2.3 Quantenmechanische Gleichgewichtsverteilungen

Mikrozustände

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

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

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

Zustandsvektor ('ket')

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

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

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

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

bra-ket: Skalarprodukt

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

Wellenfkt.

Mikroobservable:

klass. Phasenraumfkt. $\longrightarrow$ qm. Operatoren (linear, Hermite'sch)

$M : \Gamma \to \mathbb{R}$ $\qquad$ $\hat{M} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$

kommutieren $\qquad$ kommutieren i.a. nicht

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

<u>Maximalmessung</u>: Messung eines vollst. Satzes vertausch-

baren Observablen $\Rightarrow |\alpha\rangle$

<u>Messwerte</u> : $M(\xi) \to M_\alpha \in \mathbb{R}$ <u>Eigenwert</u> im Eigenzust. α

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

Spektraldarstellung:

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

Observable: „Ist das System im Zustand $|\alpha\rangle$?" $\hat{P}_\alpha$ <u>Projektionsop.</u> auf $|\alpha\rangle$

<u>qm. Erwartungswerte einer Messung</u> :

(i) $|\psi\rangle$ heißt <u>reiner Zustand</u> (Vektorzustand)

Wahrscheinl. für das Resultat $|\alpha\rangle$ im Zustand $|\psi\rangle$: (Maximalmessung)

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Spur eines Op. (tr = trace = Spur)

Satz: Die Spur ist invariant bei Basiswechsel

Beweis: unitäre Trafo einer Basis

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

$$= \sum_{\beta\beta'} \langle\beta|\hat{X}|\beta'\rangle \underbrace{\sum_\alpha \langle\beta'|\underbrace{\alpha\rangle\langle\alpha}_{1}|\beta\rangle}_{\langle\beta'|\beta\rangle = \delta_{\beta'\beta}} = \sum_\beta \langle\beta|\hat{X}|\beta\rangle$$

(ii) Quantenmech. Gemisch (Gemengezustand)

[Fick, Grundlagen der Quantenth., Kap. 7)

$$\begin{tikzcd}
\text{reiner Zustand} & \boxed{\text{klass. Mech.}} \arrow[r, "\text{prinzipielle}", "\text{qm. Unschärfe}"'] \arrow[d, "\text{unvollständiger Satz von Messdaten}"] & \boxed{\text{Quantenmechanik}} \arrow[d, "\text{unvollständige Information über den Mikrozust. des Systems}"] \\
\text{makroskop. Beobachtung} & & \\
\text{Gemisch} & \boxed{\text{klass. Statistik}} \arrow[r, dashed] & \boxed{\text{Quantenstatistik}}
\end{tikzcd}$$

(A) qm. Wahrscheinl. aussagen (prinzipielle qm. Unschärfe)

Wahrscheinl. amplitude $\langle\alpha|\psi\rangle$

$\downarrow$ zusätzl. Statistik

(B) unvollst. Information über den Mikrozust. des Systems

Basis der Mikrozustände $|\alpha\rangle \longrightarrow$ sample set der Zufallsereignisse

P_α Wahrscheinlichkeitsverteilung

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

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

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

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

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

mit dem statistischen Operator (Dichtematrix) $\hat{\varrho}_{\alpha\beta}$

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

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

Bem.: reine Zustände $\longrightarrow$ kohärente Überlagerung von Wahrscheinl. amplitude

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

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

$e^{-i\varphi}$ qm. Phasen $e^{i\varphi'}$

$\Rightarrow$ Interferenzterme, falls M nicht diagonal in $|\alpha\rangle$

Gemisch $\rightarrow$ inkohärente Überlagerung von reinen Zuständen

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

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

Normierung des statist. Op.:

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

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

Projektor $\hat{P}_\psi$

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

einheitliche Darstellung!

NB: Math. Formulierung des Zustandsbegriffs:
(klass. + qm.)

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

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

reiner Zustand = Extremalpkt. der konvexen Menge der Zustände