

^m
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 nichts an $\langle A \rangle_{|\psi\rangle}$

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} \equiv \langle \psi | \underbrace{e^{-i\alpha} A e^{i\alpha}}_1 | \psi \rangle$$

Äquivalenzklassen von Strahlen $e^{i\alpha} |\psi\rangle$,
 mit Phasenfaktoren $e^{i\alpha}$
 \Rightarrow dieselben Erwartungswerte.

4.1.1. Reine Zustände

wollen die Phasenfaktoren loswerden.

Anstatt $|\psi\rangle$: benutze

$$P_{|\psi\rangle} \equiv |\psi\rangle \langle \psi|$$

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

Def.: Ein Projektor P ist ein Operator

$$P^2 = P.$$

$$\begin{aligned} P_{|\psi\rangle}^2 &= |\psi\rangle \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{1} \langle \psi| = |\psi\rangle \langle \psi| \\ &= P_{|\psi\rangle} \end{aligned}$$

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 $P_{|\psi\rangle} \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ definiert.

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

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

\uparrow
trace (Spur)

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

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

↳ Beispiel

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

↳

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

$$\begin{aligned}
 \text{Tr} X &= \sum_n \langle n | X | n \rangle = \\
 & \quad \text{Basis } \{|d\rangle\}, \quad \frac{\sum_d \langle d | d \rangle = 1}{d} \\
 & \quad \text{Vollst. relation} \\
 &= \sum_{nd} \langle n | X | d \rangle \langle d | n \rangle \\
 &= \sum_{nd} \langle d | n \rangle \langle n | X | d \rangle \\
 &= \sum_d \langle d | \sum_n | n \rangle \langle n | X | d \rangle \\
 &= \sum_d \langle d | X | d \rangle
 \end{aligned}$$

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

$$\text{Tr} \hat{A} \hat{B} = \text{Tr} \hat{B} \hat{A}$$

$$\text{Tr} \hat{A} \hat{B} \hat{C} = \text{Tr} \hat{C} \hat{A} \hat{B} = \text{Tr} \hat{B} \hat{C} \hat{A}$$

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle_{|\psi\rangle} &= \text{Tr} (|\psi\rangle \langle \psi| A) \\
 &= \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | A | n \rangle
 \end{aligned}$$

Messgrösse

$$\begin{aligned} \text{Erwartungswert} &= \sum_n \langle \psi | A | n \rangle \langle n | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | A | \psi \rangle \quad \mathbb{1} \end{aligned}$$

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

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

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

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

$$\langle \uparrow | P_{|\uparrow\rangle} | \downarrow \rangle = \langle \uparrow | \uparrow \rangle \underbrace{\langle \uparrow | \downarrow \rangle}_0 = 0$$



4.1.2. Gemischte Zustände (gemische)

Def: Über ein BM System im \mathcal{H} mit VOS $\{|n\rangle\}$ liegt nur unzureichende

Information vor:

Mit Wahrscheinlichkeit p_n befinde
sich das System im Zustand $|n\rangle$.

Die Menge $\{p_n, |n\rangle\}$ heißt Ensemble
von reinen Zuständen.

Der Erwartungswert einer Observablen A ist
dann

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

mit Wahrscheinlichkeiten p_n , $\sum_n p_n = 1$

$$0 \leq p_n \leq 1.$$

Definition: 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 12⁰⁰ (s.t.!) Vorstellungsvortrag
 Neuberufung Astrophysik
 hier (E-W 203)

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \sum_m P_m \langle m | A | m \rangle = \sum_{m,n} P_m \langle m | A | n \rangle \underbrace{\langle n | m \rangle}_{\delta_{nm}} \\
 &= \sum_m \langle m | A | \underbrace{\sum_n P_n | n \rangle}_{\hat{\rho}} | m \rangle \\
 &= \text{Tr } \hat{A} \hat{\rho} = \text{Tr } \hat{\rho} \hat{A}
 \end{aligned}$$

Erwartungswerte durch Spurbildung
 mit Dichteoperator

Mög: $\hat{\rho} = \sum_n P_n |n\rangle \langle n|$

diagonal
 in $|n\rangle$ -Basis

Basiswechsel

$$|d\rangle = \sum_n A_{dn} |n\rangle$$

$$|n\rangle = \sum_d B_{nd} |d\rangle; \quad \langle n| = \sum_{d'} B_{nd'}^\dagger \langle d'|$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \hat{\rho} &= \sum_{n, d, d'} p_n B_{nd} |d\rangle B_{nd}^\dagger \langle d'| \\
&= \sum_{d, d'} |d\rangle \langle d'| \underbrace{\sum_n p_n B_{nd} B_{nd}^\dagger}_C \\
&= \sum_{d, d'} C_{dd'} |d\rangle \langle d'| \equiv C_{dd'}
\end{aligned}$$

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

Normierung:
$$\begin{aligned}
\text{Tr } \hat{\rho} &= \sum_m \sum_n \underbrace{\langle n | \rho_m | m \rangle}_{p_n \delta_{nm}} \underbrace{\langle m | n \rangle}_{\delta_{mn}} \\
&= \sum_n p_n = \underline{1}.
\end{aligned}$$

Hermitizität:
$$\begin{aligned}
\langle d | \hat{\rho} | \beta \rangle &= \sum_n p_n \langle d | n \rangle \langle n | \beta \rangle \\
&= \sum_n p_n \langle n | d \rangle^* \langle \beta | n \rangle^* \\
&= \sum_n \left(p_n \langle \beta | n \rangle \langle n | d \rangle \right)^* \\
&= \langle \beta | \hat{\rho} | d \rangle^* \Rightarrow \hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger
\end{aligned}$$

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

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

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

Beweis: Sei $\rho \geq 0 \Rightarrow$ Zerlegung $\hat{\rho} = \sum_{k \in \Omega} \lambda_k |k\rangle\langle k|$,
 $\lambda_k \geq 0$

$\sum \lambda_k = 1$, die Darstellung

$\hat{\rho} = \sum_k \lambda_k |k\rangle\langle k|$ definiert

ein Ensemble $\{\lambda_k, |k\rangle\}$.

Weiterhin gilt

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

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

$$P_{\text{reini}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

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

$$= \begin{pmatrix} 1/16 & 0 \\ 0 & 9/16 \end{pmatrix}; \quad \text{Tr } \hat{\rho}_G^2 = \frac{10}{16} < 1$$

während $\hat{\rho}_{\text{rein}}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{Tr } \hat{\rho}_{\text{rein}} = 1$

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

$\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}, \quad \text{Tr } \hat{\rho}^2 < 1$: 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 $|n\rangle, \quad \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

Wärmebad mit Temperatur T , k_B Boltzmann-Konstante

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

$$= \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$$

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

„Zustandssumme“

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

Zeitentwicklung, Liouville-von-Neumann-Gleichung

$$\text{Sgl: } i\partial_t |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) &= \hat{A} u(t) \rho(0) u^\dagger(t) \\ &\quad - u(t) \rho(0) u^\dagger(t) \hat{H} \\ &= [\hat{H}, \hat{\rho}(t)]. \end{aligned}$$

Ausgangspunkt der Nichtgleichgewichts-Quantenstatistik

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