2.3 Quantenmechanische Gleichgewichtsverteilungen

Mikrozustände:

klass. Zustandsraum Γ $\longrightarrow$ quantenmech. Zustandsraum $\mathcal{H}$

$\xi \in \Gamma \subseteq \mathbb{R}^{6N}$

$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ Hilbertraum

Zustandsvektor ("ket")

bra-c-ket

Basis (vollständiges ONS): $|\alpha\rangle$

$\langle\alpha|\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}$ Orthonorm.

$\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1$

$|\psi\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle$ Entw.

bra-ket: Skalarprodukt

$\langle \underline{r}|\psi\rangle = \psi(\underline{r})$ Ortsdarstell.

Wellenfkt

Mikroobservable

klass. Phasenraumfkt. $\longrightarrow$ qm. Operatoren (linear, hermitesch)

$M: \Gamma \to \mathbb{R}$

z.B. Ham. fkt.

$\hat{M}: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ $\quad \hat{M} = \hat{M}^+$

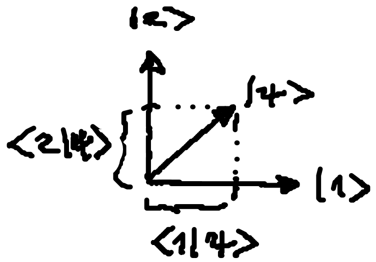
kommutieren i.a. nicht

$\boxed{\text{Quantisierung = Aufstellung von Vertauschungsrelationen}}$

<u>Maximalmessung</u>: Messung eines vollst. Satzes vertauschbarer Observablen $\Rightarrow |\alpha\rangle$

Messwerte: $M(\xi) \longrightarrow M_\alpha \in \mathbb{R}$ **Eigenwert** im Eigenzustand $|\alpha\rangle$

$$\hat{M}|\alpha\rangle = M_\alpha |\alpha\rangle$$



Spektraldarstellung

$$\hat{M} = \sum_\alpha \hat{M}|\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_\alpha M_\alpha \underbrace{|\alpha\rangle\langle\alpha|}_{\hat{P}_\alpha}$$

„**Projektionsoperator**" auf $|\alpha\rangle$

$$|\psi\rangle = |1\rangle\langle 1|\psi\rangle + |2\rangle\langle 2|\psi\rangle = \sum_\alpha \underbrace{|\alpha\rangle\langle\alpha|}_{\hat{P}_\alpha}\psi\rangle$$

Observable: „Ist das System im Zustand $|\alpha\rangle$?"

quantenmech. Erwartungswert einer Messung:

(i) $|\psi\rangle$ heißt **reiner Zustand** (Vektorzustand)

Wahrsch. für das Resultat $|\alpha\rangle$ im Zustand $|\psi\rangle$:

$$|\langle\alpha|\psi\rangle|^2 = \langle\psi\underbrace{|\alpha\rangle\langle\alpha|}\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_\alpha|\psi\rangle = P_\alpha$$

($|\langle \underline{r}|\psi\rangle|^2$ Aufenth. w. dichte)

Erwartungswert von $\hat{M}$ im reinen Zustand $|\psi\rangle$:

$$\langle\hat{M}\rangle = \langle\psi|\underset{1}{\hat{M}}|\psi\rangle = \sum_\alpha \underbrace{\langle\psi|\hat{M}|\alpha\rangle}_{1}\langle\alpha|\psi\rangle$$

$$= \sum_{\alpha\alpha'} \langle\psi|\alpha'\rangle\langle\alpha|\psi\rangle \underbrace{\langle\alpha'|\hat{M}|\alpha\rangle}_{\delta_{\alpha'\alpha} M_\alpha}$$

falls $|\alpha\rangle$ Eigenbasis zu $\hat{M}$

$$= \sum_\alpha \langle\psi|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle \; M_\alpha = \sum_\alpha P_\alpha M_\alpha$$

Schreibweise mit Projektor auf Zustand $|\psi\rangle$

$$\langle\hat{M}\rangle = \sum_\alpha \langle\alpha\underbrace{|\psi\rangle\langle\psi|}_{\hat{P}_\psi}\hat{M}|\alpha\rangle = \sum_\alpha \langle\alpha|\hat{P}_\psi\hat{M}|\alpha\rangle$$

$$= \mathrm{tr}\,(\hat{P}_\psi\hat{M}) = \mathrm{tr}\,(\hat{M}\hat{P}_\psi)$$

<u>Def.</u>: $\mathrm{tr}\,\hat{X} := \sum_\alpha \langle\alpha|\hat{X}|\alpha\rangle$ in einer <u>beliebigen</u> Basis $|\alpha\rangle$

<u>Spur</u> eines Operators (tr = trace = Spur)

<u>Satz</u>: Die Spur ist invariant bei Basiswechsel

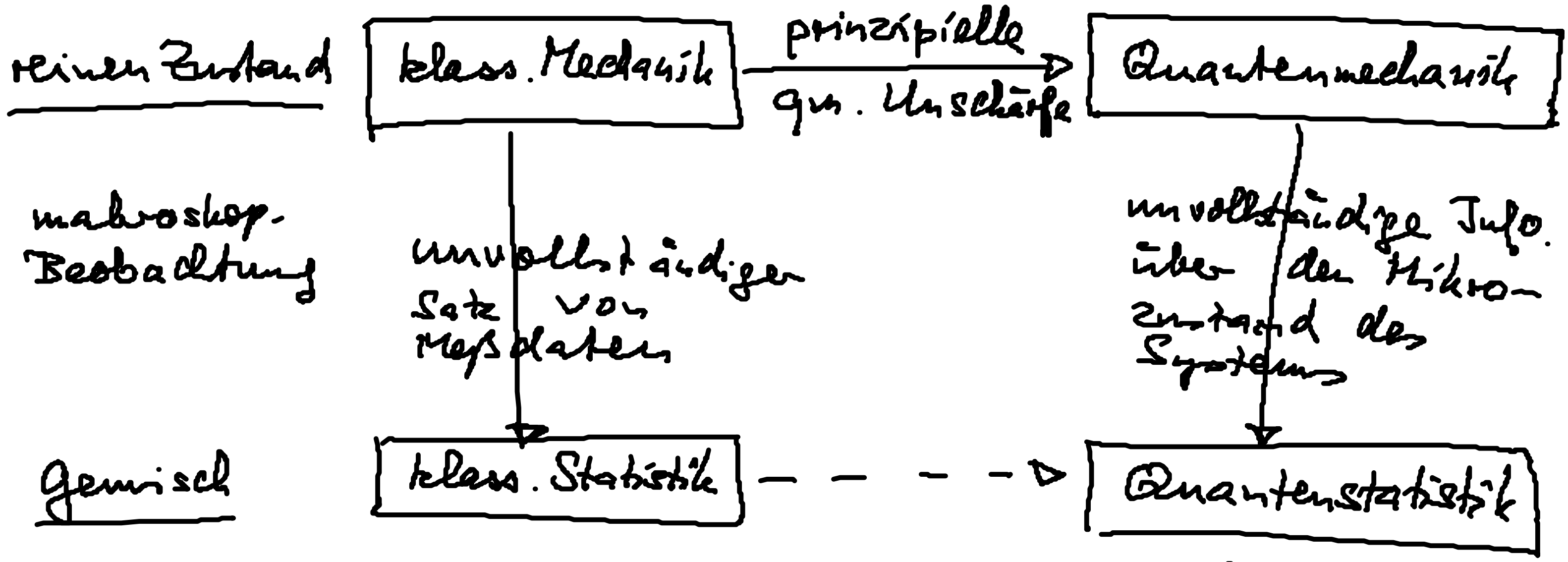
Beweis: unitäre Trafo einer Basis

$$\sum_\alpha \langle\alpha|\hat{X}|\alpha\rangle = \sum_{\alpha\beta\beta'} \langle\alpha|\beta\rangle\langle\beta|\hat{X}|\beta'\rangle\langle\beta'|\alpha\rangle$$

$$= \sum_{\beta\beta'} \langle\beta|\hat{X}|\beta'\rangle \underbrace{\sum_{\alpha} \langle\beta'|\alpha\rangle\langle\alpha|\beta\rangle}_{\langle\beta'|\beta\rangle = \delta_{\beta'\beta}} = \sum_\beta \langle\beta|\hat{X}|\beta\rangle \qquad \square$$

(ii) <u>Quantenmech. Gemisch</u>

[Eugen Fick, Grundlagen der QM, Kap. 7]



(A) qm. Wahrsch. aussagen (prinzipielle Unschärfe)
W. amplitude $\langle\alpha|\psi\rangle$

zus. Statistik ↓

(B) <u>unvollst. Info über Mikrozustand</u>

(z. B. nach vollst. Messung in $|\psi\rangle$ wird vom Messerg. nicht Kenntnis genommen)

Mikrozust. $|\alpha\rangle$ ⟶ sample set der Zufallsvar.

P_α Wahrscheinl. verteil.

$$\langle \hat{M} \rangle = \sum_\alpha P_\alpha \underbrace{\langle \alpha | \hat{M} | \alpha \rangle}_{\text{qm. Erwart.wert im reinen Zustand } |\alpha\rangle} \quad \text{Erwartungswert}$$

$$= \sum_{\alpha\beta} P_\alpha \langle \alpha | \hat{M} | \beta \rangle \langle \beta | \alpha \rangle$$

$$= \sum_{\beta\alpha} \langle \beta | \underbrace{\alpha \rangle P_\alpha \langle \alpha |}\hat{M} | \beta \rangle$$

$$= \sum_\beta \langle \beta | \hat{\varrho} \hat{M} | \beta \rangle$$

$$\langle \hat{M} \rangle = tr(\hat{\varrho}\hat{M})$$ mit dem <u>statistische Op.</u> (Dichtematrix $\hat{\varrho}_{\alpha\beta}$)

$$\boxed{\hat{\varrho} = \sum_\alpha P_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_\alpha P_\alpha \hat{P}_\alpha}$$

Überlagerung von Projektoren $\hat{P}_\alpha$ mit statist. gewichten P_α.

<u>Bem.</u>: <u>reine Zustände</u> → kohärente Überlagerung von Wahrscheinl.-amplitude

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle$$

$$\langle \hat{M} \rangle = \sum_{\alpha\alpha'} \langle \psi | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{M} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \psi \rangle$$

komplexe Z.
qm. Phase

⇓

qm. <u>Interferenzterme</u>, falls $\hat{M}$ nichtdiagonal in $|\alpha\rangle$

<u>Gemisch</u> → inkohärente Überlagerung von reinen Zuständen

$$\hat{\varrho} = \sum_\alpha P_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

$$\langle \hat{M} \rangle = \sum_\alpha P_\alpha \langle\alpha|\hat{M}|\alpha\rangle \Rightarrow \text{keine qm. Interferenz}$$

<u>Normierung</u> des statist. Op.:

$$\mathrm{tr}\,\hat{\varrho} = \sum_{\beta\alpha} \langle\beta|\alpha\rangle P_\alpha \underbrace{\langle\alpha|\beta\rangle}_{\delta_{\alpha\beta}} = \sum_\alpha P_\alpha \overset{!}{=} 1$$

Darstellung reiner Zustände $|\psi\rangle$: $\boxed{\hat{\varrho} = |\psi\rangle\langle\psi|}$

<u>Projektor</u> $\hat{P}_\psi$

$$\Rightarrow \boxed{\langle \hat{M} \rangle = \mathrm{tr}(\hat{\varrho}\hat{A})}$$

einheitl. Darstellung!

<u>NB</u>: Math. Formulierung des Zustandsbegriffs:
(klass + qm)

Zustand = normiertes, pos. lin. Funktional auf der Algebra $\mathcal{M}$ der Observablen:

$$\varrho: \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$$
$$\hat{M} \mapsto \mathrm{tr}(\hat{\varrho}\hat{M}) = \langle\hat{M}\rangle$$

reiner Zustand = Extremalpkt. der konvexen Menge der Zustände