in

# Kap. IV. Zustandsbegriff

$|\psi\rangle$ Zustand

Erwartungswerte $\langle A \rangle_{|\psi\rangle} \equiv \langle\psi|A|\psi\rangle$

üblicherweise $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, normiert

Phase $e^{i\alpha}|\psi\rangle$ ändert nicht an $\langle A \rangle_{|\psi\rangle}$

$\alpha \in \mathbb{R}$

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi \underbrace{e^{-i\alpha} A e^{i\alpha}}_{1} \psi\rangle$$

Äquivalenzklassen von <u>Strahlen</u> $e^{i\alpha}|\psi\rangle$, mit Phasenfaktoren $e^{i\alpha}$

$\Rightarrow$ dieselben Erwartungswerte.

## 4.1.1. Reine Zustände

wollen die Phasenfaktoren loswerden.

Anstatt $|\psi\rangle$: benutze

$$P_{|\psi\rangle} \equiv \cancel{e^{i\alpha}}|\psi\rangle\langle\psi|\cancel{e^{-i\alpha}}$$

„Projektor auf den Zustand $|\psi\rangle$"

<u>Def.:</u> Ein Projektor $P$ ist ein Operator $P^2 = P$.

$$P_{|\psi\rangle}^2 = |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{1}\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi|$$

$$= P_{|\psi\rangle}$$

Phasenfaktor $e^{i\alpha}$ in $e^{i\alpha}|\psi\rangle$ kürzt sich raus.

Def: Ein reiner Zustand in einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ ist durch einen Projektor $P_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi|$, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ definiert.

Erwartungswert von $\hat{A}$ im Zustand $|\psi\rangle$,

$$\langle A\rangle_{|\psi\rangle} = \mathrm{Tr}\left(P_{|\psi\rangle}\hat{A}\right) = \mathrm{Tr}\left(|\psi\rangle\langle\psi| A\right)$$

trace (Spur)

Def: Die Spur $\mathrm{Tr}\,X$ eines Operators, gebildet mit einem VOS $\{|n\rangle\}$, ist

$$\mathrm{Tr}\,X \equiv \sum_n \langle n|X|n\rangle$$

Beispiel

$$\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ i & 3 \end{pmatrix} = 2+3=5$$

Die Spur ist basisunabhängig:
(Summe über die Diagonal-Matrixelemente).

$$\mathrm{Tr}\,X = \sum_n \langle n|X|n\rangle =$$

Basis $\{|\alpha\rangle\}$, $\underbrace{\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1}_{\text{Vollst. relation}}$

$$= \sum_{n\alpha} \langle n|X|\alpha\rangle\langle\alpha|n\rangle$$

$$= \sum_{n\alpha} \langle\alpha|n\rangle\langle n|X|\alpha\rangle$$

$$= \sum_\alpha \langle\alpha| \underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{1} X|\alpha\rangle$$

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

Die Spur ist invariant unter zyklischer Vertauschung, d.h.

$$\mathrm{Tr}\,AB = \mathrm{Tr}\,BA$$

$$\mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{B}\hat{C} = \mathrm{Tr}\,\hat{C}\hat{A}\hat{B} = \mathrm{Tr}\,\hat{B}\hat{C}\hat{A}.$$

Messgrösse

$$\langle A\rangle_{|\psi\rangle} = \mathrm{Tr}\,|\psi\rangle\langle\psi|A$$

$$= \sum \langle n|\psi\rangle\langle\psi|A|n\rangle$$

Zustand $= \sum_n^n \langle\psi|A|\underbrace{n\rangle\langle n}_{1}|\psi\rangle$

$= \langle\psi|A|\psi\rangle$

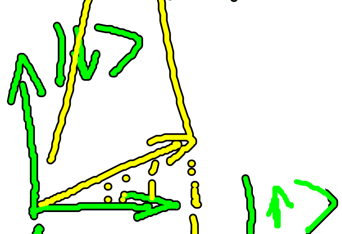
Beispiel: $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ Spin $\frac{1}{2}$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = |\uparrow\rangle$$

$$P_{|\psi\rangle} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix}$$

denn $\langle\uparrow|P_{|\psi\rangle}|\uparrow\rangle = \langle\uparrow|\uparrow\rangle\langle\uparrow|\uparrow\rangle = 1$

$\langle\uparrow|P_{|\psi\rangle}|\downarrow\rangle = \langle\uparrow|\uparrow\rangle\underbrace{\langle\uparrow|\downarrow\rangle}_{0}$




## 4.1.2. gemischte Zustände (Gemische)

Def: Über ein ON System im HR $\mathcal{H}$ mit VOS $\{|n\rangle\}$ liege nur unzureichende

Information vor:
Mit Wahrscheinlichkeit $p_n$ befinde sich das System im Zustand $|n\rangle$.
Die Menge $\{p_n, |n\rangle\}$ heißt <u>Ensemble</u> von reinen Zuständen.
Der Erwartungswert einer Observablen $\hat{A}$ ist dann

$$\langle A\rangle = \sum_n p_n \underbrace{\langle n|A|n\rangle}_{QM} .$$

mit Wahrscheinlichkeiten $p_n$, $\sum_n p_n = 1$

$$0 \le p_n \le 1 .$$

<u>Definition</u>: Der Dichteoperator (Dichtematrix) $\hat{\rho}$ eines Ensembles $(p_n, |n\rangle)$ ist

$$\hat{\rho} \equiv \sum_n p_n \underbrace{|n\rangle\langle n|}_{\text{reine Zustände}}$$

z.B. $\hat{\rho}_{\text{gemischt}} = \frac{1}{4}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{3}{4}|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$
$= \begin{pmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 3/4 \end{pmatrix}$

---

Nächsten Mittwoch (5.12.2007)

statt QM-Vorlesung
von $12^{00}$ (s.t.!) Vorstellungsvortrag
Neuberufung Astrophysik
hier (E-W 203)

---

$$\langle A \rangle = \sum_n p_n \langle n|A|n\rangle = \sum_{m,n} p_n \langle m|A|n\rangle \underbrace{\langle n|m\rangle}_{\delta_{nm}}$$

$$\langle n|A|n\rangle \Leftarrow \mathbb{1}$$

$$= \sum_m \langle m|A| \underbrace{\sum_n p_n |n\rangle\langle n|}_{\hat\rho} |m\rangle$$

$$= \mathrm{Tr}\, \hat A \hat\rho = \boxed{\mathrm{Tr}\, \hat\rho \hat A}$$

Erwartungswerte durch Spurbildung mit Dichteoperator

---

Allg.: $$\hat\rho = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|$$ diagonal in $|n\rangle$-Basis

Basiswechsel

$$|\alpha\rangle = \sum_n A_{\alpha n} |n\rangle$$

$$|n\rangle = \sum_\alpha B_{n\alpha} |\alpha\rangle; \quad \langle n| = \sum_{\alpha'} B^+_{n\alpha'} \langle \alpha'|$$

$$\Rightarrow \quad \hat{\rho} = \sum_{n\alpha\alpha'} p_n B_{n\alpha} |\alpha\rangle B^+_{n\alpha'} \langle\alpha'|$$

$$= \sum_{\alpha\alpha'} |\alpha\rangle\langle\alpha'| \underbrace{\sum_n p_n B_{n\alpha} B^+_{n\alpha'}}_{\equiv C_{\alpha\alpha'}}$$

$$= \sum_{\alpha\alpha'} C_{\alpha\alpha'} |\alpha\rangle\langle\alpha'|$$

## 4.2. Eigenschaften des Dichteoperators $\hat{\rho}$

Normierung: $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = \sum_m \sum_n \underbrace{\langle n| p_m |m\rangle}_{p_n \delta_{nm}} \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{nm}}$

$$= \sum_n p_n = \underline{1}\,.$$

Hermitizität: $\langle\alpha|\hat{\rho}|\beta\rangle = \sum_n p_n \langle\alpha|n\rangle\langle n|\beta\rangle$

$$= \sum_n p_n \langle n|\alpha\rangle^* \langle\beta|n\rangle^*$$

$$= \sum_n \left(p_n \langle\beta|n\rangle\langle n|\alpha\rangle\right)^*$$

$$= \langle\beta|\hat{\rho}|\alpha\rangle^* \Rightarrow \hat{\rho} = \hat{\rho}^+$$

Positivität: $\hat{\rho} = \sum_n \underbrace{p_n}_{\geq 0} |n\rangle\langle n|$

Es gilt $\langle\psi|\rho|\psi\rangle \geq 0$ (Aufgabe).

Charakterisierung: Ein hermitescher Operator $\hat{\rho}$ ist genau dann Dichteoperator zu einem Ensemble, wenn $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = 1$ und $\hat{\rho} \geq 0$ (pos. semidefinit)

Beweis: Sei $\rho \geq 0 \Rightarrow$ Zerlegung $\hat{\rho} = \sum_l \underbrace{\lambda_l}_{\geq 0} |l\rangle\langle l|$,

$\sum \lambda_l = 1$, die Darstellung

$\hat{\rho} = \sum_l \lambda_l |l\rangle\langle l|$ definiert

ein Ensemble $\{\lambda_l, |l\rangle\}$. ∎

Weiterhin gilt

Spin $\frac{1}{2}$, z.B.

$$\hat{\rho}_G = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 3/4 \end{pmatrix}, \quad \mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = 1$$

$$\rho_{rein} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\hat{\rho}_G \cdot \hat{\rho}_G = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 3/4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 3/4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1/16 & 0 \\ 0 & 9/16 \end{pmatrix}; \quad \mathrm{Tr}\,\hat\rho_G^2 = \frac{10}{16} < 1$$

während $\rho_{rein}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\mathrm{Tr}\,\rho_{rein} = \underline{1}$

$\hat\rho^2 = \hat\rho$, $\mathrm{Tr}\,\hat\rho^2 = 1$ : reiner Zustand.

$\hat\rho^2 \neq \hat\rho$, $\mathrm{Tr}\,\hat\rho^2 < 1$ : gemischter Zustand.

Ein reiner Zustand hat die Form $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$.

Spezialfall von $\rho = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|$

alle sind 0
bis auf einen (Fall $|\psi\rangle = |n_0\rangle$)

## 4.2.3. Thermische Zustände

In diesem Fall gilt

$$p_n = \frac{e^{-\frac{1}{k_B T} E_n}}{Z}$$

$E_n$: Energien zu $|n\rangle$, $\hat H |n\rangle = E_n |n\rangle$

Wärmebad mit Temperatur $T$, $k_B$ Boltzmann-Konstante

$$\hat{\rho} = \sum_n \frac{e^{-\frac{1}{k_B T} E_n}}{Z} |n\rangle\langle n|$$

$$= \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

(AUFGABE $\langle m| \dots |m'\rangle$)

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \hat{H}}$$

„Zustandssumme"

## Zeitentwicklung, Liouville-von-Neumann-Gleichung

SGl: $i\partial_t |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$$

$$U(t) = e^{-i\hat{H}t} \quad \text{Propagator}$$

(Zeitentwicklungsoperator).

Jetzt für Zustände $\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|$

$$\hat{\rho}(t) = \sum_n p_n |n(t)\rangle\langle n(t)|$$

$$= \sum_n p_n\, U(t)|n\rangle\langle n|U^\dagger(t)$$

$$= U(t)\,\hat{\rho}(t=0)\,U^\dagger(t)$$

$$i\partial_t \hat{\rho}(t) = \hat{H}\,U(t)\rho(0)U^+(t) - U(t)\rho(0)U^+(t)\hat{H}$$
$$= [\hat{H}, \hat{\rho}(t)].$$

Ausgangspunkt der Nichtgleichgewichts-Quantenstatistik

Def: Gleichgewichtszustand ist ein Zustand $\hat{\rho}$ mit
$$[\hat{\rho}, H] = 0.$$