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 $n=n$ 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

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

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

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

Bewegungsgleichung 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

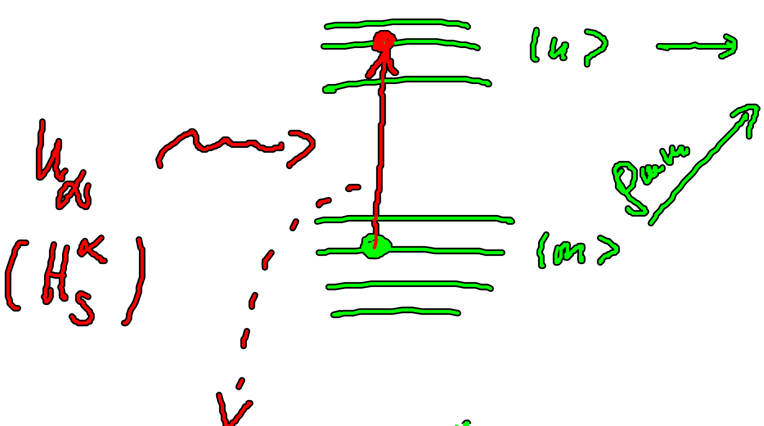
Eigenwertproblem $\quad H_S |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$

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

$\uparrow$ externe Felder sind nicht diagonal

<u>Interpretation:</u>

Energiespektrum von H_S



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

ρ_{mn}: Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude zwischen Zuständen

(kennen Sie von Fermis Goldener Regel ohne Umgebg.)

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

2.3. Vorurteilsfreie Schätzung des statistischen Operators zu einem festen Zeitpunkt

<u>Motivation</u>: ρ_{nm} (t_0 < Einschalten des Felds $\epsilon_\alpha(t)$) 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 <u>mehr</u> Info als $\{G_\nu\}$ festgelegt wird.

- um sicherzustellen, daß wir nicht mehr Info fordern als uns zusteht bilden wir

  Unschärfemaß $\eta(\rho)$ und η soll angeben wie weit wir von reinen Zustand entfernt

- später wird y maximiert (Nichtwissen maximieren)
unter der Nebenbedingg. $\{\langle G_r \rangle\}$ um ρ zu finden
Kennt bzw in Exp. festlegt

$\longrightarrow$ vorurteilsfreie Wahl zeichnet keine andere Observable aus!

Definition des Unschärfemaßes:

$$y(\rho) = -k \, sp(\rho \ln \rho)$$

Funktional von ρ

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

ist das sinnvoll?

a) $y(\rho)$ sollte positiv sein, um Maß f. Unschärfe anzugeben

b) $y(\rho)$ sollte 0 sein f. einen reinen Zustand

c) $y(\rho)$ 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 reine 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 :

behandle Hilbertraum der Dimension d

am Ende $d \rightarrow \infty$ (wie z.B. in rechtiger Kasten)

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

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

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

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

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

$\rightarrow$ 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 $\eta(\rho) \rightarrow \rho$ 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:

$\eta(R)$ = 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 Beobachtungsebene

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

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

Beweis f. GKSO: 3 Schritte, a, b, c

a) Ausdrückemaß für R ableiten:

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

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

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

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

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

$\rho |r_n\rangle = r_n |r_n\rangle$

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

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

$$\sum_n r_n \left(\ln r_n - \langle r_n | \ln R | r_n \rangle\right) =$$

$\langle r_n | r_n \rangle = 1$

$$= \sum_{m,n} \left(\langle r_m | W_n \rangle \langle W_n | r_m \rangle r_m \ln r_m - r_m \langle r_m | \ln R | W_n \rangle \langle W_n | r_m \rangle \right)$$

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

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

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

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

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

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

$$y(\rho) \leq y(R)$$

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