12. Statistisches Gemisch vs. "reiner Zustand"; Meßvorgang; Axiome der QM

Woche vor Klausur

12.1 Präparationsmessung, statistischer Operator

Messungen (Observable) $\longleftrightarrow$ s.a. Operatoren

speziell: Präparationsmessungen: Projektionsoperatoren

$$P^2 = P$$

$$P \text{ s.a.}$$

z.B. Energiemessung

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (\text{Ann. keine Entartung})$$

$|n\rangle$ ist Zustand mit scharfer Energie ("reiner" Zustand)

$|c_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2$ Wahrscheinlichkeit in $|\psi\rangle$ Energie E_n zu messen

$$\left(|c_n|^2 = \langle\psi|P_n|\psi\rangle \; ! \right.$$
$$\left. (= \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle) \right)$$

P_n mißt Wahrscheinlichkeit!)

(i) Nach Messung von E_n $(\sim P_n!)$ (keine E_m mit $m \neq n$!)

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n|\psi\rangle}_{c_n} \Rightarrow |n\rangle$$

quantenmech. Reduktion von $|\psi\rangle$

Messung verändert Zustand!

weitere Messungen P_n ergeben keine weitere Veränderung

(ii) Wir machen Energiemessung (alle E_n), nehmen aber Ergebnis nicht zur Kenntnis.

Reduktion hat trotzdem stattgefunden – ist Eigenschaft der Meßapparatur ($\leadsto$ Argumente à la Heisenberg-Büchlein $\to$ Feynman-Lect.) nicht an Beobachter gekoppelt: "ohne Hinsehen"

$\to$ qu. Gemisch (Kenntnis vermindert)

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle c_n \Rightarrow \quad |1\rangle \quad \text{mit Wahrscheinlichkeit } |c_1|^2 =: \rho_1$$
$$|2\rangle \quad \text{"} \quad |c_2|^2 =: \rho_2$$
$$\vdots$$

wie in der statistischen Mechanik / Thermodynamik!

reiner Zustand	Gemisch
$\|\psi\rangle = \sum_n \|n\rangle c_n$	$(\|1\rangle, \rho_1) \dots (\|n\rangle, \rho_n)$
$\bar{A} = \langle\psi\|A\|\psi\rangle$	$\bar{A} = \sum_n \rho_n \langle n\|A\|n\rangle$, $\rho_n = \|c_n\|^2$
$= \sum_{n,n'} c_{n'}^* c_n \underline{\underline{A_{n'n}}}$	keine Interferenz!
Interferenz!	

(i.a. ist A nicht Operator der Präparationsmessung)

$\bar{A} = \mathrm{tr}\, A P_\psi$ ('Spur')	$\bar{A} = \mathrm{tr}\, A\rho$
$= \mathrm{tr}(A\|\psi\rangle\langle\psi\|)$ $\leftarrow$ speziell	mit $\rho = \sum_n \rho_n \|n\rangle\langle n\|$
$\overset{!}{=} \langle\psi\|A\|\psi\rangle$	$= \sum_n \rho_n P_n$
	'Dichtematrix'

$$\bar{1} = 1 \leadsto \mathrm{tr}\,\rho = 1 : \sum_n \rho_n = 1 \quad \Big(\sum_n |c_n|^2 = 1$$ in obigem Beispiel)

allgemeine Eigenschaften von ρ:

$$\boxed{\rho^+ = \rho \ (\text{s.a.} \ldots), \quad \rho \geq 0, \quad \mathrm{tr}\,\rho = 1}$$

d.h. alle E.W. ≥ 0

Statistische Gesamtheit wird durch Dichtematrix ρ charakterisiert.

12.2 Reine (homogene) Gesamtheit; Dispersionsfreiheit

Bem: allgemeine Eigenschaft des Erwartungswertes

(i) $\mathrm{Erw}\left(\sum_i \alpha_i A_i\right) = \sum_i \alpha_i \, \mathrm{Erw}(A_i)$

(ii) $\mathrm{Erw}(A^2) \geq 0$

(iii) $\mathrm{Erw}(A)$ reell } $\forall$ s.a. Op. A

(iv) $\mathrm{Erw}(B) = 0 \ \forall B$ nicht möglich

(i) – (iv)
Satz $\rightarrow$ $\mathrm{Erw}(A) = \mathrm{tr}(A\rho)$ mit $\rho^+ = \rho$, $\rho \geq 0$, $\mathrm{Spur}\,\rho = 1$

Gesamtheit heißt rein, wenn bei einer beliebigen Zerlegung sich der Erwartungswert bzgl. der Teilgesamtheiten mit dem Erwartungswert für die ganze Gesamtheit deckt (Bsp. Polarisation)

äquivalent $\longleftrightarrow$ ρ beschreibt genau dann eine reine (homogene) Gesamtheit, wenn aus $\rho = \rho_1 + \rho_2$ mit ρ_1, ρ_2 herm., positiv (nicht $\mathrm{tr}\,\rho = 1$) folgt $\rho_i = c_i \rho$

äquivalent $\longleftrightarrow$ $\rho = P_\varphi$ mit $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ (siehe Beilage!)

Def: Eine homogene Gesamtheit:

alternativ (äquivalent)

① Für jede Zerlegung in 2 Teil-Ensembles gilt

$$Erw_{\gamma'}(A) = Erw_{\gamma''}(A) = Erw_{\gamma}(A) \quad \forall A = A^+$$

mit $\gamma = \gamma' \cup \gamma''$ (disjunkt!)

② Für jede Zerlegung $\rho = \rho' + \rho''$ mit ρ', ρ'' herm., pos (nicht auf $Sp\, \rho', '' = 1$ norm.)

$$\to \rho' = \alpha \rho \quad \rho'' = (1-\alpha)\rho$$

Bew. (der Äquivalenz)

② → ①

Sei $\gamma = \gamma' \cup \gamma''$ $\quad$ ($\gamma' \cap \gamma'' = \phi$ disjunkt)

$\downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow$

ex. $\rho \quad \underbrace{\rho', \rho''}_{\text{nicht normiert}}$ definiert für γ', γ''

o.B.d.A. $\rho = \rho' + \rho''$ (Erwartungswert in γ ist (A-mittl.) Linearkombination d. Erwartungswert in γ', γ'')

$$\alpha \frac{Sp\, \rho' A}{Sp\, \rho'} + (1-\alpha) \frac{Sp\, \rho'' A}{Sp\, \rho''} = Sp[(\rho' + \rho'')A] \quad \text{mit } Sp\, \rho' = \alpha,\ Sp\, \rho'' = 1-\alpha \ \text{Wahl}$$

② $\to \rho' = \alpha\rho \quad \rho'' = (1-\alpha)\rho$

$\to$ ①

① → ②

evident

(3) Ensemble ist genau dann homogen, wenn $\rho = P_\varphi$ mit $\varphi \in \mathcal{H}$

Bew. mit Spektralzerl. $\rho = \text{"}\sum\text{"} \underset{\text{pos.}}{\lambda} P_\lambda$

(2) → (3) per Widerspr. Bew.

Ann. mehrere P_λ ⇒ ex. Zerlegung mit $\rho', \rho'' \neq \rho$

(3) → (2) $P_\varphi = \rho' + \rho'' = \sum \underset{\geq 0}{\lambda'} P_{\lambda'} + \sum \underset{\geq 0}{\lambda''} P_{\lambda''}$

nur P_φ bleibt über!

(beide Ausdrücke getrennt geben nur einen Beitrag zwischen $\langle \varphi | \ldots | \varphi \rangle$ (≥ 0!)

Dispersionsfreie Gesamtheiten

Def. Eine Gesamtheit γ heißt <u>dispersionsfrei</u>, wenn für <u>alle</u> s.a. Operatoren A gilt

$$\mathrm{Erw}_\gamma A^2 = (\mathrm{Erw}_\gamma A)^2$$

Satz: Es gibt in der QM <u>keine</u> dispersionsfreie Gesamtheiten (wohl aber homogene!)

Bew. (i) für homogene Gesamtheit $\rho = P_\varphi$

Ann. $\langle\varphi|A|\varphi\rangle^2 = \langle\varphi|A^2|\varphi\rangle$

$(= \mathrm{tr}\, A P_\varphi!)$

nehme V.o.n.S. $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle \ldots\}$ mit $|\varphi\rangle = |\varphi_1\rangle$

$$\rightarrow \langle\varphi|A^2|\varphi\rangle = \sum_i \langle\varphi|A|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|A|\varphi\rangle$$
$$= \langle\varphi|A|\varphi_1\rangle\langle\varphi_1|A|\varphi\rangle$$

$$\rightarrow \langle\varphi|A|\varphi_i\rangle = 0 \qquad i = 2, 3 \ldots$$

$$\rightarrow A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle \quad \text{E.V.}$$

betrachte nun B mit: $[B, A] \neq 0 \rightarrow |\varphi\rangle$ ist nicht simultaner E.V. zu A, B

$\rightarrow$ gilt <u>nicht</u> für <u>alle</u> s.a. Operatoren!

(ii) allgemein $\rho = \sum_i \lambda_i P_{\varphi_i}$ mit $\sum_i \lambda_i = 1$, $\lambda_i \geq 0$

$\rightarrow \lambda_i < 1$

$$(\mathrm{tr}\, A\rho)^2 = \Big(\sum_i \lambda_i \underbrace{\mathrm{tr}\, A P_{\varphi_i}}_{\langle\varphi_i|A|\varphi_i\rangle}\Big)^2 \neq \sum_i \lambda_i \langle\varphi_i|A^2|\varphi_i\rangle$$

da $\left(\sum_i \lambda_i \alpha_i\right)^2 < \sum_i \lambda_i \alpha_i^2$ $\perp$

Bem.

allgem. Projektionsoperatoren: $P_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ bisher

$$P_\varphi|f\rangle = |\varphi\rangle\langle\varphi|f\rangle$$

$\{|\varphi_\nu\rangle\}$ sei vollst. o.n. System in M, einem Unterraum von $\mathcal{H}$

$\rightarrow$ $P_M = \sum_{\nu=1}^{k} P_{\varphi_\nu}$ ist Projektionsoperator, d.h. • $P_M^2 = P_M$ • s.a.

$P_{\varphi_i} P_{\varphi_k} = 0$ für $i \neq k$

$|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$!

$\mathrm{tr}\, P_M = k$; ! $\rho = P_M/k$ ist kein Projektionsoperator

12.3 Beispiel Elektronenspin / Zweiniveausystem

ρ ist herm., positive 2×2 Matrix

(i) $\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$ $\mathrm{tr}\,\rho = 1$, $\rho \geq 0$

$\mathrm{tr}(\rho S_i) = \frac{1}{4}\hbar\, \mathrm{tr}\, \sigma_i = 0$ $\rho^2 \neq \rho$!

Pauli-Matrix kein Projektionsop.

unpolarisierter Strahl

(ii) $\rho = \begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}$ $\mathrm{tr}\,\rho = 1$, $\rho \geq 0$

$\rho^2 = \rho$ Projektionsoperator $\longrightarrow$ reiner Zustand

$\mathrm{tr}(\rho S_3) = \hbar\, \mathrm{tr}(\rho \frac{1}{2}\sigma_3) = \frac{1}{2}\hbar$

$\mathrm{tr}(\rho S_{1,2}) = \mathrm{tr}(\rho \frac{1}{2}\sigma_{12}) = 0$

$\sigma_1 = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$

(iii) allgemein $\boxed{\rho = \alpha \mathbb{1} + \frac{\vec{\beta}}{2}\cdot\vec{\sigma}}$ $\rho^+ = \rho \rightsquigarrow \alpha, \vec{\beta}$ reell

$\langle\psi|\rho|\psi\rangle \geq 0 \rightsquigarrow |\vec{\beta}| \leq 1$ $\mathrm{tr}\,\rho = 1 \rightsquigarrow \alpha = \frac{1}{2}$

$$\mathrm{tr}\left(\rho \frac{\vec\sigma}{2}\right) = \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}\hbar\,\mathrm{tr}\left(\vec\beta\cdot\vec\sigma\,\vec\sigma\right) = \vec\beta/2\,\hbar$$

$\mathrm{tr}\,\sigma_i\sigma_k = 2\delta_{ik}$

$$|\vec\beta| = 1 \qquad \rho^2 = \frac{(1+\vec\beta\vec\sigma)^2}{4} = \left(1+\vec\beta^2 + 2\vec\beta\cdot\vec\sigma\right)/4$$

$$= \rho \quad \to \text{reiner Zustand!}$$

$\vec\beta$: "Polarisationsvektor"

$$\rho = \left(1+\vec\beta\cdot\vec\sigma\right)/2$$

12.4 Gleichverteilung, kanonische Verteilung

Hinweis "Informationsentropie" (Shannon)

$$S = -\mathrm{tr}(\rho\ln\rho)$$

+ Extremalprobleme

(i) Entartung der Energiewerte E_n : $\rho = ?$

muß gelten $\mathrm{tr}\,\rho P_{E_n} = 1$

$$P_{E_n} = \sum_{\alpha=1}^{k} |n,\alpha\rangle\langle n,\alpha|$$

$$\to \boxed{\rho = P_{E_n}/k} \qquad P_{E_n}^2 = P_{E_n}$$

mikrokanonische Verteilung

(ii) Quantenstatistik

$$\rho_{E_n} = \frac{e^{-E_n/kT}}{\sum_{n'} e^{-E_{n'}/kT}} \quad \text{kanonische Verteilung}$$

$$\boxed{\rho = \frac{e^{-H/kT}}{\mathrm{tr}\, e^{-H/kT}}} \longrightarrow \text{Thermodynamik + Statistik}$$

bei Entartung wie in (i) zu modifizieren!

12.5 Veränderung des stat. Operators bei Präparationsmengen (P)

allgemein :

$$\rho \to \rho' = \frac{P\rho P}{\mathrm{tr}\, P\rho P}$$

ist plausibel, wird später in Axiom aufgenommen. (87

(i) ρ' ist statist. Operator

(ii) Gleichverteilung geht bei Präp.-Messung auf Teilraum über ($P_{E_n} = \sum_{\{\beta\}\subset\{\alpha\}} |n,\beta\rangle\langle n,\beta|$)

$P = P'_{E_n}$, $\rho = \frac{P_{E_n}}{k}$ — ($\hat{=}$ mikrokanonisches Ensemble)

$\rho' = P_{E_n}/k'$

! haben Veränderung durch Schröd.-gl. und Reduktion!

12.6 Zeitliche Veränderung von ρ im Schrödinger Bild

$\bar{A} = \mathrm{tr}(A\rho)$. Schröd. Bild A zeitunabh. ρ zeitabhängig !

$= \mathrm{tr}(A_H \rho_H)$

$= \mathrm{tr}(A_S \rho_S)$! Heisenberg Bild A zeitabhäng. ρ zeitunabhäng..

$A_H = U^{-1} A_S U$

$U = e^{-i/\hbar\, Ht}$

$\rho_S = U \rho_H U^{-1}$

$\dot{A}_H = \frac{i}{\hbar}[H, A_H] + \frac{\partial}{\partial t} A_H$

$\overline{\dot{A}_H} = \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{tr}(\underbrace{H A_H \rho_H}_{\text{zykl. perm.} \rightarrow A_H \rho_H H} - \underbrace{A_H \rho_H}_{\checkmark}) + \mathrm{tr}(\frac{\partial}{\partial t} A_H \rho)$

$= \frac{-i}{\hbar}\,\mathrm{tr}(A_H \,\overset{\wedge}{}\, [H, \rho_H]) + \mathrm{tr}(\frac{\partial}{\partial t} A_H \rho_H)$

$UU^+ \quad UU^+ \ldots$

nur explizite Abh.!

$\rho_H = U^{-1} \rho_S U$

$(\mathrm{Spur}\, A_S \rho_S)^{\cdot} = \frac{-i}{\hbar}\,\mathrm{tr}(A_S [H_S, \rho_S]) + \mathrm{tr}(\frac{\partial}{\partial t} A_S \rho_S)$

$\Rightarrow$! beachte − Zeichen!

$$\boxed{\dot{\rho}_S = \frac{-i}{\hbar}[H_S, \rho_S]}$$

(Heisenberg-gl. mit 'falschem' Vorzeichen)

Von Neumann Gl.

12.7 Axiome der Quantenmechanik (vgl. Grawert)

1.) Den Observablen (meßbaren Größen) eines physikalischen Systems sind eineindeutig die selbstadjungierten Operatoren in einem Hilbert-Raum der physikalischen Zustände zugeordnet. Die möglichen Meßwerte einer Einzelmessung sind gegeben durch das Eigenwertspektrum des Operators.

2.) Die Operatoren des (kartesischen) Orts und Impulses haben ein kontinuierliches Eigenwertspektrum $[-\infty, +\infty]$ und genügen den (Heisenbergschen) Vertauschungsrelationen

$$[p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ij}, \quad [p_i, p_j] = [x_i, x_j] = 0$$

Physikalischen Größen, die als Funktionen (Polynome) der kanonisch konj. Variablen Ort und Impuls im Rahmen der klassischen Mechanik gegeben sind, sind die entsprechenden hermitisierten Funktionen der Orts- und Impulsoperatoren zugeordnet.

3.) Die Quantenmechanik macht (quantitative) Aussagen über das Verhalten von Gesamtheiten von phys. Systemen, i.e. Wahrscheinlichkeitsvorhersagen. Dem Zustand der Gesamtheit ist ein "statistischer" Operator ϱ mit $\varrho^+ = \varrho$, $\mathrm{Spur}\,\varrho = 1$, $\varrho \geq 0$ zugeordnet.

Es gilt $\bar{A} = \mathrm{Erw.}(A) = \langle A \rangle = \mathrm{tr}(A\varrho)$

Für $\rho = P_\psi$ (Projektionsoperator) haben wir einen sog. reinen Zustand. (89

4.) Spezielle statistische Operatoren bestimmen sich aus der Präparation der Gesamtheit. Wird bei der Präparation eine Eigenschaft gemessen, der der Projektionsoperator P zugeordnet ist, so muß ρ die Bedingung $\mathrm{tr}(\rho P) = 1$ (*) erfüllen. Wird die Gesamtheit vor der Präparationsmessung durch ρ_1 beschrieben, so gilt nach der Präp.-Messung

$$\rho_2 = \frac{P \rho_1 P}{\mathrm{tr}(P \rho_1 P)}$$

5.) Die zeitliche Entwicklung einer quantenmech. Gesamtheit wird durch einen unitären Operator U_t mit

$$\dot{U}_t = \frac{i}{\hbar} H U_t$$

beschrieben, wobei H der Hamilton-Operator des Systems ist.
Es gilt

$$\langle A \rangle_t = \mathrm{tr}(U_t \rho U_t^+ A)$$

<u>Bem.</u>
- es gibt also <u>zwei</u> Änderungen einer Gesamtheit
  1.) $\rho(t) = U_t \rho U_t^+$ (Schrödinger-Bild)
  2) $\rho' = \dfrac{P \rho P}{\mathrm{tr}(P \rho P)}$
- $\rho = P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$

  $\leadsto \langle P_u \rangle = \langle u|\psi\rangle\langle\psi|u\rangle = c_u^2 \ldots$

(*) z.B. • mikrokan. ρ_{mik} mit $\mathrm{tr}(\rho_{mik} P_E) = 1$