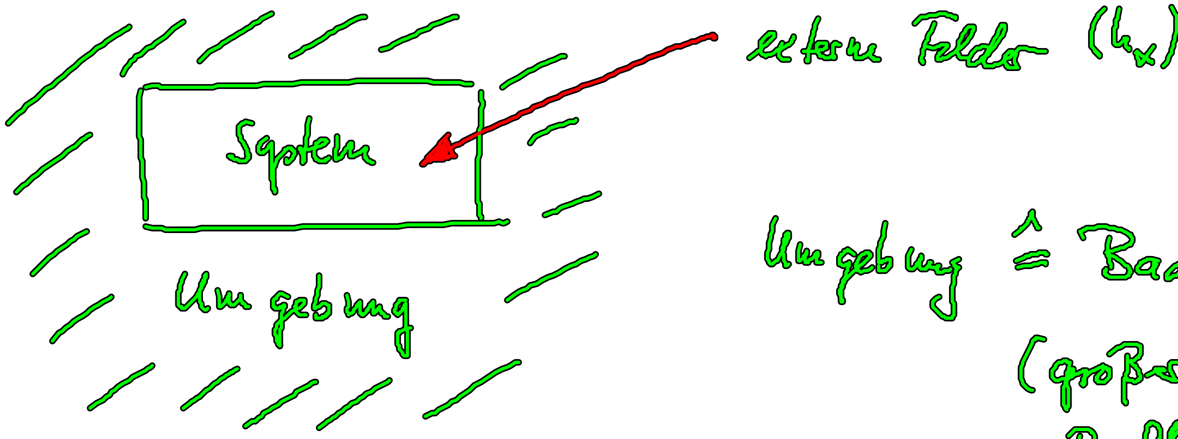
2.1.4. Wechselwirkung von System und Umgebung



Umgebung $\hat{=}$ Bad (großer Puffer)

$$H_{ges} \equiv H = H_S + H_B + H_{SB} + H_S^{\alpha}(t)$$

System, Bad, Wechselwirkung, externe Felder die auf System wirken

„Modifikation" der Schrödingergleichung aufgrund der Umgebung

im allgemeinen: $i\hbar \partial_t \chi = H \chi$ immer richtig

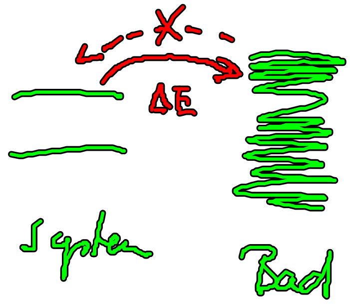
nehmen an:

System: $H_S |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$

Bad: $H_B |b\rangle = \varepsilon_b |b\rangle$

Problem gelöst. System beispielsweise H-Atome

Bad beispielsweise harmonische Oszillatoren mit „dichtem" Energiespektrum



Abbildung

„System soll Temperatur des Bads annehmen, aber soll Bad nicht stark beeinflussen"

χ hängt noch von Bad/System koordinate ab

$$\chi = \sum_{n,b} c_{nb}(t)\, |n\rangle |b\rangle$$

spannt den ganzen Raum auf

$|n\rangle$, $|b\rangle$ abstrakte Vielteilchenzustände

wollen Systemgröße beobachten!

Observable des Systems: O_S wirkt nicht auf $|b\rangle$, nur auf $|n\rangle$'s:

$$\langle \chi | O_S | \chi \rangle = \sum_{\substack{nn' \\ bb'}} c^*_{n'b'}\, c_{nb}\, \langle n' | \underbrace{\langle b' | O_S | b \rangle}_{\delta_{bb'}} | n \rangle$$

Erwartungswert von O_S

$$= \sum_{nn'} \underbrace{\sum_b c^*_{n'b}\, c_{nb}}\ \langle n' | O_s | n \rangle$$

$\rho_{nn'}$ – Matrix,
hier findet sich die Umgebung
wieder

$\rho_{nn'}$ wird Dichtematrix genannt oder Matrix des statistischen Operators ρ mit Matrixelemente $\rho_{nn'}$

$\longrightarrow$ führe statistischen Operator ein

Erwartungswert in System mit Umgebung:

$$\langle K | O_s | K \rangle = \sum_{n,n'} \langle n | \rho | n' \rangle \langle n' | O_s | n \rangle$$

mit $1 = \sum_{n'} | n' \rangle \langle n' |$

$$\langle O_s \rangle = \sum_n \langle n | \rho\, O_s | n \rangle \equiv sp(\rho\, O_s)$$

ist die Mittlungsformel der statistischen Physik

Frage: was kann man über ρ heraus finden

kennen 2 Eigenschaften $\rho_{nn'} = \sum_b c^*_{n'b} c_{nb}$

→ hermitesche Matrix ⇒ kann diagonalisiert werden

→ $sp(\rho) = 1$, denn $\sum_{n,b} |c_{nb}|^2 \overset{!}{=} 1$

ebenso: Diagonalelemente $|c_{nb}|^2 \geq 0$

(Betragsquadrat zwischen 0 u. 1)

$\underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad}$

alles wegen Wahrscheinlichkeitsinterpretation

wenn man diagonalisiert, so bleiben die Eigenschaften:

$sp(\rho) = \sum_i w_i = 1$, $w_i \in [0,1]$; $i\hbar |\dot{\Psi}_i\rangle = (H_S + H_S^\alpha)|\Psi_i\rangle$

→ es existiert $\rho = w_i \underbrace{|\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|}_{\text{Systemwellenfunktionen}}$

↗

Diagonaldarstellg.

<u>Bemerkung</u>:

a) Interpretation von ρ:

in Diagonaldarstellung $\langle O_s \rangle$ ausrechnen:

$$\langle O_s \rangle = \mathrm{Sp}(\rho\, O_s) = \sum_n \langle n | \rho\, O_s | n \rangle$$

vollständiges System im Vielteilchenraum d. Systems

$$= \sum_n \langle n | \underbrace{\sum_i w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|}_{\rho}\, O_s | n \rangle$$

$$= \sum_i w_i \langle \psi_i | O_s \underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{1} \psi_i \rangle$$

$$\langle O_s \rangle = \sum_i w_i \underbrace{\langle \psi_i | O_s | \psi_i \rangle}$$

Erwartungswert einer Größe, bei der sich System im Zustand $|\psi_i\rangle$ befindet

Interpretieren als Wahrscheinlichkeit
mit der ein Zustand $|\psi_i\rangle$ realisiert wird

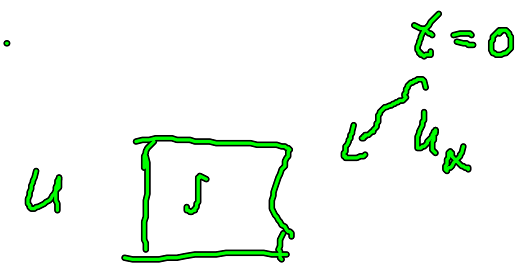
$\langle O_S \rangle$ = klassische Mittelg. aller mögl. Erwartungswerte der „normalen" Quantenmechanik

$\sum_i \hat{=}$ Mittelung über das besprochene Ensemble !

Jedes Ensemblemitglied trägt mit der Wahrscheinlichkeit w_i zum Meßergebnis bei.

b) w_i = zeitlich konstant, weil $\rho(\underline{t})$ wird über die Wellenfunktion $|\psi_i\rangle(t)$ vermittelt (Schrödingerbild)

d.h. die w_i sind durch Anfangsbedingungen vorgegeben, z.B.



w_i fest durch Präparation vor $t<0$

c) <u>Zentrale Begriffe:</u>

- reiner Zustand $|\psi_{i0}\rangle$ ist System das sich ohne Einwirkung der Umgebg. entwickelt $w_{i0} = 1$, alle and. sind Null

Setzt exakte Präparation des AB durch Messg. voraus!

- geht aber in allgemein nicht, dagegen muß man quantenmechanisch gemischt betrachten mit vielen $w_i \neq 0$.

z.B. Präparation bei kontinuierlich Spektrum nicht mögl.

$$\rightarrow \quad \rho_{rein} = |\psi_{i0}\rangle\langle\psi_{i0}|$$

$$\rho_{gemisch} = \sum_i w_i \, |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

d) Lösung der Eigenwertgleich. f. ρ:

$$\rho\,|r\rangle = r\,|r\rangle$$

$$\sum_i w_i \, |\psi_i\rangle\langle\psi_i|r\rangle = r\,|r\rangle \quad \Big|\, \langle r| \cdot$$

$$\sum_i w_i \langle r|\psi_i\rangle\langle\psi_i|r\rangle = r$$

$\rightarrow$ (i) $w_i \leq 1$, $|\langle r | \psi_i \rangle|^2 \leq 1$

$$\Rightarrow 0 \leq r \leq 1$$

$\rightarrow$ (ii) $\sum_r$ nehme:

$$\sum_r \sum_i w_i \langle \psi_i | r \rangle \langle r | \psi_i \rangle = \sum_r r$$

$$\sum_i w_i = \sum_{\{r\}} r \rightarrow \sum_{\{r\}} r = 1$$

Eigenwerte von ρ sind von 0 bis 1 und ergeben in ihrer Summe 1.

2.1.5 Beispiel für gemischten Zustand

$H_S |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$: einfach machen

Photon : mit Polarisation $\uparrow, \rightarrow$ = 2 Zustände $|n = 1, 2\rangle$

$$|\psi_i(t)\rangle = a(t) |\rightarrow\rangle + b(t) |\uparrow\rangle$$

wird durch $\uparrow, \downarrow, a, b$ mit $a^2 + b^2 = 1$

sind alle mgl.!

a) reiner Zustand:

$$\rho_{rein} = |\psi_{io}\rangle\langle\psi_{io}| \quad \text{f. feste } a, b$$

$$\rho_{rein} = \left(a|\rightarrow\rangle + b|\uparrow\rangle\right)\left(a^*\langle\rightarrow| + b^*\langle\uparrow|\right)$$

$$= |a|^2 |\rightarrow\rangle\langle\rightarrow| + ab^* |\rightarrow\rangle\langle\uparrow|$$

$$+ ba^* |\uparrow\rangle\langle\rightarrow| + |b|^2 |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$$

a, b beliebig, $|a|^2 + |b|^2 = 1$, z.B.

$a = \frac{1}{\sqrt{2}} = b$ oder $a = 1$, $b = 0$ ... alles reine Zustände

b) gemischter Zustand:

$$\rho = \sum_i w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

$|\psi_1\rangle = |\rightarrow\rangle$, $|\psi_2\rangle = |\uparrow\rangle$, $w_1 = w_2 = \frac{1}{2}$

$$\rho = \frac{1}{2}|\rightarrow\rangle\langle\rightarrow| + \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow|$$

Wie kann man geschickt ρ_{rein} von $\rho_{gemischt}$ unterscheiden? läuft über Spur → ÜA.

immer noch nicht bekannt: w_i's! → Anwenden für bestimmte exp. Bedingungen!

2.1.6. Aufgaben der statistischen Physik

3 wichtige:

- dynamische Gleichungen für $\rho_{univ}(t)$ um den statistischen Operator $\rho(t)$ zu bestimmen
  $\rightarrow \langle O_S \rangle = sp(\rho(t)\, O_S)$ bei externen Feldern

- Anfangsbedingungen $\rho_{univ}(t_0)$ festlegen vor dem Einschalten externer Felder

- Methode finden die Umgebung in den AB durch wenige Parameter in $\rho_{univ}(t_0)$ einzubauen (z.B. Temperatur)

2.2. Dynamik des statistischen Operators

Suchen eine Gleichg. f. $\rho(t)$: $= \sum_i w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$

$$i\hbar |\dot{\psi}_i\rangle = H|\psi_i\rangle \quad \Big| \cdot \langle\psi_i|\, w_i \,, \sum_i$$

$$-i\hbar \langle\dot{\psi}_i| = \langle\psi_i| H \quad \Big| \; w_i |\psi_i\rangle \cdot \,; \sum_i$$

Gleichg. subtrahieren !

$$i\hbar\, \partial_t \sum_i w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_i w_i \big(H|\psi_i\rangle\langle\psi_i| - |\psi_i\rangle\langle\psi_i| H \big)$$

$$\boxed{i\hbar\, \partial_t \rho = [H, \rho]}$$

von Neumanngleichg. f. die Dynamik des statist. Operators

$H = H_S + H_S^{\alpha}(t)$, $|\psi_i\rangle$ wirkt nur im System !

oder $\quad i\hbar\, \partial_t\, sp(\rho\, O_S) = sp([H, \rho]\, O_S)$

erinnert etwas an Heisenberg-Bewggsgl.,

aber Vorsicht! ist KEINE: sind im Schrödingerbild!

+1 Vorzeichen ist anders.

Die von Neumanngleichung tritt an die Stelle der Schrödingergleichung in der statistischen Physik (in Bedeutung).

Bewegungsgleichg. der Dichtematrixelemente:

- was kann man mit $\rho_{nn} = ?$, $\langle n|\rho|n\rangle$ → kann ich damit etwas anfangen?

- in Quantenmechanik: $p_n = \langle\psi_{i0}|n\rangle\langle n|\psi_{i0}\rangle$, ist Wahrscheinlichkeit bei Messg. das System im Zustand $|n\rangle$ zu finden, wenn $|\psi_{i0}\rangle$ vorliegt

- in Statistik: $p_n = \mathrm{sp}(\rho\, |n\rangle\langle n|)$

$$= \sum_j \langle j| \sum_i w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|n\rangle\langle n|j\rangle$$

$$= \sum_j \sum_i \langle\psi_i|n\rangle\langle n|j\rangle\langle j|\; w_i|\psi_i\rangle$$

$\longrightarrow 1$

$$= \sum_i w_i \langle n|\psi_i\rangle\langle\psi_i|n\rangle = \langle n|\rho|n\rangle$$

Der Wert $\langle n | \rho | \psi \rangle$, stellt die Wahrscheinlichkeit dar, System im Zustand $|\psi\rangle$ bei einer Messung zu finden. (Observable mit Eigensystem $|\psi\rangle$).