Moderne theoretische Physik IIIa
Statistische Physik

KIT WS 20/21 Th. Schwetz-Mangold

VO 2 - Quantenmechanik WH /Zusammenfassung

Quantenmechanik (Wh/Zusf.)

Zustände u. Observable in QM

Zust.: Vektor (normiert) in einem Hilbertraum (HR) : $|\psi\rangle$

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1$$

Observable: hermitische Operatoren auf HR

Erwartungswert: $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$

Bsp.:

-) Teilchen ohne Spin : Wellenfunktion

$\psi(\vec{x})$ $\qquad \int d^3x\, |\psi(\vec{x})|^2 = 1$

Observablen : $\vec{x}$, $\vec{p}$

-) Spin ½ : $\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ $\qquad a, b \in \mathbb{C}$

$|a|^2 + |b|^2 = 1$

Observ.: $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ $\qquad \sigma_{1,2,3}$ .... Pauli-Matrizen

→) Teilchen mit Spin:

$$\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \psi_1(\vec{x}) \end{pmatrix}, \quad \int d^3x \left(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 \right) = 1$$

Observ.: $\vec{x}, \vec{p}, \vec{S}$

Observablenalgebra: $[x_i, x_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0$

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \qquad [S_i, S_j] = i \varepsilon_{ijk} S_k$$

vollst. anti-sym. Tensor
über wiederholte Indizes wird summiert

(Algebra f. Spin: allg. 2×2 Matrizen)

$\boxed{\text{Dichtematrix}}$

<u>reiner Zust.</u> $|\psi\rangle \qquad \langle\psi|\psi\rangle = 1$

Def.: Dichtematrix $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$

→ Projektionsoperator

$\hat{\rho}\,|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle\,|\psi\rangle$ ... Proj. auf $|\psi\rangle$ mit Koeffiz. $\langle\psi|\phi\rangle$

es gilt: $\hat{\varrho}^2 = \hat{\varrho}$, $\hat{\varrho}^\dagger = \hat{\varrho}$

sei $|\psi_r\rangle$ ein Orthonormalsystem (ONS) des HR: $\langle\psi_r|\psi_s\rangle = \delta_{rs}$

Def.: Spur: $Sp(\hat{A}) \equiv \sum_r \langle\psi_r|\hat{A}|\psi_r\rangle$

sei $|\psi\rangle = \sum_r \alpha_r |\psi_r\rangle$ mit $\sum_r |\alpha_r|^2 = 1$

$$\hat{\varrho} = \sum_{rs} \alpha_r \alpha_s^* |\psi_r\rangle\langle\psi_s| = \sum_{rs} \varrho_{rs} |\psi_r\rangle\langle\psi_s|$$

$\varrho_{rs} = \alpha_r \alpha_s^*$ ... „Komponenten d. Dichtmatr."

$\Rightarrow Sp(\hat{\varrho}) = 1$

$\Rightarrow$ Eigenwert d. Matrix ϱ_{rs}: $(1, 0, 0, \ldots)$

$\downarrow$

EW zu $\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$ bzw. EW v. $\hat{\varrho}$ zu $|\psi\rangle$

$\Rightarrow$ allg.: <u>reinen Zust.</u>: es existiert eine Basis in der $(\varrho_{rs}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix}$

Bsp.: Spin, ONS $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle \qquad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

$$\Rightarrow \rho_{rs} = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* \\ \alpha^*\beta & |\beta|^2 \end{pmatrix} \qquad (*)$$

-) off-Diagonalelemente
-) relative Phase v. α u. β wichtig
-) ρ_{rs} unabh. von globalen Phase

$$|\psi\rangle \longrightarrow e^{i\varphi}|\psi\rangle$$

Erwartungswert v. Obs.:

$$\langle\hat{A}\rangle = Sp(\hat{A}\hat{\rho}) = \sum_r \langle\psi_r|\hat{A}\underbrace{|\psi\rangle\langle\psi|}_{\hat{\rho}}\psi_r\rangle =$$

$$= \sum_{rs} \underbrace{\alpha_r^*\alpha_s}_{\rho_{rs}} \underbrace{\langle\psi_r|\hat{A}|\psi_s\rangle}_{= A_{rs}} = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

$$= \sum_{rs} \rho_{rs} A_{rs}$$

Bsp.: Spin-Obs.: $\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12}^* & A_{22} \end{pmatrix}$

$A_{11}, A_{22} \in \mathbb{R}$, $A_{12} \in \mathbb{C}$

$$\Rightarrow \langle A \rangle = \sum_{rs} \varrho_{rs} A_{rs} \overset{(*)}{=}$$

$$= |\alpha|^2 A_{11} + |\beta|^2 A_{22} + 2\,\mathrm{Re}(\alpha\beta^* A_{12})$$

relat. Phase zwischen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ ist beobachtbar

gemischter Zustand

ONS $|\psi_r\rangle$, System befinde sich in einer statistischen Mischung ϱ von Zust. $|\psi_r\rangle$

Verallg. Def. d. Dichtematrix:

$$\hat{\varrho} \equiv \sum_r p_r |\psi_r\rangle\langle\psi_r| \quad \text{mit} \quad \sum_r p_r = 1$$

$$p_r \geq 0$$

p_r ... Wahrscheinlichkeit, dass sich das Syst. im Zust. $|\psi_r\rangle$ befindet

$\Rightarrow \quad (\varrho_{rs}) = \mathrm{diag}(p_1, p_2, \dots)$

reiner Zust.: $\varrho_{rs} = \alpha_r \alpha_s^*$ $\quad \Big] \neq \quad !$

es gilt: $\quad Sp(\hat{\varrho}) = 1 \quad , \quad \hat{\varrho}^\dagger = \hat{\varrho}$

aber: f. gem. Zust. $\quad Sp(\hat{\varrho}^2) < Sp(\hat{\varrho}) = 1$

f. reinen Zust. $\quad Sp(\hat{\varrho}^2) = Sp(\hat{\varrho}) = 1$

Observable

$$\langle \hat{A} \rangle = Sp(\hat{A}\hat{\varrho}) = \sum_r p_r \langle \psi_r | \hat{A} | \psi_r \rangle = \sum_r p_r \langle A \rangle_r$$

gewichtetes Mittel der Erwartungsw.

Allg. Def. f. Dichtematrix:

$\hat{\varrho}$ ... pos. definiter Operator mit $Sp(\hat{\varrho}) = 1$

$\Rightarrow$ EW: ϱ_r: $\quad 0 \leq \varrho_r \leq 1 \, , \quad \sum_r \varrho_r = 1$

reiner Zust. $(\varrho_r) = (1, 0, 0, \dots)$

Bsp.: Spin: Ensemble von zufällig orientierten Spins:

$$|\psi\rangle = \left(\cos\gamma\,|\uparrow\rangle + \sin\gamma\, e^{i\varphi}\,|\downarrow\rangle\right) e^{i\phi}$$

$$\alpha \to \cos\gamma\, e^{i\phi}, \quad \beta \to \sin\gamma\, e^{i(\varphi+\phi)}$$

betrachte stat. Mischung vieler $|\psi\rangle$ mit zufälligen γ, ϕ, φ

$$\langle A\rangle = \int_0^{2\pi}\frac{d\gamma}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\varphi}{2\pi}\Big[\cos^2\gamma\, A_{11} + \sin^2\gamma\, A_{22} + 2\sin\gamma\cos\gamma\, \mathrm{Re}\left(e^{-i\varphi}A_{12}\right)\Big]$$

$$= \frac{1}{2}A_{11} + \frac{1}{2}A_{22}$$ relat. Phasen sind unbeobachtbar

$$\Rightarrow (\rho_{rs}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}, \quad \langle A\rangle = \mathrm{Sp}(A\rho)$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|\right)$$

2 Teilsysteme: S, S'

$|\varphi_r\rangle$ ONS in S
$|\varphi'_a\rangle$ ONS in S'

$$|\psi\rangle = \sum_{ra} c_{ra} |\varphi_r\rangle \otimes |\varphi'_a\rangle \quad , \quad \sum_{ra} |c_{ra}|^2 = 1$$

reiner Zust.: $\hat{\varrho} = |\psi\rangle\langle\psi|$

betrachte Messungen nur in S (nicht S')

$$\langle\psi| A \otimes \mathbb{1} |\psi\rangle =$$

$$= \sum_{rs} \sum_{ab} c_{ra} c^*_{sb} \langle\varphi_r|A|\varphi_s\rangle \underbrace{\langle\varphi'_b|\varphi'_a\rangle}_{\delta_{ab}} =$$

$$= \sum_{rs} \varrho_{rs} \langle\varphi_r|A|\varphi_s\rangle \quad \text{mit} \quad \varrho_{rs} = \sum_a c_{ra} c^*_{sa}$$

kann zeigen, dass ϱ_{rs} Eigensch. einer Dichtematrix hat, und im Allg. mehrere EW $\neq 0$

$\Rightarrow$ vom Syst. S aus betrachtet sieht Zust. wie gemischter Zust. aus

Bsp.: Teilchen mit Spin $\begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix}$

mit $\underbrace{\int d^3x \left(|\psi_1|^2}_{\lambda_1} + \underbrace{|\psi_2|^2}_{\lambda_2} \right) = 1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2$

betrachte Observablen in $\vec{x}, \vec{p}$ aber nicht in $\vec{S}$

$$\Rightarrow \langle A \rangle = \int d^3x \left(\psi_1^* A \psi_1 + \psi_2^* A \psi_2 \right)$$

schreibe $\begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_2\rangle \end{pmatrix}$ $\quad \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \lambda_1^2$, $\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = \lambda_2^2$

Ann.: sei $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$

Def.: $|\varphi_i\rangle = \frac{1}{\lambda_i} |\psi_i\rangle \Rightarrow \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$
ONS

$$\Rightarrow \langle A \rangle = \lambda_1^2 \langle \varphi_1 | A | \varphi_1 \rangle + \lambda_2^2 \langle \varphi_2 | A | \varphi_2 \rangle$$

$(\rho_{ij}) = \begin{pmatrix} \lambda_1^2 & 0 \\ 0 & \lambda_2^2 \end{pmatrix}$ ..... gemischter Zust.

Phasenbezieh. zw. φ_1 u. φ_2 unbeobachtbar

Zeitentwicklung

Schrödingerbild: $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle$

$\hat{H}$ ... Hamiltonoperator d. Systems

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-it\frac{\hat{H}}{\hbar}\right)|\psi(0)\rangle$$

Dichtematrix:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i\,|\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)| = e^{-\frac{it\hat{H}}{\hbar}}\,\hat{\rho}(0)\,e^{\frac{it\hat{H}}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow \underline{\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{\rho}, \hat{H}\right]}$$ äquival. zu Schrödingergl.

Zeitentwicklung ändert <u>nicht</u> p_i $\Rightarrow$

reiner Zust. bleibt rein

gem. Zust. bleibt gem.

stationärer Zust.: für zeitunabh. $\hat{H}$

$$E_r |\psi_r\rangle = \hat{H} |\psi_r\rangle$$

E_r ... Eigenwerte von $\hat{H}$

Energieeigenw., in geb. Syst. diskret

$|\psi_r\rangle$ ... Eigenvekt.

$$\Rightarrow \quad |\psi_r(t)\rangle = e^{-i\frac{E_r t}{\hbar}} |\psi_r(0)\rangle$$

$$\hat{\rho}(t) = \sum_r p_r |\psi_r(t)\rangle\langle\psi_r(t)|$$

$\Rightarrow$ für ein statist. Ensemble von stationären Zust. gilt $\dot{\hat{\rho}} = 0$