

# Quantenstatistik

Dichtematrix  $\hat{\rho} = \sum_{|\psi\rangle} W_{|\psi\rangle} |\psi\rangle\langle\psi| \rightarrow \langle A \rangle = \text{tr} \{ \hat{\rho} A \}$

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) = [H, \hat{\rho}(t)]$  Liouville Gleichung

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

reiner Zustand  $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ ,  $\text{tr} \hat{\rho}^2 = 1$  (pure state)

gemischter Zustand  $\text{tr} \hat{\rho}^2 < 1$  (mixed state)

Spin im reinen Zustand  $|\psi\rangle = \alpha_0 |+\rangle + \beta_0 |-\rangle$

$$\Rightarrow \hat{\rho} = \begin{pmatrix} |\alpha_0|^2 & \alpha_0 \beta_0^* \\ \alpha_0^* \beta_0 & |\beta_0|^2 \end{pmatrix} \quad \omega = -\frac{\hbar \omega_0 \sigma_z}{2} \quad \hat{\rho}(t) = \begin{pmatrix} |\alpha_0|^2 & \alpha_0 \beta_0^* e^{i\omega_0 t} \\ \alpha_0^* \beta_0 e^{-i\omega_0 t} & |\beta_0|^2 \end{pmatrix}$$

Hermit. Ugl.  $\hat{\rho} = \frac{1}{2} e^{-\beta H} \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad z = \text{tr} \hat{\rho}^{-1}$

## 5.3 Teilsysteme (Verfeinerung)

• Angenommen wir haben zwei Teilsysteme (1) und (2)

mit  $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$  Basis im  $\mathcal{H}$ :  $\{|u_n\rangle \otimes |v_p\rangle\}$  mit  $|u_n\rangle \in \mathcal{H}^{(1)}$ ,  $|v_p\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}$

• Gesamtsystem sei durch Dichtematrix  $\hat{\rho}^{(1 \otimes 2)}$  beschrieben

$$\Rightarrow \langle A^{(1 \otimes 2)} \rangle = \text{tr} \left\{ \hat{\rho}^{(1 \otimes 2)} A^{(1 \otimes 2)} \right\} = \sum_{n,p} \langle u_n | \otimes \langle v_p | \hat{\rho}^{(1 \otimes 2)} A^{(1 \otimes 2)} | v_p \rangle \otimes | u_n \rangle$$

Häufig betrachtet wir nur 1 Teilsystem explizit und nur observablen

$A^{(1)}$  in diesem Teilsystem  $A^{(1 \otimes 2)} = A^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)}$

$$\Rightarrow \langle A^{(1)} \rangle = \sum_n \langle u_n | \sum_p \langle v_p | \hat{\rho}^{(1 \otimes 2)} | v_p \rangle A^{(1)} | u_n \rangle$$

reduzierte Dichtematrix  $\hat{\rho}_{\text{red}}^{(1)}$

$$\Rightarrow \langle A^{(1)} \rangle = \text{tr}^{(1)} \left\{ \sum_{\text{red}} A^{(1)} \right\} \quad (\text{tr} \hat{\rho}_{\text{red}}^{(1)} = 1, \text{ hermitesch, pos. definit})$$

Es gilt  $\text{tr} (\hat{\rho}_{\text{red}}^{(1)})^2 < 1$  im allgemeinen

beschreibt ein Gemisch (außer für Spezialfälle)

andere wenn  $\hat{\rho}^{(1 \otimes 2)}$  einen reinen Zustand beschreibt.

• Beispiel in Übungsreihe

• Diese Situation liegt bei allen makroskopischen Systemen vor (z.B. bei Ionen)

• Zugang zur Beschreibung von Dissipation in QM

System (2) ist ein "Reservoir" (z.B. Gastkernen bei Braun'scher Bewegung)

## 5.9 Dephasierung und Relaxation

Dephasing bzw. Decoherence

- Dephasierung durch statische Unordnung

z.B. Spin in räumlich schwanken dem Magnetfeld

$$B = (B_0 + \delta B(\vec{r})) \hat{e}_z \quad \overline{\delta B} = 0 \quad \overline{(\delta B^2)} \neq 0 \text{ (Gaußverteilung)}$$

$$H = -\frac{\hbar}{2} (\omega_{eg} + \Delta\omega) \sigma_z \quad \overline{\Delta\omega} = 0 \quad \overline{(\Delta\omega^2)} = \delta^2 \neq 0$$

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{gg}(0) & \rho_{ge}(0) e^{i(\omega_{eg} + \Delta\omega)t} \\ \rho_{eg}(0) e^{-i(\omega_{eg} + \Delta\omega)t} & \rho_{ee}(0) \end{pmatrix}$$

Mittelung über Ensemble von Spins

$$e^{i\delta\omega t} = e^{-\frac{1}{2}(\delta\omega t)^2} = e^{-\frac{1}{2}\delta^2 t^2}$$

Gauß, Vers. zerfällt auf Zeitskala

$$\rho(t) \rightarrow \begin{pmatrix} \rho_{gg}(0) & 0 \\ 0 & \rho_{ee}(0) \end{pmatrix}$$

- zeitlich fluktuierende Felder

$$B(t) = B_0 + \delta B(t)$$

$$\overline{\Delta\omega} = 0$$

$$H = -\frac{\hbar}{2} (\omega_{eg} + \delta\omega(t)) \sigma_z$$

$$\overline{\delta\omega(t) \delta\omega(t')} = 2\delta^* \delta(t-t')$$

- $\delta$ -korreliert

$\hat{=}$  weißes Rauschen

- Gauß verteilt

$$\Rightarrow \rho_{gg}(t) = \rho_{gg}(0) \text{ (auch für } e)$$

$$\rho_{ge}(t) = \rho_{ge}(0) e^{i\omega_{eg}t} \exp\left[i \int_0^t dt' \delta\omega(t')\right]$$

$$\exp\left[-\frac{1}{2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \delta\omega(t') \delta\omega(t'')\right] = \exp[-\delta^2 t]$$

$\Rightarrow$  Neben diag. zerfallen auf Skala  $\frac{1}{\delta^2}$

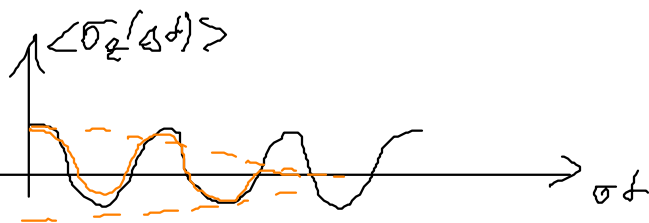
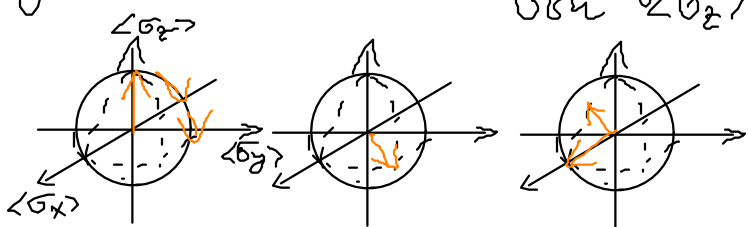
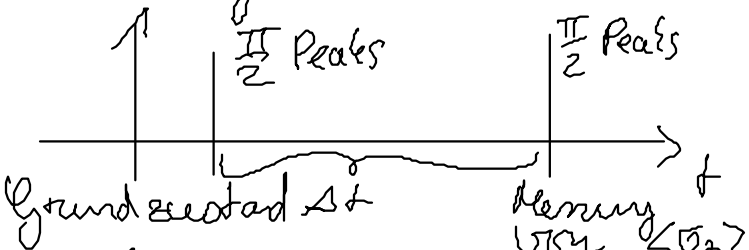
$$\int_0^t dt' \int_0^t dt'' \delta\omega(t') \delta\omega(t'') = 2\delta^2 t$$

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{gg}(0) & \rho_{ge}(0) \\ \dots & \dots \end{pmatrix} \xrightarrow{\left\{ \frac{1}{\delta^2} \right\}} \begin{pmatrix} \rho_{gg}(0) & 0 \\ 0 & \rho_{ee}(0) \end{pmatrix} \xrightarrow{1t \Rightarrow \frac{1}{\delta^2}} \begin{pmatrix} \rho_{gg} & 0 \\ 0 & \rho_{ee} \end{pmatrix}$$

Dephasierung & Relaxation

für  $\frac{1}{\delta^2} \gg \delta^2$  ist dies 2-stufiger Prozess

Ramsey Fringes



Ursache für Relaxation ist z.B. Störung der Form

$$H_1 = -\frac{1}{2} X(t) \sigma_x$$

$$X(t) = \sum_{\omega} X_{\omega} e^{i\omega t}$$

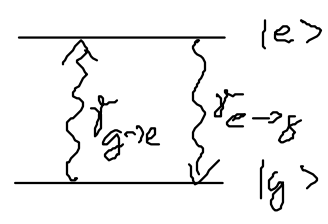
bei klassischem Feld

⇒ Übergangsprak nach goldenen Regel

$$\gamma_{e \rightarrow g} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\omega} \underbrace{|\langle g | X_{\omega} \sigma_x | e \rangle|^2}_{|X_{\omega}|^2} \delta(\hbar\omega_g - \hbar\omega)$$

$$\propto |X_{\omega=\omega_{eg}}|^2$$

$$\gamma_{g \rightarrow e} \propto |X_{\omega=\omega_{eg}}|^2 = \gamma_{e \rightarrow g}$$



Version 2: Berücksichtige, dass  $X$  auch gem. Variable

$$H = H_0 - \frac{1}{2} X \sigma_x + H_{\text{reservoir}}$$

z.B. Strahlungsfeld  $H_{\text{reservoir}} = \sum_{\omega} \hbar\omega_k (a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2})$

und  $X \propto (a_k^\dagger + a_k)$  und Reservoir sei im therm. Gleichgewicht

$$\dots \Rightarrow \frac{\gamma_{e \rightarrow g}}{\gamma_{g \rightarrow e}} = e^{-\frac{\hbar\omega_{eg}}{k_B T}}$$

detailliertes Gleichgewicht

$$\text{mit } H_0 = -\frac{1}{2} \omega_{eg} \sigma_z + \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ \Delta^* & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \dot{S}_{gg} = -\frac{i}{\hbar} (\Delta S_{eg} - \Delta^* S_{ge}) - \gamma_{ge} S_{gg} + \gamma_{eg} S_{ee}$$

$$\dot{S}_{ee} = \frac{i}{\hbar} (\Delta S_{eg} - \Delta^* S_{ge}) - \gamma_{eg} S_{ee} + \gamma_{ge} S_{gg}$$

$$\dot{S}_{eg} = \frac{i}{\hbar} \Delta^* (S_{ee} - S_{gg}) - i\omega_{eg} S_{eg} - \left(\gamma_{eg} + \frac{\gamma_{ge}}{2}\right) S_{eg}$$

$$\gamma_1 = \gamma_{eg} + \gamma_{ge}$$

Also in Liouville Gleichung kann Dekohärenz und Relaxation berücksichtigt werden → Beschreibung von Dissipation in QM.