

Grundlagen der Quantenstatistik

①

1. Der statistische Operator eines Gemisches

QT ist angemessene mikroskop. Beschreibung der Materie

• bisher: SGL für reinen Zustand

$$i\hbar \partial_t \psi = \hat{H} \psi \quad + AB \rightarrow \text{exakt bestimmt}$$

• jetzt: Quantenstatistik

(wg. mangelnder Info ist Problem stat. zu betrachten)

→ Klasse von WF: ψ_n tritt mit Wahrs. w_n auf
($\sum_n w_n = 1$, $0 \leq w_n \leq 1$)

Erwartungswert in der QS von Observablen $\hat{O}$:

$$\langle\langle \hat{O} \rangle\rangle = \underbrace{\sum_n w_n \underbrace{\langle \psi_n | \hat{O} | \psi_n \rangle}_{\text{qm EW}}}_{\text{Mittelung über stat. Gemisch}} \quad \text{ab jetzt: } \langle \hat{O} \rangle := \langle\langle \hat{O} \rangle\rangle$$

→ stat. Operator $\hat{\rho}$:

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_j \sum_n w_n \langle \psi_n | \hat{O} | j \rangle \langle j | \psi_n \rangle \quad \{ |j\rangle \} \text{ vons}$$

$$= \sum_j \langle j | \underbrace{\sum_n w_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n |}_{\text{stat. op } \hat{\rho} = \sum_n w_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n |} \hat{O} | j \rangle = \sum_j \langle j | \hat{\rho} \hat{O} | j \rangle$$

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{O}), \quad \text{tr}(\cdot) = \sum_j \langle j | \cdot | j \rangle \quad \{ |j\rangle \} \text{ bel. vons}$$

• Eigenschaften:

(a) $\hat{\rho}$ ist hermitesch

(b) $\text{tr}(\hat{\rho}) = 1$, $\text{tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1$

(c) EWGL. von $\hat{\rho}$: $\hat{\rho}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$

führt auf EWe mit $\sum_{\{\nu\}} \nu = 1$, $0 \leq \nu \leq 1$

(d) Bewegungsgl. für $\hat{\rho}$: „Liouville-v. Neumann - Gl.“

$$i\hbar \partial_t \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (\text{ist zentral in QS})$$

2. Informationstheoretische Festlegung des stat. Op

Wenn man den Zustand eines phys. Systems mit Hilfe von $\hat{\rho}$ beschreibt ist die Nicht-Determiniertheit des Zustands bereits berücksichtigt.

Suche Maß dafür, wie weit $\hat{\rho}$ davon entfernt ist, einen reinen Zustand zu beschreiben.

• Unschärfemaß: $\eta(\hat{\rho}) = -k \text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$

(soll umso größer sein, je weiter von reinen Zustand entfernt, soll Funktional von $\hat{\rho}$ sein, pos. Zahl, unitäre Trafo)
 $\rightarrow \text{tr}(\cdot)$

Hat enge Verbindung mit Informationstheorie:

Nicht-Determiniertheit $\Leftrightarrow$ fehlende Info

• Eigenschaften:

(a) $\eta \geq 0$ ($= 0$ in reinem Zustand)

(b) völlige Unbestimmtheit mit $\hat{\rho}_u = \frac{1}{u}$ (u - dim des Hilbertraums)
 $\rightarrow \eta(\hat{\rho}_u) = k \ln u$

(c) jeder andere stat. Op. hat kleineres η als $\hat{\rho}_u$

3. Der generalisierte kanonische stat. Operator (GRSO)

bisher: $\hat{\rho} \rightarrow \eta(\hat{\rho})$

jetzt: $\eta(\hat{\rho}) \rightarrow \hat{\rho}$ (denn $\text{tr}(\hat{\rho}\hat{\rho})$ ist Ziel)

Satz von Observablen festlegen um Zustand des Systems zu beschreiben (z.B.: $\hat{H}, \hat{p}, \hat{A}$)

$\rightarrow$ Beobachtungsebene: $\{\hat{G}_v\} + \text{lin. Kombinationen}$

- Die $\{\hat{G}_v\}$ sind nur kleiner Teil der mgl. Observablen (nicht alle sind phys. zugängl. oder interessant).

- sie müssen nicht zwingend kommutieren.

(falls BE nicht ausreichend kann man erweitern)

phys. System Σ mit BE $\{\hat{G}_v\}$ ($v=1, \dots, u$)

aus den wenigen (u) EWe $\langle \hat{G}_v \rangle$ ist stat. Op. $\hat{\rho}$ von Σ nicht eindeutig bestimmt!

• Problem: versch. $\hat{\rho}$'s erzeugen gleiche $\langle \hat{G}_v \rangle$, haben aber auch untersch. $\eta(\hat{\rho})$

(4)

Wir müssen vorurteilsfrei denjenigen $\hat{\rho}$ bestimmen der zu unserer BE $\{\hat{G}_\nu\}$ gehört, sonst steckt man „mehr Info“ in den stat. Op. als durch BE tatsächlich gegeben ist: größtes Unschärfemaß

- $$\begin{array}{l} (1) \quad \text{tr}(\hat{\rho}) = 1 \\ (2) \quad \text{tr}(\hat{\rho} \hat{G}_\nu) = \langle \hat{G}_\nu \rangle \\ (3) \quad \eta(\hat{\rho}) = \text{maximum} \end{array} \quad \left. \vphantom{\begin{array}{l} (1) \\ (2) \end{array}} \right\} \begin{array}{l} \text{nicht} \\ \text{ausreichend} \end{array}$$

Der Operator $\hat{\rho} =: \hat{R}$ der alle 3 Bed. erfüllt ist der GKSO:

$$\hat{R}_{\{\hat{G}_\nu\}} = \frac{e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \hat{G}_\nu}}{\underbrace{\text{tr}(e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \hat{G}_\nu})}_{\text{Zustandssumme, sichert Bed. (1)}}} \quad \begin{array}{l} \lambda_\nu - \text{Lagrange} \\ \text{Multiplikatoren} \end{array}$$

$\eta(\hat{R}) \geq \eta(\hat{\rho}) \Rightarrow$ Informationsverlust bei Reduktion der dynamik auf makro. Größen $\{\hat{G}_\nu\}$

• Repräsentativ:

GKSO $\hat{R}_{\{G\}}$ der zur BE $\{G\}$ gehört liefert automatisch die richtigen EW (Meßwerte) bezüglich $\{G\}$:

$$\langle \hat{G}_\nu \rangle = \text{tr}(\hat{R}_{\{G\}} \hat{G}_\nu)$$

Für andere Observablen $\hat{F} \notin \{G\}$ hinreichend genaue EW?

$$\langle \hat{F} \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{F}) \approx \text{tr}(\hat{R}_{\{G\}} \hat{F})$$

Hartree - Fock - Faktorisierung

1. Motivation: Correlation Functions

Makroskop. System $\rightarrow$ viele Teilchen $\rightarrow$ mit Q's beschreiben

betrachte räumlich inhomogenen Prozeß in Volumen V ,
(Wärmeleitung)

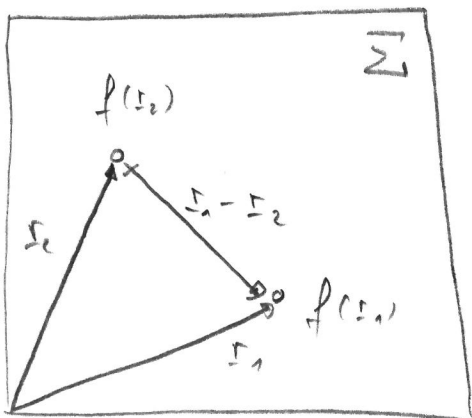
dann brauchen wir Dichten

Extensive Größen: $\int_V f(\mathbf{r}) d^3r$ ($t = \text{fest}$)
Bsp. Teilchen, Strom, Spindichte
mikroskop. Dichte parametrisiert durch $\mathbf{r}$

Fluktuation: $\delta f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) - \langle f(\mathbf{r}) \rangle$
Abweichung des Meß- von EW

Korrelation: zwei Beobachtungspkte: $\mathbf{r}_1$ u. $\mathbf{r}_2$
 $\delta f(\mathbf{r}_1) \delta f(\mathbf{r}_2)$

Korrelationsfkt.: $\langle \delta f(\mathbf{r}_1) \delta f(\mathbf{r}_2) \rangle =$
 $= \langle f(\mathbf{r}_1) f(\mathbf{r}_2) \rangle - \langle f(\mathbf{r}_1) \rangle \langle f(\mathbf{r}_2) \rangle$



wenn $\mathbf{r}_1$ u. $\mathbf{r}_2$ weit voneinander entfernt sind, dann

$$\underbrace{W_{f_1 f_2}} \approx W_{f_1} W_{f_2}$$

$$f(\mathbf{r}_1) = f_1$$

$$f(\mathbf{r}_2) = f_2$$

In Sprache der QM:

$$\text{tr}(\hat{S} P_{f_1} P_{f_2}) \approx \text{tr}(\hat{S} P_{f_1}) \text{tr}(P_{f_2})$$

mit P_{f_1} ist Projektor auf ER zu EW $f_1 = f(r_1)$

$$\langle f(r_1) f(r_2) \rangle = \sum_{f_1, f_2} f_1 f_2 W_{f_1, f_2} \approx \langle f(r_1) \rangle \langle f(r_2) \rangle$$

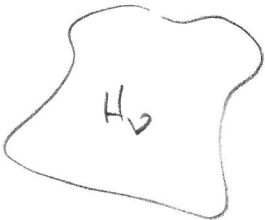
Korrelationslänge: $\langle \delta f(r_1) \delta f(r_2) \rangle \approx 0$ für $|r_1 - r_2| > \xi$
 $(\xi = \xi(f, \hat{S}))$

- Fazit: Für makroskop. Observablen sind die QS berechneten EW (fast) identisch mit den Meßwerten

in FKT :

$$\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle \approx \langle a_1^\dagger a_4 \rangle \langle a_2^\dagger a_3 \rangle - \langle a_1^\dagger a_3 \rangle \langle a_2^\dagger a_4 \rangle + \langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle^{\text{corr}}$$

d.h. $\text{tr} (a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \hat{\rho})$ ist gesucht
entsprechend der Korr.-stufe wählen



$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\sum_D \lambda_D(t) H_D}}{\text{tr} (e^{-\sum_D \lambda_D(t) H_D})} \quad (\text{Dynamik} + \text{NGG})$$

(Bsp.: großkan. $\rho \sim e^{-\beta H - \mu N}$)

Verallgem. für FK :

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\sum_{ij} \lambda_{ij} a_i^\dagger a_j}}{\text{tr} (e^{-\sum_{ij} \lambda_{ij} a_i^\dagger a_j})}$$

- Alle mögl. Observablen $a_i^\dagger a_j$ sind in Dynamik einbezogen
- $\lambda_{ij} = \lambda_{ij}(t)$ zeitabh. + NGG Prozesse

2. Aufgabe 3

(7)

Im ersten Teil: $\hat{S} = \frac{e^{-\sum_k \lambda_k^d b_k^\dagger b_k}}{\prod_k (1 + e^{-\lambda_k})}$

- Matrix diagonalisieren und Operatoren in neuer Basis

darstellen: $a_i^\dagger = \sum_n \phi_{ni} b_n^\dagger$

$$a_i = \sum_n \phi_{in} b_i$$

- Zustandssumme berechnen: macht, dass $\text{tr}(\hat{S}) = 1$!!

$$Z = \text{tr} \left(e^{-\sum_n \lambda_n^d b_n^\dagger b_n} \right)$$

$$= \sum_{\{u_i\}} \langle u_1, \dots, u_N | e^{-\sum_n \lambda_n b_n^\dagger b_n} | u_1, \dots, u_N \rangle$$

$$= \sum_{\{u_i\}} \underbrace{\langle u_1, \dots, u_N | u_1, \dots, u_N \rangle}_1 e^{-\sum_n \lambda_n^d u_n}$$
$$= e^{-\lambda_1 u_1 - \lambda_2 u_2 - \dots - \lambda_N u_N}$$

$$= | \text{Fermionen } u_i = 0, 1 |$$

$$= 1 + e^{-\lambda_1^d} + e^{-\lambda_2^d} + e^{-\lambda_1^d - \lambda_2^d} + \dots$$

$$= (1 + e^{-\lambda_1})(1 + e^{-\lambda_2})$$

$$= \prod_n (1 + e^{-\lambda_n^d})$$

⑧

$$\text{tr} (a_i^\dagger a_j \rho)$$

$$= \sum_{nm} \text{tr} (b_n^\dagger b_m \rho) \phi_{ni} \phi_{jm}^*$$

$$\text{tr} (b_n^\dagger b_m \rho) = \sum_{\{u_i\}} \langle N, u_m, u_1, \dots | b_n^\dagger b_m \frac{e^{-\sum_k \lambda_k b_k^\dagger b_k}}{\prod_k (1 + e^{-\lambda_k})} | N, u_m, \dots \rangle$$

$$= \sum_{\{u_i\}} \langle N, u_m, \dots | b_n^\dagger b_m | N, u_m, \dots \rangle \frac{e^{-\sum_k \lambda_k u_k}}{\prod_k (1 + e^{-\lambda_k})}$$

$$= \sum_{\{u_i\}} \langle N, u_m, \dots | b_n^\dagger \sqrt{u_m} | N-1, \underbrace{u_m-1}_0, \dots \rangle$$

$$= \sum_{\{u_i\}} \langle N-1, u_1, \dots | \delta_{nm} \sqrt{u_m} \sqrt{u_m} | N-1, \dots \rangle$$

$$= \sum_{\{u_i\}} \delta_{nm} u_m \frac{e^{-\sum_k \lambda_k u_k}}{\prod_k (1 + e^{-\lambda_k})}$$

$$= \delta_{nm} \frac{e^{-\lambda_m}}{1 + e^{-\lambda_m}} = \delta_{nm} \frac{1}{e^{\lambda_m} + 1}$$

$$\Rightarrow \text{tr} (a_i^\dagger a_j \rho) = \sum_m \frac{\phi_{mi} \phi_{jm}^*}{e^{\lambda_m} + 1}$$

Nachtrag:

(1) folgende Entwicklung soll gezeigt, nicht
beurteilt werden:

$$\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle \approx \langle a_1^\dagger a_4 \rangle \langle a_2^\dagger a_3 \rangle - \langle a_1^\dagger a_3 \rangle \langle a_2^\dagger a_4 \rangle$$

(1b) $\eta(\beta_n) = \ln \mu_n$

(2) $\text{tr}(a_i^\dagger a_j \rho)$

$$= \sum_{\{u_i\}} \sum_n \mu_n \frac{e^{-\sum_k \lambda_k u_k}}{\prod_k (1 + e^{-\lambda_k})} = \sum_n \frac{e^{-\lambda_n}}{1 + e^{-\lambda_n}}$$

$$= \frac{e^{-\lambda_n \mu_n}}{(1 + e^{-\lambda_n})} \sum_n \mu_n \frac{\sum_{\{u_i\}} e^{-\sum_{k \neq n} \lambda_k u_k}}{\prod_{k \neq n} (1 + e^{-\lambda_k})} \quad (*)$$

$$(*) = \sum_{u_1=0}^1 \sum_{u_2=0}^1 \dots \sum_{u_N=0}^1 \prod_k e^{-\lambda_k u_k}$$

$$= \underbrace{\sum_{u_1=0}^1 e^{-\lambda_1 u_1}}_{(1 + e^{-\lambda_1})} \sum_{u_2=0}^1 e^{-\lambda_2 u_2} \dots \sum_{u_N=0}^1 e^{-\lambda_N u_N}$$

$$= \prod_{k \neq n} (1 + e^{-\lambda_k})$$