2.3 Quantenmechanische Gleichgewichtsverteilungen

Mikrozustände:

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

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

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

Zustandsvektor ("ket")

bra-c-ket

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

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

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

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

bra-ket: Skalarprodukt

$\langle r|\psi\rangle = \psi(r)$ Ortsdarstell.

Wellenfkt

Mikroobservable

klass. Phasenraumfkt. $\longrightarrow$ qm. Operatoren (linear, hermitesch)

$M : \Gamma \to \mathbb{R}$

$\hat{M} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ $\qquad \hat{M} = \hat{M}^+$

z.B. Ham.fkt.

kommutieren i.a. nicht

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

Maximalmessung: Messung eines vollst. Satzes vertauschbarer Observablen $\Rightarrow |\alpha\rangle$

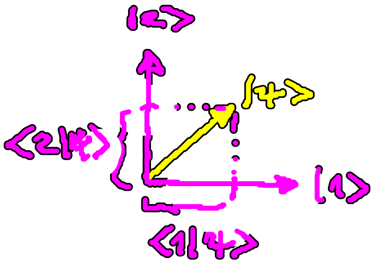
Messwerte: $M(\xi) \longrightarrow M_\alpha \in \mathbb{R}$ Eigenwert im Eigenzustand $|\alpha\rangle$

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

Spektraldarstellung

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

„Projektionsoperator" auf $|\alpha\rangle$



$$|\psi\rangle = |1\rangle\langle 1|\psi\rangle + |2\rangle\langle 2|\psi\rangle$$
$$= \sum_\alpha \underbrace{|\alpha\rangle\langle\alpha|}_{\hat P_\alpha}\psi\rangle$$

Observable: „Ist das System im Zustand $|\alpha\rangle$?"

quantenmech. Erwartungswert einer Messung:

(i) $|\psi\rangle$ heißt reiner Zustand (Vektorzustand)

Wahrsch. für das Resultat $|\alpha\rangle$ im Zustand $|\psi\rangle$:

$$|\langle\alpha|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle = \langle\psi|\hat P_\alpha|\psi\rangle = P_\alpha$$

($|\langle \mathbf{r}|\psi\rangle|^2$ Aufenth.w.dichte)

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

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

1   1

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

falls $|\alpha\rangle$ Eigenbasis zu $\hat M$

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

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

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

$$= \mathrm{tr}\,(\hat P_\psi \hat M) = \mathrm{tr}\,(\hat M \hat P_\psi)$$

Def.: $\mathrm{tr}\,\hat{X} := \sum_\alpha \langle\alpha|\hat{X}|\alpha\rangle$ in einer beliebigen Basis $|\alpha\rangle$

Spur eines Operators (tr = trace = Spur)

Satz: Die Spur ist invariant bei Basiswechsel

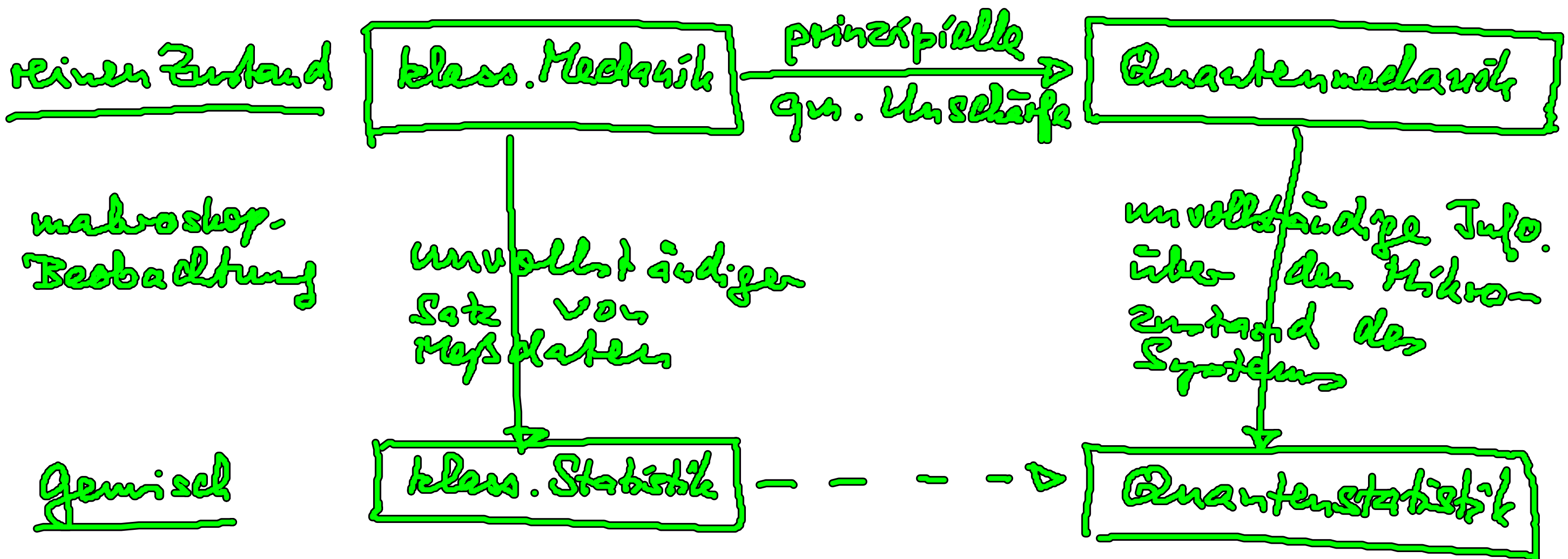
Beweis: unitäre Trafo einer Basis

$$\sum_\alpha \langle\alpha\underset{1}{|}\hat{X}\underset{1}{|}\alpha\rangle = \sum_{\alpha\beta\beta'} \langle\alpha|\beta\rangle\langle\beta|\hat{X}|\beta'\rangle\langle\beta'|\alpha\rangle$$

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

(ii) **Quantenmech. Gemisch**

[Eugen Fick, Grundlagen der QM, Kap. 7]



(A) qm. Wahrsch. aussagen (prinzipielle Unschärfe)
W. amplitude $\langle\alpha|\psi\rangle$

zus. Statistik ↓

(B) unvollst. Info über Mikrozustand
(z. B. nach vollst. Messung in $|\psi\rangle$ wird vom Messerg. nicht Kenntnis genommen)

Mikrozust. $|\alpha\rangle \longrightarrow$ sample set der Zufallsvar.

p_α Wahrscheinl. verteil.

$$\langle \hat{M} \rangle = \sum_\alpha P_\alpha \underbrace{\langle \alpha | \hat{M} | \alpha \rangle}_{1}$$ Erwartungswert

qm. Erwart.wert im reinen Zustand $|\alpha\rangle$

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

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

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

$$\langle \hat{M} \rangle = \mathrm{tr}\,(\hat{\varrho} \hat{M})$$ mit dem <u>statistische Op.</u>

(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.

<u>Bem.</u>: <u>reine Zustände</u> $\longrightarrow$ kohärente Überlagerung von Wahrscheinl.amplitude

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

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

komplexe Z.
qm. Phase

$\Downarrow$

qm. <u>Interferenzterme</u>, falls $\hat{M}$ nichtdiagonal in $|\alpha\rangle$

<u>Gemisch</u> $\longrightarrow$ inkohärente Überlagerung von reinen Zuständen

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

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

<u>Normierung</u> des statist. Op.:

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

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

<u>Projektor</u> $\hat{P}_\psi$

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

einheitl. Darstellung!

<u>NB</u>: Math. Formulierung des Zustandsbegriffs:
(klass + qu)

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

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

reiner Zustand = Extremalpkt. der konvexen Menge der Zustände