Interpretation der Dichtematrixelemente

$$p_n = sp\left(\rho\, |n\rangle\langle n|\right) = \rho_{nn} \equiv \rho_n$$

Wahrscheinlichkeit System im Eigenzustand $|n\rangle$, von z.B $H|n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$ zu finden.

$$p_{mn} = sp\left(\rho\, |n\rangle\langle m|\right) = \rho_{mn}$$

Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude von $|m\rangle \to |n\rangle$

Was man braucht um $\langle O_S\rangle$ zu berechnen sind

$\rho_{nm}(t)$, für $m=n$ und auch $m \neq n$.

Gleichungen dafür sind Dichtematrixgleichungen:

aus von Neumanngleichg -

$$i\hbar\, \partial_t \rho = [H, \rho] \xrightarrow{?} \dot{\rho}_{nn}\,,\ \dot{\rho}_{nm} = ?$$

$\langle n| \ldots |n\rangle$ nehmen

$$i\hbar\,\partial_t\,\rho_{nn}(t) = \langle n|H\rho - \rho H|n\rangle$$

$$= \sum_m \Big(\langle n|H|m\rangle\langle m|\rho|n\rangle - \langle n|\rho|m\rangle\langle m|H|n\rangle \Big)$$

$$i\hbar\,\partial_t\,\rho_{nn} = \sum_m \left(H_{nm}\,\rho_{mn} - \rho_{nm}\,H_{mn} \right)$$

Bewegleichung für $\rho_{nn} \equiv \rho_n$ koppelt an ρ_{nm} $(n \neq m)$

brauche also Gleichung für ρ_{mn}, analog $\sum_i |i\rangle\langle i|$ einschieben

$$i\hbar\,\partial_t\,\rho_{mn} = \sum_i \left(H_{mi}\,\rho_{in} - \rho_{mi}\,H_{in} \right)$$

man hat ein geschlossenes Gleichungssystem für ρ_{mn} die Dichtematrix in der Darstellg von den

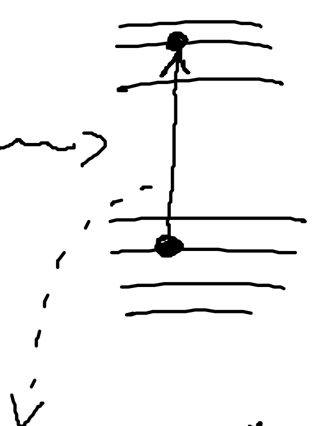
Eigenwertproblem $H_S |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$

$$H = H_S + H_S^\alpha$$

externen Felder sind nicht diagonal

<u>Interpretation:</u>

Energiespektrum von H_S



$|n\rangle \longrightarrow \rho_{nn}$: mit welcher Wahrscheinlichkeit finde ich System in $|n\rangle$

H_α (H_S^α)

$|m\rangle$ ρ_{mn}

ρ_{mn}: Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude zwischen Zuständen

(kennen Sie von Fermis goldener Regel ohne Umgebung)

wenn H_{ij} bekannt wären, könnte man bei bekannten Anfangsbedingungen System lösen, daher ist dies der nächste Schritt:

2.3. Vorurteilsfreie Schätzung des statistischen Operators zu einem festen Zeitpunkt

Motivation: ρ_{nm} (t_0 < Einschalten des Felds $E_\alpha(t)$) bestimmen, hier formulieren wir das so allgemein, daß später Theorie auch für eine Abfolge von t_0's, also $\rho_{nm}(t)$ bei eingeschaltetem Feld gilt.

2.3.1. Unschärfemaß des statist. Operators

Problem: $\{G_\nu\}$ sei Satz v. Observablen

(z.B. N, E eines Gases)

- andere Infos sollen nicht gemessen werden

  wenn wir $\rho(t_0)$ festlegen, so muß das so geschehen, daß nicht mehr Info als $\{G_\nu\}$ festgelegt wird.

- um sicherzustellen, daß wir nicht mehr Info fordern als uns zusteht bilden wir Unschärfemaß $y(\rho)$ und y soll angeben wie weit wir vom reinen Zustand entfernt

- später wird η maximiert (Nichtwissen maximieren) unter den Nebenbedingg. $\{\langle g_\nu \rangle\}$ um ρ zu finden

Kennt bzw. im Exp. festlegt

→ vorurteilsfreie Wahl zeichnet keine andere Observable aus!

Definition des Unschärfemaßes:

$$\eta(\rho) = -k \, \mathrm{sp}(\rho \ln \rho)$$

Funktional von ρ

(analog: informationstheoretisches Maß v. C. Shannon ('46))

ist das sinnvoll?

a) $\eta(\rho)$ sollte positiv sein, um Maß f. Unschärfe zu geben

b) $\eta(\rho)$ sollte 0 sein f. einen <u>reinen</u> Zustand

c) $\eta(\rho)$ sollte ∞ sein für einen komplett unbestimmten Zustand ist zu zeigen :

a) mit $\rho |r_m\rangle = r_m |r_m\rangle$ Eigenwertgleichung f. ρ

$$\eta(\rho) = -k\, sp(\rho \ln \rho) = -k \sum_m \langle r_m | \rho \ln \rho | r_m\rangle$$

$$= -k \sum_m r_m \underbrace{\ln r_m} \geq 0$$

$$1 \geq r_m \geq 0 \rightarrow \ln r_m < 0$$

b) mit $\rho_0 = |\psi_{i0}\rangle\langle\psi_{i0}|$ $|\psi_{i0}\rangle$ ist der rein Zustand

Eigenwertproblem $|\psi_{i0}\rangle\langle\psi_{i0}|r\rangle = r|r\rangle$

erfüllt für $|r\rangle = |\psi_{i0}\rangle$, $r = 1$

$$\eta(\rho_0) = -k \sum_{m=0} r_m \ln r_m = -k\, 1 \cdot \ln 1 = 0$$

reiner Zustand

c) völlige Unbestimmtheit :

behandelt Hilbertraum der Dimension d

am Ende $d \rightarrow \infty$ (wie z.B. in richtige Karte)

$w_i = \frac{1}{d}$ die Wahrscheinlichkeit der Realisierungen muß gleich sein (analog Würfel)

$$\rho = \sum_i w_i \, |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \frac{1}{d} \underline{\underline{\mathbb{1}}}$$

$$\eta(\rho_d) = -k \sum_{i=1}^{d} \langle i | \frac{1}{d} \ln \frac{1}{d} | i \rangle$$

$$= +k \sum_{i=1}^{d} \frac{1}{d} \ln d = +k \frac{d}{d} \ln d$$

$$d \to \infty \,, \quad \eta(\rho) = \infty$$

→ alle Grenzwerte sind sinnvoll, damit $\eta(\rho)$ ein sinnvolles Unschärfemaß $\forall \rho$ ist

Jetzt können wir $\eta(\rho)$ nehmen um ρ zu bestimmen.

2.3.2. Der generalisierte statistische Operator

wollen aus $\eta(\rho) \to \rho$ sinnvoll finden,
natürlich <u>nicht</u> eindeutig, aber das Wissen über
$\{ G_\nu \}$ hilft:

→ Wir maximieren $\eta(\rho)$ also unser Nichtwissen unter den Bedingungen des „Wissens" von G_ν.

„vorurteilsfrei".

Nebenbedingungen: $\langle G_\nu \rangle = sp(\rho G_\nu)$

z.B. E, N

$sp(\rho) = 1$

Ergebnis bevor es bewiesen wird:

Der statistische Operator R der alle Forderungen:

$\eta(R) = \text{maximal}, \; sp(G_\nu \rho) = sp(G_\nu R) \; ; \; sp(R) = 1$

erfüllt heißt „generalisierter kanonischer statistischer Operator" (GKSO)

$$R_{(G_\nu)} = \frac{1}{Z_{(G_\nu)}} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu G_\nu}$$

bezeichnet die Beobachtungsgrößen

- $Z(g_\nu) \equiv Z = sp\left(e^{-\sum_\nu \lambda_\nu g_\nu}\right)$ Normierungsfaktor

und wird Zustandssumme genannt

- es tauchen neue Lagrangefaktoren λ_ν auf die die Umgebung (z.B. Temperatur) charakterisieren

λ_ν noch unbestimmt: **Bsp.:** $g_1 = H$, $R \propto e^{-H/kT}$

$$\lambda_1 = \frac{1}{kT}$$

- Bedeutung der Zustandssumme:

$$\langle g_\nu \rangle = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \lambda_\nu}$$ bestimmt die Messgrößen

Messgrößen

aus: $\langle g_\nu \rangle = sp\left(g_\nu \frac{e^{-\sum \lambda_\nu g_\nu}}{Z}\right)$

$\rho = R$ liegt damit f. feste Zeitpunkt vor und damit könnt bei Eindeutigkeit von $h_\alpha(t)$ die Dichtematrix gl. gelöst werden.

Beweis f. GKSO:

3 Schritte, a, b, c

a) Unschärfemaß für R ableiten:

$$R = \frac{1}{Z} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu G_\nu}, \qquad \ln R = -\sum_\nu \lambda_\nu G_\nu - \ln Z$$

$$\eta(R) = -k\, sp(R \ln R) = k \sum_\nu \lambda_\nu \langle G_\nu \rangle + k \ln Z$$

|| wir nehmen ein beliebigen statist. Operator ρ und zeigen $\eta(R) \geq \eta(\rho)$ ist. (Idee d. Beweises)

b) $$sp(\rho \ln R) \overset{\text{ansehen}}{=} -\sum_\nu \lambda_\nu \underbrace{sp(\rho G_\nu)}_{= sp(R G_\nu)} - \ln Z \equiv sp(R \ln R)$$

c) $$\underbrace{sp(\rho \ln \rho) - sp(R \ln R)}_{\text{spiegelt später wider, was größer ist}} =$$

$$\rho |r_m\rangle = r_m |r_m\rangle$$
$$R |w_n\rangle = R_n |w_n\rangle$$

$$sp(\rho \ln \rho) - sp(\rho \ln R) \overset{\text{nach (b)}}{=}$$

$$\sum_m r_m \left(\ln r_m - \langle r_m | \ln R | r_m \rangle \right) =$$

$\langle r_m | r_m \rangle = 1$

$$= \sum_{m,n} \Big(\langle r_m | w_n \rangle \langle w_n | r_m \rangle r_m \ln r_m - r_m \langle r_m | \ln R | w_n \rangle \langle w_n | r_m \rangle \Big)$$

$$= \sum_{m,n} |\langle r_m | w_n \rangle|^2 r_m \left(\ln r_m - \ln R_n \right)$$

verwendet

$$= \sum_{m,n} |\langle r_m | w_n \rangle|^2 (-r_m) \ln \left(\frac{R_n}{r_m} \right) \quad \left(\ln x \leq x - 1 \right)$$

$$\geq \sum_{m,n} |\langle r_m | w_n \rangle|^2 (-r_m) \left(\frac{R_n}{r_m} - 1 \right)$$

$$= \sum_{m,n} |\langle r_m | w_n \rangle|^2 \left(r_m - R_n \right)$$

$$= \sum_m r_m - \sum_n R_n = 0$$

$$\longrightarrow \quad sp(\rho \ln \rho) \geq sp(R \ln R) \quad | \cdot (-k)$$

$$\eta(\rho) \leq \eta(R)$$

R hat offensichtlich das maximale Unschärfemaß f. die vorgegebenen NB.