V II 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

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

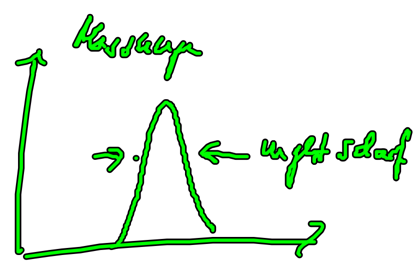
↑

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

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

Sinnvoll wenn

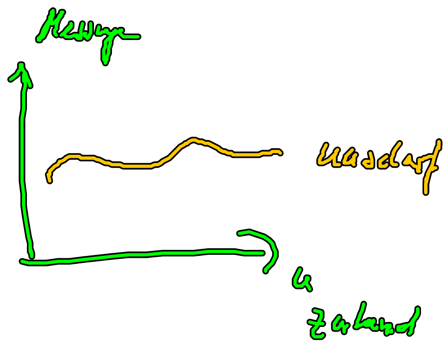
Verteilg. schmal



n

Zustand

im Gegensatz:



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

Wahrscheinlichkeit ρ_n das System in Zustand $|n\rangle$ zu finden

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

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

Schrödingerbild

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

wenn $\rho|m\rangle = \rho_m|m\rangle$ gegeben.

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

Mittelwert durch ρ_n gegeben

c) Vielteilchenproblematik

in (a) als auch in (b) treten Vielteilchenhierarchien auf

$$\langle \dot{O}_1 \rangle \sim \langle O_1 O_2 \rangle$$

$$\dot{\rho}_n \sim \langle \rho_n \rho_2 \rangle$$

Näherungen sind nötig um Gleichungen zu schließen

Operatorgleichungen der Form treten auf

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

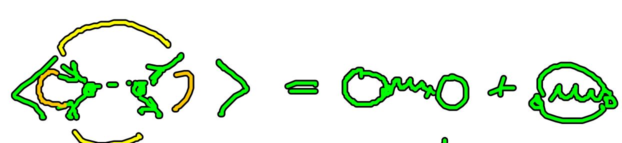
Lösung: $\underline{O}(t) = \sum_n \underline{A}_n(t)$ als Störungsreihe

kann nicht exakt aufsummiert werden

Ziel: teilweise Summanden aufsummieren um ∞ Ordnung in Störungstheorie zu haben

graphisch Rechnen mit Feynmandiagrammen

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



Coulomb

Fock

2. Dichtematrixtheorie

von Neumann Glchg:

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

$\mathcal{L}$ als Superoperator der auf Operatoren des Hilbertraums wirkt

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

zeitunabhängiges H: $\underbrace{\rho(t) = e^{-i\mathcal{L}(t-t_0)}\rho(t_0)}$ $= ?$

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

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

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 Exponential fkt. (später)

(L: Liouville operator)

Tetradendarstellung

a/ Definition

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

Matrixdarstellg. Operator

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

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

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

$$=$$

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

Art d. Matrixmultiplikation

b/ Hintereinanderausführg. v. Tetraden

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

c) Identität

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

$$\underline{1}_{mnm'n'} = \delta_{mm'} \delta_{nn'}$$

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

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

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

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

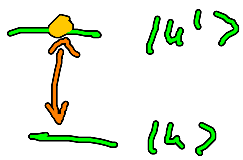
$$= -\frac{i}{\hbar}E_n(\rho_{nn} - \rho_{nn}) = 0$$

$\downarrow$

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

$\rightarrow \rho$ ist statistisch Gleichgewichtsoperator

Bsp. in statist. Physik (kanonisch etc.)



$\rho_{nn'} = 0$

ρ_{nn} = klassische Größe (quasi)

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

2.2.2. System mit Wechselwirkg.

$$H = H_0 + V$$

Ham 2.2.1.

ww-freie System

exakt lösbar

bei $t = t_0$

anschalte,

suche die

neuen Zustände / Wahrscheinlichkeit

die sich im Verlauf

der Zeit ausbilden

(Coulomb etc.)

modifiziert

ρ_{n}

Gleichg. f. $\dot{\rho}_{ii} = f(V)$

einfachster Ansatz: Ratengleichungen

(Mastergleichungen)

a/ Ableitung quasiklassischer Wahrscheinlichkeitsverteilungen: Mastergleichg.

<u>Frage</u>: kann man die von Neumanngl. auf ρ_{ii} reduzieren und

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

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

einsetzen

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

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

$\langle i|\rho|i\rangle$ 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 : $ds = -dt'$

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

$$\| \quad \sum_{ue} (L_V e^{-iL_0 s} L_V)_{ii,ue}\, \underbrace{\rho_{ue}(t-s)}_{\substack{\rho_u(t-s)\,\cancel{\delta_{ue}}}} \quad \|$$

Quanteninterferenzen vernachlässigt

Quantenkohärenzen vernachlässigt

$$\dot{\rho}_{ii} = -\int ds \sum_u \left(L_V e^{-iL_0 s} L_V \right)_{\underline{iiuu}} \rho_{uu}(t-s)$$

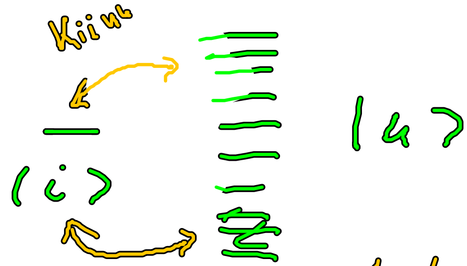
$$\sum_{u \neq i} (\quad)_{iiuu}\, \rho_{uu} + (\quad)_{iiii}\, \rho_{ii} - \sum_u (\quad)_{iiuu}\, \rho_{ii}$$

Summenregel: $\sum_u (\quad)_{iiuu} = 0$ $\longrightarrow$ „0"

$$\dot{\rho}_{ii} = -\int ds \sum_{u \neq i} \underbrace{\left(L_V e^{-iL_0 s} L_V \right)_{iiuu}} \left(\rho_{uu}(t-s) - \rho_{ii}(t-s) \right)$$

$\equiv K_{iinn}$

beschreibt die Verändg. ρ_{ii} durch WW V



Austausch v.
Wahrscheinlichkeit