. statistischen Op. ρ

bedeuten die Wahrscheinlichkeit das System

im Zustand $|n\rangle$ zu finden



ρ_{mm} : Wahrscheinlichkeit System in Zustand $|m\rangle$ zu finden

ρ_{nm} : Übergangswahrscheinlichkeits-amplitude zwischen $|n\rangle$ und $|m\rangle$

Zusammenfassung d. Standes

a) QM $\langle\psi|O_s|\psi\rangle \xrightarrow{\text{statistisch}} Sp(\rho O_s) = \sum_{nn'} \rho_{nn'} O^S_{n'n}$.

b) $\rho_{nn'}$ bestimmt d. Dichtematrixgleichungen (DGen) lineares Gleichungssystem, bestimmt durch H_{ij}

c) zur Bestimmung d. Lösg. $\rho_{nn'}(t)$ sind Anfangsbedingungen nötig, diese sind durch die Umgebung festgelegt

d) Aufgaben d. stat. Physik:

- Festlegung der AB, Gleichgewichtsstatistik
- Lösg. d. DM-Gleichungen, Nichtgleichgewicht