Kap V Quantenstatistik

5.1 Dichtematrix / Dichteoperator

Bisher: Reine Zustände $|\psi\rangle$ $\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi| = \langle\psi|H$

$$\Rightarrow \boxed{|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle}$$

Messungen liefern den Erwartungswert $\langle\psi|A|\psi\rangle$

qm. Unschärfe $\Delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2} \neq 0$ (i Allgemeinen)

Umschreiben
(Spur $\hat{=}$ trace)

Projektor auf ψ

$P_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi|$

$$\boxed{\begin{aligned}\langle\psi|A|\psi\rangle &= \sum_{|n\rangle} \langle\psi|A|n\rangle\langle n|\psi\rangle \\ &= \sum_{|n\rangle} \langle n|\psi\rangle\langle\psi|A|n\rangle \\ &= tr(|\psi\rangle\langle\psi|A) \\ &= tr(P_{|\psi\rangle}A) \\ &= \sum_{n,n'} \langle n|P_{|\psi\rangle}|n'\rangle\langle n'|A|n\rangle \\ &= \sum_{n,n'} (P_{|\psi\rangle})_{nn'} A_{n'n}\end{aligned}}$$

Gemischte Zustände

Oft kennen wir die klassische Wahrscheinlichkeiten $W_{|\psi\rangle}$, dass das System in den Zuständen $|\psi\rangle$ ist.

$$\sum_{|\psi\rangle} W_{|\psi\rangle} = 1$$

Ergebnis vieler Messungen: quantenstatistischer Mittelwert

$$\boxed{\overline{\langle A\rangle}} = \sum_{|\psi\rangle} W_{|\psi\rangle}\langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{|\psi\rangle}\sum_{|n\rangle} W_{|\psi\rangle}\langle\psi|A|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$= \sum_{|n\rangle}\sum_{|\psi\rangle} \langle n|\psi\rangle W_{|\psi\rangle}\langle\psi|A|n\rangle = \boxed{tr\{\hat{\rho}A\}} \quad (*)$$

$$\boxed{\hat{\rho} = \sum_{|\psi\rangle} W_{|\psi\rangle}|\psi\rangle\langle\psi|} = \text{Dichteoperator}$$

- Wenn $\hat{\rho}$ bekannt ist erhalten wir alle qu. stat. Mittelwerte durch Spurbildung (*)
- normiert $\boxed{tr(\hat{\rho}) = 1}$
- hermitesch $\boxed{\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}}$
- positiv definit: für alle $|\varphi\rangle$ gilt $\langle\varphi|\hat{\rho}|\varphi\rangle \geq 0$ (Diagonalelemente)
- $\boxed{tr\{\hat{\rho}A\} = \sum_{nn'} \langle n|\hat{\rho}|n'\rangle\langle n'|A|n\rangle = \rho_{nn'}A_{n'n}}$

$\hat{\rho}$ ist in vorgegebener Basis $|n\rangle$ i. Allg. nicht diagonal.

- $\hat{\rho}$ kann diagonalisiert werden, $\hat{\rho} = \sum W_{|n\rangle} |n\rangle\langle n|$
  aber oft ist die Basis $|n\rangle$ nicht physikalisch relevant.
- Dichtematrizen beschreiben auch reine Zustände
  Dafür ist $W_{|\psi\rangle} = 1$ nur für einen Zustand $|\psi\rangle$
  $\Rightarrow \boxed{\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = P_{|\psi\rangle}}$, d.h. $\hat{\rho}$ ist ein Projektor, $\boxed{\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}}$
  äquivalent $\boxed{\mathrm{tr}\, \hat{\rho}^2 = 1}$ $\Leftarrow$ für reine Zustände
  Für Gemisch $\boxed{\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}}$ und $\boxed{\mathrm{tr}\, \hat{\rho}^2 < 1}$
- Zeitentwicklung $\underline{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t)} = i\hbar \sum_{|\psi\rangle} W_{|\psi\rangle} \left(\left(\frac{d}{dt}|\psi\rangle\right)\langle\psi| + |\psi\rangle \left(\frac{d}{dt}\langle\psi|\right) \right)$
  $= \sum_{|\psi\rangle} W_{|\psi\rangle} \left(H|\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\langle\psi| H \right)$

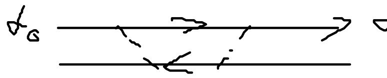
Liouvillegleichung $\boxed{= [H, \hat{\rho}]}$ (Vorzeichen anders als Heisenberg)

alternativ: $|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$

$\hat{\rho}(t) = U(t,t_0)\, \hat{\rho}(t_0)\, U^\dagger(t,t_0)$

vorwärts — rückwärts Zeitentwicklung

- Reale Probleme $\Rightarrow$ vorwärts und rückwärts Zeitentwicklung werden gekoppelt



„Keldysh-Contour"

- Für H **zeitunabhängig**, Basis $|n\rangle$ von H
  mit $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{nn'} = \langle n|[H,\hat{\rho}]|n'\rangle = (E_n - E_{n'})\rho_{nn'}$
  $\Rightarrow \rho_{nn'} \neq \mathrm{const}$, $\rho_{nn'}(t) = e^{-i(E_n - E_{n'})t/\hbar} \rho_{nn'}(0)$
  Diagonalelemente sind konst, Nebend. Element oszillieren

Beispiel Spin in reinem Zustand

$|\psi_0\rangle = \alpha_0|+\rangle + \beta_0|-\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \beta_0 \end{pmatrix}$

$\Rightarrow \langle \sigma_z \rangle = \mathrm{tr}\{\hat{\rho}\,\sigma_z\} \ldots$

$\hat{\rho} = |\psi_0\rangle\langle\psi_0| = (\alpha_0|+\rangle + \beta_0|-\rangle)(\alpha_0^*\langle+| + \beta_0^*\langle-|)$
$= |\alpha_0|^2 |+\rangle\langle+| + \alpha_0\beta_0^* |+\rangle\langle-|$
$+ \beta_0\alpha_0^* |-\rangle\langle+| + |\beta_0|^2 |-\rangle\langle-|$
$= \begin{pmatrix} |\alpha_0|^2 & \alpha_0\beta_0^* \\ \alpha_0^*\beta_0 & |\beta_0|^2 \end{pmatrix}$

Zeitentwicklung für $H = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z$

$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{i\frac{\omega_0}{2}t}\alpha_0|+\rangle + e^{-i\frac{\omega_0}{2}t}\beta_0|-\rangle$

$\Rightarrow \rho(t) = \begin{pmatrix} |\alpha_0|^2 & \alpha_0\beta_0^* e^{i\omega_0 t} \\ \alpha_0^*\beta_0 e^{-i\omega_0 t} & |\beta_0|^2 \end{pmatrix}$ schnelle Oszillation der Nebendiagonalen

Ensemble von Spins mit $|\psi\rangle = e^{i\chi}\left(|\alpha| e^{i\frac{\varphi}{2}}|+\rangle + |\beta| e^{-i\frac{\varphi}{2}}|-\rangle\right)$

mit $|\alpha|$ und $|\beta|$ fest, aber Phasen χ und φ sind nicht kontrolliert

$$\Rightarrow \hat\rho = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & |\alpha||\beta|e^{i\varphi} \\ |\alpha||\beta|e^{-i\varphi} & |\beta|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & 0 \\ 0 & |\beta|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_+ & 0 \\ 0 & P_- \end{pmatrix}$$

mit $P_+ = |\alpha|^2$ Wahrscheinlichkeit im Zustand $|+\rangle$ zu sein

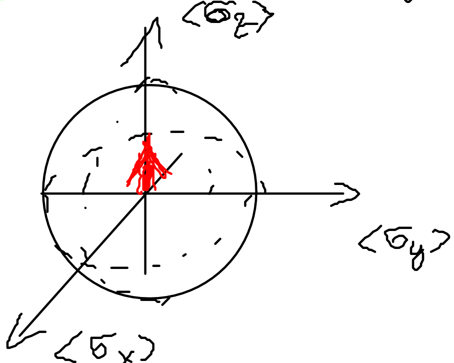
5.2 Thermisches Gleichgewicht

Fundamentales Postulat der Quantenstatistik

$$\boxed{\hat\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}} \qquad \boxed{\beta = \frac{1}{k_B T}} \qquad \mathrm{tr}\,\hat\rho = 1 \Rightarrow \boxed{Z = \mathrm{tr}\, e^{-\beta H}}$$ Zustandssumme

Beispiel Spin $H = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z$ $\quad \hat\rho = \frac{1}{e^{\beta\frac{\hbar\omega_0}{2}} + e^{-\beta\frac{\hbar\omega_0}{2}}}\begin{pmatrix} e^{\beta\frac{\hbar\omega_0}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\beta\frac{\hbar\omega_0}{2}} \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \boxed{\langle\sigma_z\rangle} = \mathrm{tr}\{\hat\rho\,\sigma_z\} = \tanh\left(\beta\frac{\hbar\omega_0}{2}\right)$$



Harmonischer Oszillator $H|n\rangle = \overbrace{\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)}^{E_n}|n\rangle \qquad n = 0, 1, \ldots$

$$\hat\rho_{n'n} = \frac{1}{Z}\langle n'|e^{-\beta H}|n\rangle = \frac{\delta_{n'n}}{Z} e^{-\beta E_n}$$

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} = \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$\Rightarrow \rho_{n'n} = \delta_{n'n}\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)\cdot e^{-\beta\hbar\omega n}$$

$$\boxed{\langle n\rangle} = n_{th} = \sum_n \rho_{nn}\, n = \boxed{\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}}$$ $\Rightarrow$ Bose-Einstein-Verteilung