3.4. Statistischer Operator [Fliessbach 37 (am Ende); Griffiths 5.4]

Betrachten wir zuerst einen „reinen" Zustand $|\psi\rangle$.
Sei $\hat{A}$ eine Observable. Dann haben wir Vorhersagen für:

* Erwartungswerte: $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$;

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

* 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 $\hat{\varrho}$:

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

Dann gilt:

* $$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\underset{\hat{\mathbb{1}}}{\hat{A}}|\underset{\hat{\mathbb{1}}}{\psi}\rangle = \sum_{a,a'} \langle\psi|a\rangle\langle a|\hat{A}|a'\rangle\langle a'|\psi\rangle$$
$$= \sum_{a,a'} \langle a'|\psi\rangle\langle\psi|a\rangle\langle a|\hat{A}|a'\rangle$$
$$= \sum_{a'} \langle a'|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}|a'\rangle =: \underline{Sp[\hat{\varrho}(\psi)\hat{A}]} .$$

* $$P_\psi(a) = \langle a|\psi\rangle\langle\psi|a\rangle = \sum_{a'} \langle a'|\psi\rangle\langle\psi|a\rangle\langle a|a'\rangle = \underline{Sp[\hat{\varrho}(\psi)\,\hat{\varrho}(a)]} .$$
$$\left(\mathbb{1} = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\right)$$

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

Einige Eigenschaften:

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

(2) $Sp[\hat{\varrho}] = 1$ [$Sp(\hat{\varrho}) = \sum_a \langle a|\psi\rangle\langle\psi|a\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$]

(3) $\hat{\varrho}^2 = \hat{\varrho}$ [„Projektionsoperator" bzw. „Projektor"]

Es gibt allerdings Umstände, unter denen eine Beschreibung des Systems durch einen „reinen" Zustand <u>nicht</u> erwünscht ist. Zum Beispiel:

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

Sollche Zustände werden <u>„gemischte" Zustände</u> genannt.

<u>Definition:</u> 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

$$\hat{\varsigma} := \sum_n |\Psi_n\rangle \, p_n \, \langle \Psi_n|$$

und

$$\langle \hat{A} \rangle := Sp\,[\hat{\varsigma}\hat{A}] = \sum_n \sum_a \langle a|\Psi_n\rangle \, p_n \, \langle \Psi_n|\hat{A}|a\rangle = \sum_n p_n \langle \Psi_n|\hat{A}|\Psi_n\rangle \, .$$

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

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

dann gilt weiterhin

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

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) $\hat{\varrho}^{+} = \hat{\varrho}$ [Spektraldarstellung]

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

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

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

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

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

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

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

Bewegungsgleichung:

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

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

$$= [\hat{H}, \hat{\varrho}]$$ „Von-Neumann-Gleichung"

Damit erhalten wir auch (im Schrödinger-Bild)

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

$$= Sp\{\hat{H}\hat{\varrho}\hat{A} - \hat{\varrho}\hat{H}\hat{A}\} = Sp\{\hat{\varrho}\hat{A}\hat{H} - \hat{\varrho}\hat{H}\hat{A}\}$$

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

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

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

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:

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

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

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

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