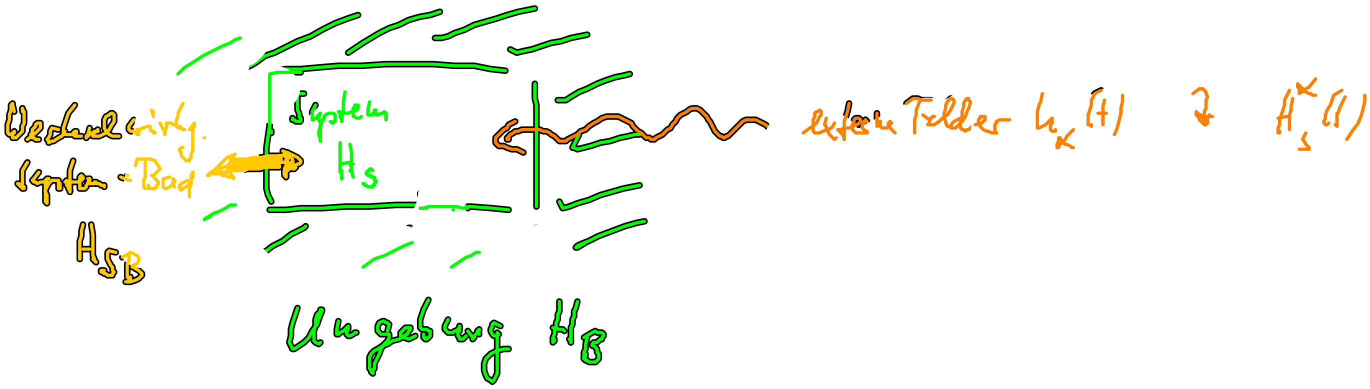
3. Wechselwirkung von System und Umgebung:

statistischer Operator statt Wellenfunktion

≙ Wahrheit, aber eben nicht die ganze 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 - externen 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

$$|\chi\rangle = \sum_{n,b} c_{nb}(t)\, |n\rangle |b\rangle$$ 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 viele 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 $\langle b|b'\rangle = \delta_{bb'}$

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

$\varrho_{nn'}$ „Dichtematrix"
- Info über Umgebg. / Bad ist nur in b-Summe zu finden

- Matrix ist hermitesch, kann also auch diagonalisiert werden

<u>Angaben zu $\rho_{nn'}$</u>:

(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)

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

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

$$= \mathrm{Sp}\,(\rho(t)\, O_S)$$

ρ wird als statistischer Operator eingeführt.

und der Erwartungswert in der Statistik wird mit

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

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

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

3.2. Eigenschaften d. statistischen Operators

stat. Operator erhält 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

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

$$= \sum_n \overbrace{\langle n | \textstyle\sum_i w_i}^{\text{Zahlen}} \underbrace{|\psi_i\rangle \langle \psi_i|}_{\rho} O_s | n \rangle$$

$$= \sum_n \langle \psi_i | O_s \underline{| n \rangle \langle n |} \sum_i w_i | \psi_i \rangle$$

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

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) Schrödingerbild: Zeitabhängigkeit ist in $\psi_i(t)$

w_i sind einmal fest festgelegt

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

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

$$\langle O_S\rangle = sp(\rho O_S) = sp\big(\underbrace{|\psi_{i0}\rangle\langle\psi_{i0}|}_{\rho_{rein}} O_S\big)$$

$$= \sum_n \langle n|\psi_{i0}\rangle\langle\psi_{i0}|O_S|n\rangle$$

$$\underline{\underline{\langle O_S\rangle_{rein} = \langle\psi_{i0}|O_S|\psi_{i0}\rangle}} \qquad \checkmark_{QM\ I}$$

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

$u=1$ $\quad u=2$

(ii) gemischter Zustand

$$\rho = \sum_i w_i \underbrace{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}$$

wird aufgebaut aus reinen Zuständen

Bsp: 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 anderen $w_i(a,b) = 0$

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

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

g) Kriterium zur Unterscheidung zwischen rein u. gemischt:

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

$$\left(\text{technisch: } \sum_n \langle n|\rho^2|n\rangle = \sum_{n,m} \langle n|\rho|m\rangle\langle m|\rho|n\rangle = \sum_{n,m} \rho_{nm}\rho_{mn} \right)$$

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

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

Differenz bilden

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

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 $\rho_{nn'}$

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

Dichtematrixgleichung

a/ Interpretation d. Dichtematrix

QM I: wenn System Zustand Ψ ist, so ist

$$\langle \Psi | n \rangle \langle n | \Psi \rangle = |\langle n | \Psi \rangle|^2$$

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

da $\langle\, |n\rangle\langle n|\, \rangle$, kann also $|n\rangle\langle n|$

als Operator der entsprechenden Wahrscheinlichkeit

aufgefasst werden

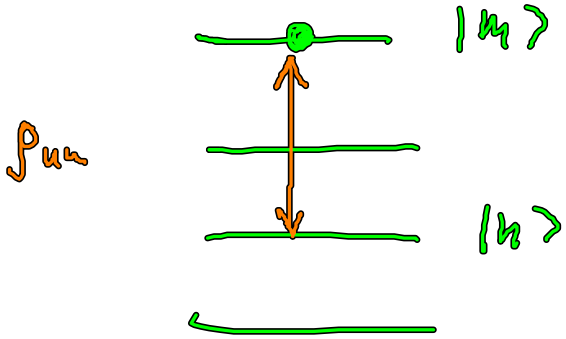
Statistik: $\langle \Psi | n \rangle \langle n | \Psi \rangle \longrightarrow \mathrm{Sp}\left(\rho\, |n\rangle\langle n| \right)$

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

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} : Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude zwischen $|n\rangle$ und $|m\rangle$

Zusammenfassung d. Stands

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

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

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

d) Aufgabe d. stat. Physik :

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