Die Dichtematrix

Sebastian Bröker

2.November 2011

Westfälische Wilhelms-Universität Münster
BSc Physik
Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierter Materie

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung: Stern-Gerlach-Experiment

1922 führten Otto Stern und Walther Gerlach ein Experiment durch, bei dem ein Teilchenstrahl ein inhomogenes Magnetfeld passiert. Dieser Strahl aus Spin-1/2-Teilchen wird dabei in 2 Anteile aufgeteilt. Dies ist auf der Gedenktafel (Abbildung 1) des Experimentes gezeigt.

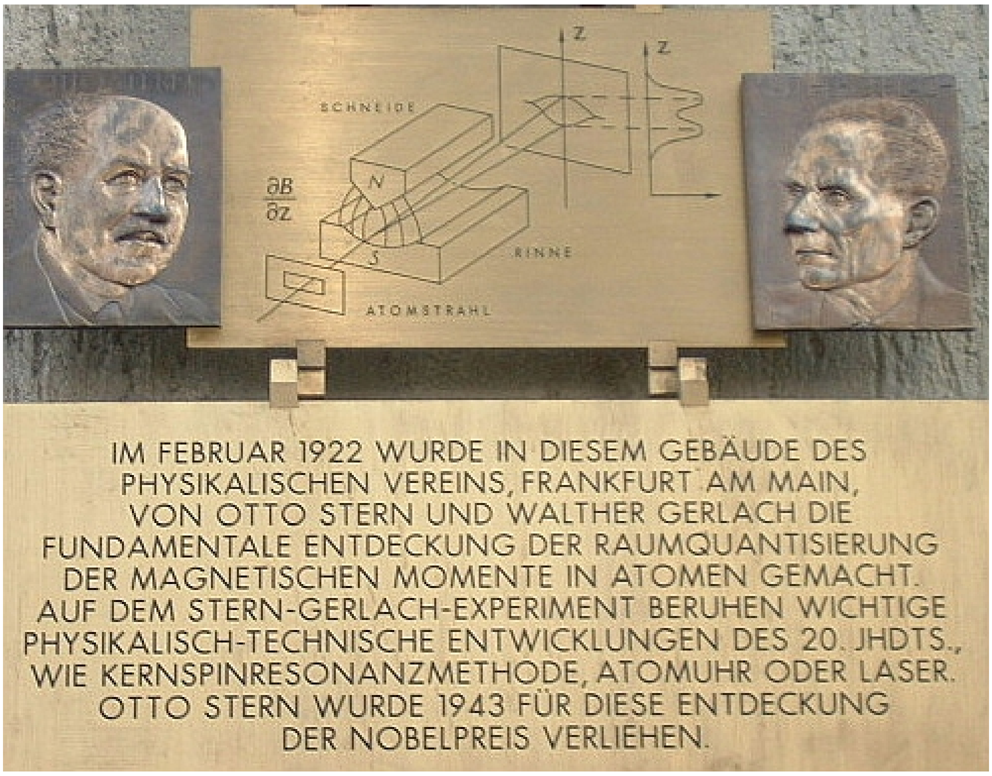

Abbildung 1: Gedenktafel in Frankfurt vor dem Haus des physikalischen Vereins zu Ehren des 1922 von Otto Stern und Walther Gerlach durchgeführten Experimentes (entnommen aus [1])

Betrachtet man nur einen Anteil (beispielsweise den oberen) so wird man feststellen, dass dieser aufgrund der Aufspaltung in 2 Anteile vor dem inhomogenen Magnetfeld eine höhere Intensität hat als nach dem Verlassen des Magnetfeldes. Eine Fragestellung ist nun, ob dies immer der Fall ist? Oder kann man die „Stern-Gerlach-Apperatur“ so orientieren, dass eine Aufspaltung in 2 Anteile nicht stattfindet bzw. der gesamte Strahl in einem Anteil transmittiert wird? Ist eine solche Ausrichtung der „Stern-Gerlach-Apperatur“ möglich, dann werden wir von reinen Zusänden sprechen. Ist dies nicht der Fall, werden wir von gemischten Zuständen sprechen. Was mit reinen und gemischte Zustände gemeint ist und wie man diese mathematisch beschreiben kann, wird in den nachfolgenden Abschnitten erläutert. Hierzu werden wir zunächst die Polarisation des Spins diskutieren und anschließend die Dichtematrix einführen.

2 Polarisationsvektor P

2.1 Polarisationsvektor P für reine Zustände

Die Komponenten des Polarisationsvektor **P** sind im reinen Fall durch die Erwartungswerte der Paulimatrizen gegeben.

$$P_i = \langle \sigma_i \rangle \tag{1}$$

Für den allgemeinen Spinzustand, der durch

$$|\chi\rangle = a_1|+\rangle + a_2|-\rangle \tag{2}$$

$$\text{mit } a_1 = \cos(\theta/2)\ ;\ a_2 = e^{i\delta}\sin(\theta/2)\ ;\ |+\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \text{ und } |-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

dargestellt werde kann, lassen sich die Komponenten von **P** berechnen. Für P_x sich ergibt:

$$P_x = \langle \chi|\sigma_x|\chi\rangle = \left(\cos(\theta/2), e^{-i\delta}\sin(\theta/2)\right)\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos(\theta/2)\\e^{i\delta}\sin(\theta/2)\end{pmatrix} = \sin\theta\cos\delta \tag{3}$$

Die weiteren beiden Komponenten lassen sich analog berechnen:

$$P_y = \sin\theta\sin\delta, \quad P_z = \cos\theta \tag{4}$$

Die Komponenten P_x, P_y und P_z entsprechen dem Ortsvektor in Kugelkoordinaten, wobei $r = 1$ und damit **P** normiert ist. Der Polarisationsvektor zeigt auf eine Kugelschale mit dem Radius $r = 1$.

2.2 Polarisationsvektor P für gemischte Zustände

Der Polarisationsvektor **P** ist im gemischten Fall durch

$$P_i = \langle \sigma_i \rangle = \sum_n W_n \langle \chi_n|\sigma_i|\chi_n\rangle \tag{5}$$

gegeben. Es wird hier über die Erwartungswerte der Paulimatrizen bzgl. verschiedener reiner Zustände $|\chi_n\rangle$ summiert, wobei jeder dieser Erwartungswerte mit einem W_n gewichtet ist. Dabei entspricht W_n der Anzahl der Teilchen N_n im Zustand $|\chi_n\rangle$ normiert auf die Gesamtanzahl. Daraus folgt direkt, dass die Summe über alle W_n gleich eins ist.

$$\sum_n W_n = 1 \tag{6}$$

Betrachten wir den Fall, dass sich N_a Teilchen im Zustand $|\chi_a\rangle$ und N_b im Zustand $|\chi_b\rangle$ befinden. Dann sind die Komponenten von $\mathbf{P}$ durch

$$P_i = W_a \langle \chi_a | \sigma_i | \chi_a \rangle + W_b \langle \chi_b | \sigma_i | \chi_b \rangle = W_a P_i^{(a)} + W_b P_i^{(b)} \tag{7}$$

gegeben, wobei mit $P_i^{(a)}$ die Komponente des Polarisationsvektors bzgl. des reinen Zustandes $|\chi_a\rangle$ gemeint ist. Quadriert man die Gleichung (7) und nutzt aus, dass das Skalarprodukt zwischen zwei auf eins normierten Vektoren kleiner gleich eins ist, so kann man abschätzen das $P^2 \leq 1$ ist:

$$P^2 = (W_a \mathbf{P}^{(a)} + W_b \mathbf{P}^{(b)})^2 = (W_a P^{(a)})^2 + (W_b P^{(b)})^2 + 2 W_a W_b \mathbf{P}^{(a)} \mathbf{P}^{(b)} \tag{8}$$
$$\leq W_a^2 + W_b^2 + 2 W_a W_b = (W_a + W_b)^2 = 1 \tag{9}$$

2.3 Ergebnis

Die Ergebnisse aus den Abschnitten 2.1 und 2.2 lassen sich zu

$$0 \leq |\mathbf{P}| \leq 1 \tag{10}$$

zusammenfassen. $|\mathbf{P}| = 0$ nennen wir unpolarisiert und $1 > |\mathbf{P}| > 0$ polarisiert. Diese beiden Fälle gelten für gemischte Zustände. Der Fall $|\mathbf{P}| = 1$ beschreibt reine Zustände und ist komplett polarisiert.

3 Einführung der Dichtematrix

Die Dichtematrix ist über den Projektor $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ für reine Zustände und die Summe der Projektoren $\rho = \sum_n W_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$ für gemischte Zustände gegeben und wird oft auch mit Dichteoperator oder statistischer Operator bezeichnet. Der Zustand $|\Psi_n\rangle$ lässt sich gemäß $|\Psi_n\rangle = \sum_i a_i^{(n)} |\Phi_i\rangle$ in eine Basis $|\Phi_i\rangle$ entwickeln. Ferner soll er normiert sein. So kann man die Dichtematrix in der Form

$$\rho = \sum_{nij} W_n a_i^{(n)} a_j^{(n)*} |\Phi_i\rangle\langle\Phi_j| \tag{11}$$

schreiben. Matrixelemente werden dadurch gebildet, dass die Gleichung (11) auf beiden Seiten mit den Basiszuständen multipliziert wird.

$$\rho_{ij} = \langle \Phi_i | \rho | \Phi_j \rangle = \sum_n W_n a_i^{(n)} a_j^{(n)*} \tag{12}$$

4 Spur und Erwartungswerte

Die Diagonalelemente können aus Gleichung (12) abgelesen werden, indem man $i = j$ setzt. Diese ergeben sich dann durch

$$\rho_{ii} = \sum_n W_n |a_i^{(n)}|^2. \tag{13}$$

Die Spur ist die Summe über die Diagonalelemente:

$$\mathrm{Sp}(\rho) = \sum_{ni} W_n |a_i^{(n)}|^2 = 1 \tag{14}$$

In Gleichung (14) wurde die Normierung des Zustandes $|\Psi_n\rangle$ und die Beziehung aus Gleichung (6) ausgenutzt. Die Spur der Dichtematrix ist also eins.

Der Erwartungswert einer Observablen Q ist über die Summe der Erwartungswerte von Q bzgl. der verschiedener Zustände $|\Psi_n\rangle$ gegeben, wobei jeder dieser Erwartungswerte mit W_n gewichtet ist:

$$\langle Q \rangle = \sum_n W_n \langle \Psi_n | Q | \Psi_n \rangle \tag{15}$$

Für $|\Psi_n\rangle$ kann wieder die Entwicklung nach den Basiszuständen eingesetzt werden:

$$\begin{aligned}
\langle Q \rangle &= \sum_{ij} \sum_n W_n a_i^{(n)} a_j^{(n)*} \langle \Phi_j | Q | \Phi_i \rangle \\
&= \sum_{ij} \langle \Phi_i | \rho | \Phi_j \rangle \langle \Phi_j | Q | \Phi_i \rangle \\
&= \sum_i \langle \Phi_i | \rho Q | \Phi_i \rangle
\end{aligned}$$

$$\langle Q \rangle = \mathrm{Sp}(\rho Q) \tag{16}$$

Hier kann man die Definition der Matrixelemente aus Gleichung (12), die Vollständigkeit und die Beziehung für die Spur aus Gleichung(14) ausnutzen. Der Erwartungswert einer Observablen Q ist durch die Spur von ρQ gegeben.

5 Identifikation von reinen und gemischten Zuständen

Die Polarisation lässt sich nun über die Spur, gemäß $P_i = \langle \sigma_i \rangle = \mathrm{Sp}(\rho \sigma_i)$, ausdrücken. Dies legt nahe, dass sich die Dichtematrix mithilfe der Komponenten des Polarisationsvektor schreiben lässt.

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1 - P_z \end{pmatrix} \tag{17}$$

Die Spur der Dichtematrix ist eins. In Abschnitt 2.2 haben wir $\mathbf{P}^2$ diskutiert und so eine Unterscheidung zwischen reinen und gemischten Zuständen erhalten. Nun wird die Spur von ρ^2 betrachtet.

$$\mathrm{Sp}(\rho^2) = \frac{1}{2}(1 + P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) = \frac{1}{2}(1 + |\mathbf{P}|^2) \tag{18}$$

Für reine Zustände ist $\mathrm{Sp}(\rho^2) = 1$ und für gemischte Zustände $\mathrm{Sp}(\rho^2) < 1$, da für reine Zustände $|\mathbf{P}|$ eins ist (vgl. Abschnitt 2.3).

6 Zeitentwicklung der Dichtematrix

Annahme: Es gibt einen Operator $\hat{U}(t)$, der auf einen Zustand $|\Psi(t_0)\rangle$ angewendet, den Zustand zu einem späteren Zeitenpunkt ergibt. Diesen Operator nennen wir Zeitentwicklungsoperator:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(t_0)\rangle \tag{19}$$

Setzt man (19) in die Schrödingergleichung ein, so kann man daraus die Bestimmungsgleichung für $\hat{U}(t)$ mit

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t) = \hat{H}(t)\hat{U}(t) \tag{20}$$

ablesen. Die Dichtematrix zu einem Zeitpunkt t ist durch $\rho(t) = \sum_n W_n|\Psi_n(t)\rangle\langle\Psi_n(t)|$ gegeben. Die Zustände $|\Psi_n(t)\rangle$ werden durch Gleichung (19) ersetzt und liefern dann:

$$\rho(t) = \hat{U}(t)\underbrace{\sum_n W_n|\Psi_n(t_0)\rangle\langle\Psi_n(t_0)|}_{\rho(t_0)}\hat{U}^\dagger(t) \tag{21}$$

Benutzt man $\rho(t_0) = \sum_n W_n|\Psi_n(t_0)\rangle\langle\Psi_n(t_0)|$, so lässt sich die Dichtematrix über

$$\rho(t) = \hat{U}(t)\rho(t_0)\hat{U}^\dagger(t) \tag{22}$$

Differenziert man die Gleichung für $\rho(t)$ nach der Zeit und benutzt die Bestimmungsgleichung (20) für den Zeitentwicklungsoperator, dann folgt direkt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = \hat{H}(t)\hat{U}(t)\rho(t_0)\hat{U}^\dagger(t) - \hat{U}(t)\rho(t_0)\hat{U}^\dagger(t)\hat{H}(t) \tag{23}$$

Unter Beachtung von (22) lasst sich die Zeitentwicklung der Dichtmatrix als Kommutator zwischen $\hat{H}(t)$ und $\rho(t)$ schreiben.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = [\hat{H}(t), \rho(t)] \tag{24}$$

Diese Gleichung wird auch die Liouville-von Neumann-Gleichung genannt.

7 Spinpräzession eines Spin-1/2-Teilchen

Der Hamiltonoperator eines Spin-1/2-Teilchen im homogenen Magnetfeld ist durch

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{H} = -\frac{\gamma}{2}\hbar \sum_j \sigma_j H_j \tag{25}$$

gegeben, wobei $\mathbf{H}$ das magnetische Feld ist. Ferner wurde ausgenutzt, dass das magnetische Moment durch $\mu_i = \frac{\gamma}{2}\hbar\sigma_i$ (mit $\gamma = \frac{gq}{2m}$: gyromagnetische Konstante) beschrieben werden kann. Für die zeitliche Veränderung der Polarisation gilt:

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} = \frac{\partial \langle \sigma_i \rangle}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}[\mathrm{Sp}(\rho(t)\sigma_i)] \tag{26}$$

Die Zeitableitung kann in die Spur hineingezogen werden. In der Spur selbst hängt nur $\rho(t)$ von der Zeit ab. Mit der Liouville-von Neumann-Gleichung (24) lässt sich $\frac{\partial \rho(t)}{\partial t}$ ersetzten und man erhält

$$i\hbar \frac{\partial P_i}{\partial t} = \mathrm{Sp}([\hat{H}, \rho]\sigma_i). \tag{27}$$

Tauscht man in der Kommutatorrelation einmal zyklisch und setzt man für den Hamiltonoperator die Beziehung aus Gleichung (25) ein dann folgt für die Zeitableitung der Polarisation

$$i \frac{\partial P_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{2} \sum_j H_j \mathrm{Sp}([\sigma_i, \sigma_j]\rho). \tag{28}$$

Der Kommutator zwischen zwei Paulimatrizen ist durch $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_k \sigma_k \epsilon_{ijk}$ gegeben. Einsetzen dieser Beziehung liefert

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} = -\gamma \sum_{j,k} H_j \mathrm{Sp}(\sigma_k \rho)\epsilon_{ijk} = -\gamma \sum_{j,k} H_j P_k \epsilon_{ijk}. \tag{29}$$

Aus der Gleichung (29) lässt sich ablesen, dass die zeitliche Veränderung der Polarisation durch das Kreuzprodukt zwischen der Polarisation und dem Magnetfeld $\mathbf{H}$ gegeben ist. Dies ist die Bloch-Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{P} = \gamma(\mathbf{P} \times \mathbf{H}) \tag{30}$$

Literatur

[1] http://de.wikipedia.org/wiki/Stern-Gerlach-Versuch; eingesehen am 30.10.2011

[2] Karl Blum, Density Matrix Theory and Applications, Plenum Publishing Corporation, 1996

[3] Franz Schwabl, Quantenmechanik für Fortgeschrittene, Springer, 2005