

3.4. Statistischer Operator

[Münster 20; Fließbach 37 (am Ende)]

Betrachten wir zuerst einen „reinen“ Zustand $|\psi\rangle$.

Sei $\hat{A}$ eine Observable. Dann haben wir Vorhersagen für:

* Erwartungswerte: $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$;
 $(\Delta A)^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle$; usw.

* die Wahrscheinlichkeit dafür, dass eine Messung den bestimmten Messwert a ($\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$) liefert:

$$P_\psi(a) = |\langle a | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle$$

Wir drücken jetzt diese Größen auf einer anderen Weise aus, durch die Einführung des statistischen Operators $\hat{\rho}$:

$$\hat{\rho}(\psi) := |\psi\rangle\langle\psi|$$

Dann gilt:

$$\begin{aligned} * \quad \langle \hat{A} \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{a,a'} \overbrace{\langle \psi | a \rangle \langle a | \hat{A} | a' \rangle \langle a' | \psi \rangle} \\ &= \sum_{a,a'} \langle a' | \psi \rangle \langle \psi | a \rangle \langle a | \hat{A} | a' \rangle \\ &= \sum_{a'} \langle a' | \psi \rangle \langle \psi | \hat{A} | a' \rangle =: \text{Sp}[\hat{\rho}(\psi) \hat{A}] \end{aligned}$$

$$* \quad P_\psi(a) = \underbrace{\langle a | \psi \rangle}_{\uparrow 1} \langle \psi | a \rangle = \sum_{a'} \overbrace{\langle a' | \psi \rangle \langle \psi | a \rangle \langle a | a' \rangle} = \text{Sp}[\hat{\rho}(\psi) \hat{\rho}(a)]$$

D.h., alle physikalischen Größen können mittels $\hat{\rho}(\psi)$ ausgedrückt werden.

Einige Eigenschaften :

(1) $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$ [folgt von der Spektraldarstellung]

(2) $\text{Sp}[\hat{\rho}] = 1$ [$\text{Sp}(\hat{\rho}) = \sum \overbrace{\langle a | \psi \rangle \langle \psi | a \rangle} = \langle \psi | \psi \rangle$]

(3) $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ [„Projektionsoperator“ bzw. „Projektor“]
 (vgl. Aufgabe 7.3)

Es gibt allerdings Umstände, unter denen eine Beschreibung des Systems durch einen „reinen“ Zustand nicht erwünscht ist. Zum Beispiel:

Es handelt sich um ein System mit vielen Teilchen, und einige davon haben unbekannte* Wechselwirkungen mit einander.

Solche Zustände werden „gemischte“ Zustände genannt.

Definition:

Es gibt Wahrscheinlichkeiten p_n , mit $0 \leq p_n \leq 1$ und $\sum_n p_n = 1$, mit denen wir einen reinen Zustand $|\psi_n\rangle$ finden. Dann ist

$$\hat{\rho} := \sum_n |\psi_n\rangle p_n \langle \psi_n|$$

$$\text{und } \langle \hat{A} \rangle := \text{Sp} [\hat{\rho} \hat{A}] = \sum_n \sum_a \overbrace{\langle a | \psi_n \rangle p_n \langle \psi_n | \hat{A} | a \rangle}^{\text{}} \\ = \sum_n p_n \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle$$

Falls wir Eigenzustände von $\hat{A}$ für die Konstruktion von $\hat{\rho}$ benutzen, d.h.

$$\hat{\rho} = \sum_a |a\rangle p_a \langle a|,$$

dann gilt weiterhin

$$\text{Sp} [\hat{\rho} \hat{\rho}(a)] = \text{Sp} [\hat{\rho} |a\rangle \langle a|] = \sum_a p_a \langle a | a' \rangle \langle a' | a \rangle = \sum_a p_a \delta_{aa'} = p_{a'}$$

d.h. die Definition scheint konsistent zu sein.

*

„Unbekannt“ entweder weil wir die Kräfte nicht kennen oder weil diese so kompliziert sind, dass wir mit denen nicht rechnen wollen. Auf jeden Fall „ist Information verlorengegangen“; wir konzentrieren uns auf die Beschreibung eines einfacheren „Teilsystems“.

Eigenschaften:

$$(1) \quad \hat{S}^\dagger = \hat{S} \quad [\text{Spektraldarstellung}]$$

$$(2) \quad \text{Sp}[\hat{S}] = 1 \quad \left[\sum_n p_n = 1 \right]$$

$$(3) \quad \hat{S}^2 = \sum_{n,m} |\psi_n\rangle p_n \underbrace{\langle \psi_n | \psi_m \rangle}_{\delta_{nm}} p_m \langle \psi_m|$$

$$= \sum_n |\psi_n\rangle p_n^2 \langle \psi_n|$$

$$\Rightarrow \text{Sp}[\hat{S}^2] = \sum_{n,a} \overbrace{\langle a | \psi_n \rangle p_n^2 \langle \psi_n | a \rangle}^{\downarrow}$$

$$= \sum_n p_n^2 \leq \sum_n p_n = 1$$

$\text{Sp}[\hat{S}^2] = 1$ gilt genau dann, wenn es nur eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit gibt, d.h. nur im Falle von reinen Zuständen!

Falls $\text{Sp}[\hat{S}^2] < 1$, ist der Zustand unbedingt gemischt.

Bewegungsgleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S} = i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n |\psi_n\rangle p_n \langle \psi_n|$$

$$= \hat{H} \sum_n |\psi_n\rangle p_n \langle \psi_n| - \sum_n |\psi_n\rangle p_n \langle \psi_n| \hat{H}$$

$$= [\hat{H}, \hat{S}] \quad \text{„Von-Neumann-Gleichung“}$$

Damit bekommen wir auch (im Schrödinger-Bild)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \text{Sp}[\hat{S} \hat{A}] = \text{Sp}\{[\hat{H}, \hat{S}] \hat{A}\}$$

$$= \text{Sp}\{\hat{H} \hat{S} \hat{A} - \hat{S} \hat{H} \hat{A}\} = \text{Sp}\{\hat{S} \hat{A} \hat{H} - \hat{S} \hat{H} \hat{A}\}$$

$$= \text{Sp}\{\hat{S} [\hat{A}, \hat{H}]\} = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle,$$

genau wie auf Seite 46 mit einem reinen Zustand.

Was ist der wesentliche Unterschied zwischen reinen und gemischten Zuständen?

Sei $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$ ein reiner Zustand.

Dann ist $\langle\Psi| = \sum_n c_n^* \langle\psi_n|$, und

$$\hat{S}(\Psi) = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_n |c_n|^2 |\psi_n\rangle\langle\psi_n| + \sum_{n \neq m} c_m^* c_n |\psi_n\rangle\langle\psi_m|$$

reelle Koeffizienten, wie die p_n

komplexe Koeffizienten; „Interferenzterme“

Sei $c_m^* c_n = |c_m^* c_n| e^{i\phi}$.

Falls jetzt über den Phasenfaktor gemittelt wird, verschwinden diese Terme:

$$e^{i\phi} \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{i\phi} = 0.$$

Dieses Phänomen wird Dekohärenz genannt: „Information geht verloren“.

Es bringt uns von der Quantenmechanik zu einer „klassischen“ statistischen Beschreibung, in der komplexe Phasenfaktoren nicht auftauchen können.

Das Endergebnis ist ein gemischter Zustand, mit $p_n := |c_n|^2$, und

$$\hat{S} = \sum_n |\psi_n\rangle p_n \langle\psi_n|$$

Die daraus folgende Dynamik kann aber wieder quantenmechanisch behandelt werden; die „fehlende Information“ betrifft nur unsere Kenntnisse über den Anfangszustand.