VII Etwas abgehobenere Methoden

1. Motivation

QM als stochastische Theorie:

Wahrscheinlichkeiten p_n Zustand n einzunehmen

→ Mittelwerte, Standardabweichungen

$\langle O \rangle$, $\langle (\Delta O)^2 \rangle$ etc.

+ Überlagerungszustände usw.

a) bisher Heisenberg Bewegungsgleichg. f. Mittelwerte

$$\langle \underline{O}(t) \rangle = \mathrm{Sp}\left(\rho(t_0)\, \hat{O}(t) \right)$$

↑ über Heisenbergbeweggl. : $\langle \dot{\hat{O}} \rangle \sim \langle [H, \hat{O}] \rangle$

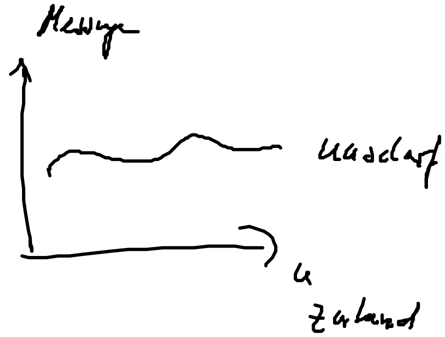
Bsp: mittlere Photonzahl Laser $n_{ph}(t)$

Sinnvoll wenn Verteilg. schmal

n

Zustand

im Gegensatz:



b) von Neumanngl. f. statistische Operator $\rho(t)$

Wahrscheinlichkeit p_n das System im Zustand $|n\rangle$ zu finden

Bsp: Photonverteilg: p_n als Wahrscheinlichkeit, n Photonen zu finden

$$\langle \underline{O}(t)\rangle = sp\left(\rho(t)\,\underline{O}\right) = \sum_n \langle n|\rho(t)\,\underline{O}|n\rangle$$

Schrödingerbild

$$= \sum_{n,m}\langle n|\rho\underbrace{|m\rangle\langle m|}_{1}O|n\rangle$$

wenn $\rho|m\rangle = p_m|m\rangle$ gegeben

$$= \sum_n p_n(t)\langle n|O|n\rangle$$

Mittelwert durch p_n gegeben

c/ Vielteilchenproblematik

in (a) als auch in (b) tritt Vielteilchenhierarchie auf

$$\dot{\langle O_1 \rangle} \sim \langle O_1 O_2 \rangle$$

$$\dot{\rho}_n \sim \langle \rho_{O_1} \rho_{O_2} \rangle$$

Näherungen sind nötig um Gleichungen zu schließen

Operatorgleichungen der Form treten auf

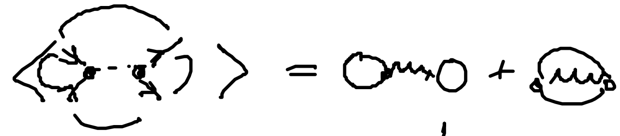
$$\underline{O}(t) = \underline{O}(t_0) + \int_{-\infty}^{t} dt' \, \underline{W}(t', t) \, \underline{O}(t')$$

<u>Lösung</u>: $\underline{O}(t) = \sum_n \underline{A}_n(t)$ als Störungsreihe

kann nicht exakt aufsummiert werden

<u>Ziel</u>: teilweise Summanden aufsummieren um ∞ Ordnung in Störungstheorie zu haben

grafisch Rechnen mit Feynmandiagrammen

z.B. $\langle W(t') \rangle =$ 

Coulomb

Terme

2. Dichtematrixtheorie

von Neumann Gl'g:

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho] \equiv -i L \rho$$

L als Superoperator der auf Operatoren des Hilbertraumes wirkt

$$L \bullet = \frac{1}{\hbar}[H, \bullet]$$

zeitunabhängiges H : $\rho(t) = e^{-iL(t-t_0)} \rho(t_0) = ?$

$$\boxed{\text{Behauptg: } \rho(t) = e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)} \rho(t_0)\, e^{i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)}}$$

Beweis: $\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} H \rho(t) + i \rho(t) \frac{H}{\hbar} = -iL\rho$

Vorgriff auf zeitabhängige $H(t)$:

$$\rho(t) = e_+^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H(t')} \rho(t_0)\, e_+^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H(t')}$$

Zeitgeordnete Exponentialfkt. (spitze)

(L : Liouville operator)

Tetradendarstellung

a/ Definition

$$\langle i | L X | j \rangle = \frac{1}{\hbar} \Big(\langle i | H \underset{\sum_n |n\rangle\langle n|}{\wedge} X | j \rangle - \langle i | X H | j \rangle \Big)$$

Matrixdarstellg. Operator

$$X_{ij} \equiv \langle i | X | j \rangle$$

$$= \frac{1}{\hbar} \Big(\sum_n H_{in} X_{nj} - \sum_m X_{im} H_{mj} \Big)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} \underbrace{\big(H_{in} \delta_{jm} - H_{mj} \delta_{in} \big)} X_{nm}$$

$$\equiv$$

$$\boxed{(L X)_{ij} = \sum_{n,m} \underbrace{L_{ijnm}}_{\text{Tetrade}} X_{nm}}$$

Art d. Matrixmultiplikation

b/ Hintereinanderausführg. v. Tetraden

$$(L_1 L_2)_{mn\,m'n'} = \sum_{kl} (L_1)_{mn\underline{\underline{kl}}} (L_2)_{\underline{\underline{kl}}\,m'n'}$$

c) Identität

$$(\underline{1} \cdot L)_{mn\,m'n'} = L_{mn\,m'n'}$$

$$\underline{1}_{mn\,m'n'} = \delta_{mm'}\,\delta_{nn'}$$

d) Exponentialfunktion

e^{-iLt} ist auch ein Tetradoperator

$$(e^{-iLt})_{mn\,m'n'} = \left(e^{-i\frac{tH}{\hbar}}\right)_{mm'} \left(e^{i\frac{tH}{\hbar}}\right)_{n'n}$$

sofort ablesbar aus Formel f. $\rho(t)$ oben

2.2. Zeitunabhängige H

2.2.1. Systeme mit bekannten Eigenenergien

von Neumanngl. $\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho]$

$H|n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$ bekannt

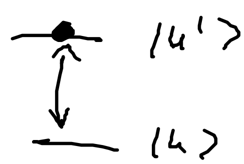
$$\underbrace{\langle n|\dot{\rho}|n\rangle}_{\substack{\text{Wahrscheinlichkeit} \\ \text{System in } |n\rangle \text{ zu finden}}} = -\frac{i}{\hbar}\Big(\underbrace{\langle n|H}_{\varepsilon_n\langle n|}\rho|n\rangle - \langle n|\rho \underbrace{H|n\rangle}_{\varepsilon_n|n\rangle}\Big)$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\,\varepsilon_n\left(\rho_{nn} - \rho_{nn}\right) = 0$$

↓

$\dot{\rho}_{nn} = 0$ $\quad$ ρ_{nn} ist zeitlich konstant

→ ρ ist statistischer Gleichgewichtsoperator
Bsp. in statist. Physik (kanonisch etc.)



$$\boxed{\rho_{nn'} = 0}$$

ρ_{nn} = klassische Größe (quasi)

$\rho_{nn'}$ = quantenmech. Interferenze

2.2.2. System mit Wechselwirkung.

$$H = H_0 + V$$

H aus 2.2.1.

ww - freie System

exakt lösbar

bei $t = t_0$

ansetzen,

suche die

neuen Zustände / Wahrscheinlichkeit

die sich im Verlauf

der Zeit ausbilden

(Coulomb etc.)

modifiziert

ρ_u

gleichg. f. $\dot{\rho}_u = f(V)$

einfachster Ansatz: Ratengleichungen

(Mastergleichungen)

a/ Ableitung quasiklassischer Wahrscheinlichkeitsverteilungen: Mastergleichungen

Frage: kann man die von Neumanngl. auf ρ_{ii} reduzieren und

$\rho_{ij} \to 0$ setzen.

$$\dot{\rho} = -i L_0 \rho - i L_V \rho \quad \hat{=} \quad (H_0, V)$$

einsetzen

$$\rho(t) = \underbrace{e^{-iL_0(t-t_0)}\rho(t_0)}_{\text{homogene Lsg. } \rho(t_0)=\rho_0} - i\underbrace{\int_{t_0}^{t} dt'\, e^{-iL_0(t-t')} L_V\, \rho(t')}_{\text{inhomog. Lsg.}}$$

$$\dot\rho(t) = \underbrace{-iL_0\rho}_{①} \underbrace{-iL_V\, e^{-iL_0(t-t_0)}\rho_0}_{②} \underbrace{-L_V\int_{t_0}^{t} dt'\, e^{-iL_0(t-t')} L_V\, \rho(t')}_{③}$$

$\langle i|\rho|i\rangle$ bilden, denn Ziel: Wahrscheinlichkeitsverteilg. mit V zu finden

$H_0|i\rangle = \varepsilon_i|i\rangle$

$$\dot\rho_{ii}\Big|_{①} = -i\langle i|L_0\,\rho|i\rangle = 0$$

$$\dot\rho_{ii}\Big|_{②} = -i\langle i|L_V\, e^{-iL_0(t-t_0)}\rho_0|i\rangle = 0$$

statist. Operator vor Beginn der WW

$[H_0, \rho_0] = 0$

$$\dot\rho_{ii}\Big|_{③} = -\langle i|L_V\int_{0}^{t} dt'\, e^{-iL_0(t-t')} L_V\, \rho(t')|i\rangle$$

$t_0 = 0$

$t - t' \to s$ Variablensubstitution : $ds = -dt'$

$$= -\underline{\langle i | L_v} \int_0^t ds\, e^{-iL_0 s}\, \underline{L_v\, \rho(t-s) | i \rangle}$$

$$\Big\| \quad \cancel{\sum_{nl}} \left(L_v e^{-iL_0 s} L_v \right)_{ii,nl} \underbrace{\rho_{nl}(t-s)}_{\underbrace{\rho_n(t-s)\,\cancel{\delta_{nl}}}_{\text{Quanteninterferenzen vernachlässigt}}} \quad \Big\|$$

Quanteninterferenzen vernachlässigt

$$\dot{\rho}_{ii} = -\int ds \sum_n \left(L_v e^{-iL_0 s} L_v \right)_{\underline{iinn}} \rho_{nn}(t-s)$$

$$\sum_{n \neq i} (\quad)_{iinn}\, \rho_{nn} + (\quad)_{iiii}\, \rho_{ii} - \sum_n (\quad)_{iinn}\, \rho_{ii}$$

Summenregel: $\sum_n (\quad)_{iinn} = 0$ → „0“

$$\dot{\rho}_{ii} = -\int ds \sum_{n \neq i} \underbrace{\left(L_v e^{-iL_0 s} L_v \right)_{iinn}} \left(\rho_{nn}(t-s) - \rho_{ii}(t-s) \right)$$

$\equiv K_{iinn}$

beschreibt die Veränderg. ρ_{ii} durch WW V

Austausch v. Wahrscheinlichkeit