Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie
Quantenmechanik offener Systeme: Dichtematrix

Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Michael Isbach

20. April 2012

Inhaltsverzeichnis

1 Die reduzierte Dichtematrix offener Systeme

1.1 Überblick und Einführung

Die Dichtematrix ist eine alternative Methode zur Beschreibung quantenmechanischer Zustände. Im Gegensatz zur Wellenfunktion oder zum Zustandsvektor, ist die Dichtematrix in der Lage Aussagen über offene Systeme zu treffen.
Man betrachte zwei miteinander verschränkte (engl. entangled) Systeme (A,B). Zwischen diesen Systemen sei ein Teilchen-, und Energieaustausch möglich (offene Systeme). Jedoch ist der Betrachter nicht dazu in der Lage Messungen im System B vorzunehmen (z.B.Wärmebad, Umgebung). Dies hat zur Folge, dass alle Aussagen über das Gesamtsystem aus Messungen des Systems A abgeleitet werden müssen. Dies ist mit Hilfe der Dichtematrix möglich.
Die Dichtematrix des Gesamtsystems ist definiert als:

$$\rho = \sum_n W_n |\chi_n\rangle\langle\chi_n|. \tag{1}$$

Bei der Dichtematrix handelt es sich um einen hermiteschen Operator. Die Wahrscheinlichkeit den Zustand $|\chi_n\rangle$ vorzufinden ist gegeben durch W_n. Des Weiteren gilt für die Dichtematrix

$$Sp(\rho) = 1, \tag{2}$$
$$Sp(\rho^2) \leq 1, \tag{3}$$

wobei letzteres nur für reine Zustände gleich eins ist.
Es zeigt sich, dass die aus dem Ensemble zu gewinnenden Informationen durch die reduzierte Dichtematrix gegeben sind. Hierzu wird über das nichtbeobachtete System ausgespurt. Das heißt, es wird die Spur bezüglich einer Orthonormalbasis des Hilbertraums von B gebildet. Im Folgenden wird angenommen, dass sich das Gesamtsystem im verschränkten reinen Zustand $|\chi_n\rangle$ befindet mit

$$|\chi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle|b_1\rangle + |a_2\rangle|b_2\rangle). \tag{4}$$

Es ist deshalb $W_n = 1$. Für die Dichtematrix gilt dann:

$$\rho = 0.5(|a_1\rangle|b_1\rangle\langle a_1|\langle b_1| + |a_1\rangle|b_1\rangle\langle a_2|\langle b_2| + |a_2\rangle|b_2\rangle\langle a_1|\langle b_1| + |a_2\rangle|b_2\rangle\langle a_2|\langle b_2|). \tag{5}$$

Man entwickelt die Zustände $|b_i\rangle$ mit Hilfe der Orthonormalbasis $|\Phi\rangle$ des Hilbertraums des Systems B $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$

$$|b_1\rangle = \sum_i c_i|\Phi_i\rangle, \tag{6}$$

$$|b_2\rangle = \sum_i d_i|\Phi_i\rangle \tag{7}$$

und bildet die Spur bezüglich $|\Phi\rangle$

$$\rho_{\mathcal{A}} = Sp_{\mathcal{B}}(\rho) = \sum_l \langle\Phi_l|\rho|\Phi_l\rangle. \tag{8}$$

Für den ersten Term gilt dann

$$\rho_{\mathcal{A}}^{(1)} = \sum_l \langle\Phi_l|b_1\rangle\langle b_1|\Phi_l\rangle|a_1\rangle\langle a_1| \tag{9}$$

$$\rho_{\mathcal{A}}^{(1)} = \sum_{ikl} \langle\Phi_l|c_i|\Phi_i\rangle\langle\Phi_k|c_k^*|\Phi_l\rangle|a_1\rangle\langle a_1| \tag{10}$$

$$\rho_{\mathcal{A}}^{(1)} = \sum_{ikl} c_i c_k^* \delta_{i,l}\delta_{k,l}|a_1\rangle\langle a_1|. \tag{11}$$

Da die Summe über alle Koeffizienten $\sum_i |c_i|^2 = 1$ ist, gilt:

$$\rho_{\mathcal{A}}^{(1)} = |a_1\rangle\langle a_1|, \tag{12}$$

analog gilt für den vierten Term:

$$\rho_{\mathcal{A}}^{(4)} = |a_2\rangle\langle a_2|. \tag{13}$$

Für den zweiten Term gilt:

$$\rho_{\mathcal{A}}^{(2)} = \sum_l \langle\Phi_l|b_1\rangle\langle b_2|\Phi_l\rangle|a_1\rangle\langle a_2| \tag{14}$$

$$\rho_{\mathcal{A}}^{(2)} = \sum_{ikl} \langle\Phi_l|c_i|\Phi_i\rangle\langle\Phi_k|d_k^*|\Phi_l\rangle|a_1\rangle\langle a_2| \tag{15}$$

$$\rho_{\mathcal{A}}^{(2)} = \sum_{ikl} c_i d_k^* \delta_{i,l}\delta_{k,l}|a_1\rangle\langle a_2| \tag{16}$$

$$\rho_{\mathcal{A}}^{(2)} = \sum_k c_k d_k^* |a_1\rangle\langle a_2|. \tag{17}$$

Die Summe über $\sum_k c_k d_k^*$ entspricht der Überlappung der Zustände b_1, b_2 und lässt sich somit schreiben als:

$$\rho_{\mathcal{A}}^{(2)} = \langle b_2|b_1\rangle|a_1\rangle\langle a_2|. \tag{18}$$

Der dritte Term folgt analog und somit lässt sich $\rho_{\mathcal{A}}$ schreiben als:

$$\rho_{\mathcal{A}} = 0.5(|a_1\rangle\langle a_1| + |a_2\rangle\langle a_2| + \langle b_2|b_1\rangle|a_1\rangle\langle a_2| + \langle b_1|b_2\rangle|a_2\rangle\langle a_1|). \tag{19}$$

Für den Erwartungswert eines Operators gilt $\langle\hat{O}\rangle = Sp(\hat{\rho}\hat{O})$.Betrachtet man einen Operator, der nur im System A wirkt, kann man analog (ohne Beweis) schreiben:

$$\langle\hat{O}\rangle = Sp_{\mathcal{A}}(\hat{\rho}_{\mathcal{A}}\hat{O}_{\mathcal{A}}). \tag{20}$$

1.2 Verschränkung anhand von Spinzuständen

Betrachte man den Spinzustand eines Teilchens (im Folgenden $\mathcal{S}$):

$$|1\rangle = downSpin$$
$$|0\rangle = upSpin$$

der mit einer Anzahl N von anderen Teilchen in der Umgebung ($\mathcal{E}$) verschränkt ist. Deren Spins sind durch $|d\rangle, |u\rangle$ gegeben. System S und Umgebung E sind durch den Hamiltonoperator mit den Kopplungskonstanten $g_i > 0$

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sigma^{(01)} \otimes \sum_i^N g_i \sigma_i^{(ud)} \text{ gekoppelt.} \tag{21}$$

Dabei bezeichnen σ^{01} bzw. σ^{ud} die Paulische Spinmatrix σ_z des betrachteten Spins bzw. des Umgebungsspins i. Die Basiszustände sind Produktzustände $|\phi\rangle|n_l\rangle$, wobei $|\phi\rangle \in |0\rangle, |1\rangle$ und $|n_l\rangle$ eine von 2^N Kombinationen der Umgebungsspins ist, z.B. $|n_l\rangle = |u_1\rangle|d_2\rangle...|d_N\rangle$. Die Energien der Produktzustände sind durch

$$E_l = \sum_{i=1}^N (-1)^{n_i} g_i \tag{22}$$

gegeben, wobei (+1) für parallele Paare vom Systemspin und einem Umgebungsspin stehen und (-1) für antiparallele Paare. Jeder Zustand kann in dieser Basis entwickelt werden zu:

$$|\psi\rangle = \sum_{l=0}^{2^N-1} (c_l|0\rangle|n_l\rangle + d_l|1\rangle|n_l\rangle). \tag{23}$$

Nun wird angenommen, dass zum Zeitpunkt $t = 0$ keine Interaktion der beiden Systeme vorliegt. Das heißt, dass das Ensemble beschrieben wird mit

$$|SE(t=0)\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle) \sum_{l=0}^{2^N-1} c_l|n_l\rangle. \tag{24}$$

Berücksichtigt man nun die Zeitentwicklung des Hamiltonoperators für das $\mathcal{SE}$-System, gilt

$$|SE(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|SE(0)\rangle = a|0\rangle|\varepsilon_0(t)\rangle + b|1\rangle|\varepsilon_1(t)\rangle \tag{25}$$

mit den Umgebungszuständen $|\varepsilon_0(t)\rangle$ und $|\varepsilon_1(t)\rangle$

$$|\varepsilon_0(t)\rangle = \sum_l c_l e^{-iE_l t/2}|n_l\rangle \tag{26}$$

$$|\varepsilon_1(t)\rangle = \sum_l c_l e^{+iE_l t/2}|n_l\rangle. \tag{27}$$

Somit sind die Systemzustände $|0\rangle, |1\rangle$ mit den Zuständen $|\varepsilon_0\rangle, |\varepsilon_1\rangle$ verschränkt.
Die Dichtematrix des Gesamtsystems lautet dann:

$$\rho = |SE\rangle\langle SE| \tag{28}$$

Analog zu dem 1. Beispiel wird über die Umgebung ausgespurt mit

$$\rho_{\mathcal{S}} = Sp_{\mathcal{E}}(\rho) \tag{29}$$

$$= |a|^2|0\rangle\langle 0| + |b|^2|1\rangle\langle 1| + ab^* r(t)|0\rangle\langle 1| + a^* b r^*(t)|1\rangle\langle 0| \tag{30}$$

Die Überlappung der Umgebungszustände nennt man den Dekohärenzfaktor

$$r(t) = \langle\varepsilon_1|\varepsilon_0\rangle = \sum_{l=0}^{2^N-1} |c_l|^2 e^{-iE_l t}, \tag{31}$$

wobei E_l die Energie des entsprechenden Basiszustands ist.
Man erkennt an Gleichung 30, dass die Diagonalelemente von ρ sich nicht zeitlich verändern, somit bleiben die Besetzungen unverändert durch die Interaktion von S,E. Die Kohärenzterme hingegen verändern sich mit der Zeit (r(t)). Nun betrachtet man, wie sich diese verhalten. Hierzu werden zwei Fälle unterschieden. Sind die Kopplungskoeffizienten (g_i) konstant, so vereinfacht sich r(t) zu $r(t) = cos^N(gt)$. Das heißt die Kohärenzterme verändern sich periodisch. In Abbildung 1 ist die Zeitentwicklung für zufällige g_i dargestellt. Man erkennt gut, dass die Kohärenzterme sehr schnell abfallen und für eine hohe Anzahl von N kaum noch auftreten. In diesem Fall wird die Dichtematrix diagonal und beschreibt ein statistisches Gemisch aus den Zuständen $|1\rangle$ und $|2\rangle$.

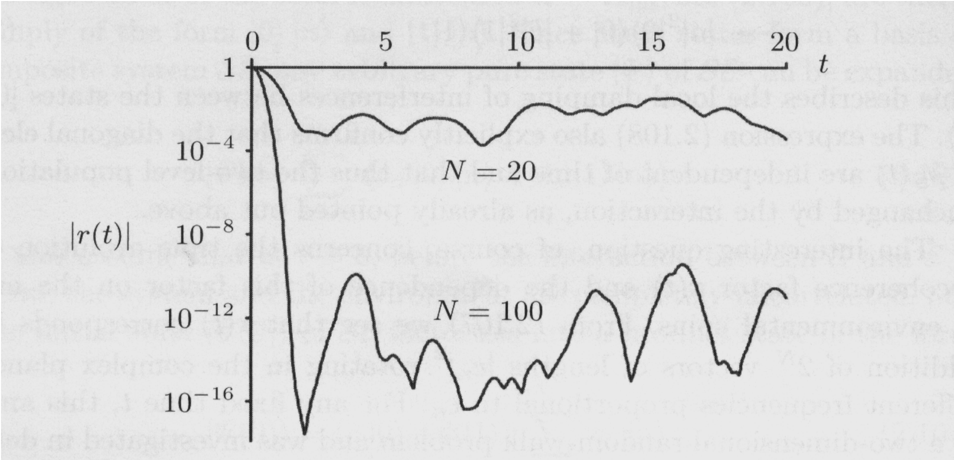

Abbildung 1: Zeitliche Entwicklung des Dekohärenzfaktors mit zufälligen Kopplungskoeffizienten [1]

1.3 Bloch-Gleichung

Unter dem Einfluss eines äußeren magnetischen Feldes in z-Richtung lassen sich für ein Spinsystem Blochgleichungen aufstellen. Zur Erinnerung: die bekannte Blochgleichung lautet

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{H}). \tag{32}$$

M ist die Magnetisierung und **H** das externe Feld. Bei γ handelt es sich um das gyromagnetische Verhältnis.
Es gilt für die Magnetisierung:

$$M_i = N\gamma\hbar\langle\sigma_i\rangle/2, \tag{33}$$

mit den Paulischen Spinmatrizen σ_i. Die einzelnen Komponenten lassen sich durch die Dichtematrixelemente ρ_{ij} darstellen:

$$M_x = \frac{N\gamma\hbar}{2}(\rho_{12} + \rho_{21}), \tag{34}$$

$$M_y = \frac{Ni\gamma\hbar}{2}(\rho_{12} - \rho_{21}), \tag{35}$$

$$M_z = \frac{N\gamma\hbar}{2}(\rho_{11} - \rho_{22}). \tag{36}$$

Hierbei ist N die Gesamtzahl der Spins. Durch die Ankopplung an die Umgebung treten zusätzlich Übergänge zwischen den Zuständen auf. Die Rate für

[1] Decoherence and the Quantum-to-classical Transition von Maximilian Schlosshauer(2008) S.92

einen Übergang von 1 nach 2 ist W_{21} und für einen Übergang von 2 nach 1 W_{12}. Für die Veränderung der Besetzungen (in einem Zwei-Zustand-System) gilt dann:

$$\dot{\rho}_{11}(t) = W_{12}\rho_{22}(t) - W_{21}\rho_{11}(t) = -\dot{\rho}_{22}(t), \tag{37}$$

$$\dot{\rho}_{11}(t) = W_{12} - (W_{12} + W_{21})\rho_{11}(t), \tag{38}$$

$$\dot{\rho}_{22}(t) = W_{21} - (W_{12} + W_{21})\rho_{22}(t). \tag{39}$$

Wir führen nun das thermische Gleichgewicht ein, in dem gilt:

$$\dot{\rho}_{11} = \dot{\rho}_{22} = 0. \tag{40}$$

Dann ist

$$M_z^{(0)} = \rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)} = \frac{W_{12} - W_{21}}{W_{12} + W_{21}}. \tag{41}$$

Weiter wählen wir die longitudinale Relaxationszeit T_1 als

$$T_1 = \frac{1}{W_{12} + W_{21}}. \tag{42}$$

Für die zeitliche Änderung der Kohärenzterme gilt

$$\dot{\rho}_{21}(t) = -\frac{i}{\hbar}\langle 2|[H(t), \rho_s(t)]|1\rangle + \frac{\rho_{21}(t)}{T_2}. \tag{43}$$

T_2 ist die transversale Relaxationszeit. Sie beschreibt die Dekohärenz durch die Ankopplung an die Umgebung (vgl. Kap 1.2). Somit gilt für die zeitliche Veränderung der Magnetisierung:

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{H})_x - \frac{M_x}{T_2}, \tag{44}$$

$$\frac{dM_y}{dt} = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{H})_y - \frac{M_y}{T_2}, \tag{45}$$

$$\frac{dM_z}{dt} = \frac{M_z^{(0)} - M_z}{T_1}. \tag{46}$$

Die Analogie zur bekannten Form der Blochgleichung ist offensichtlich. Anschaulich bedeutet dies, dass die x,y-Komponente auf einer Spiralbahn sich der Gleichgewichtslage $M_x = M_y = 0$ annährt ($\approx \exp -t/T_2$) und die z-Komponente sich dem termischen Gleichgewicht $M_z = M_z^{(0)}$ annährt.

1.4 Zusammenfassung

Mit Hilfe der Spur bzgl. eines äußeren Systems lässt sich aus der Dichtematrix des Gesamtsystems die reduzierte Dichtematrix des relevanten Teilsystems bilden. Diese beinhaltet alle auslesbaren Informationen über das relevante System. Mit ihrer Hilfe lassen sich auch offene Systeme und verschränkte Systeme beschreiben. Da dies mit der Schrödingergleichung nicht möglich ist, ist die Dichtematrix eine gute Alternative zur Beschreibung quantenmechanischer Zustände. Auch "normale" Systeme, d.h. Systeme, die sich in einem reinen Zustand befinden, sind mit Hilfe der Dichtematrix charakterisierbar.
Bei der Dichtematrix handelt es sich um einen hermiteschen Operator. Die Diagonalelemente zeigen die Besetzungen der entsprechenden Zustände und die Nicht-Diagonalelemente entsprechen der quantenmechanischen Überlagerung der beteiligten Zustände und werden Kohärenzterme genannt.

1.5 Quellenverzeichnis

Decoherence and the Quantum-to-classical Transition von Maximilian Schlosshauer(2008)
Density Matrix Theory and Applications von Karl Blum (2.Edition: 1996)
Präsentation: Dichtematrix und verschränkte Zustände von Felipe Gerhard (2006/2007)
Präsentation: Dekohärenz (Teil 1) von Melanie Müller (2002)