VL

9.1.2007

$$\sum_n P_n \, |n\rangle\langle n| = \hat{\rho}$$

$$\langle\hat{A}\rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{\varrho}\hat{A}$$ Erwartungswerte

$$\mathrm{Tr}\,X \equiv \sum_{\alpha}\langle\alpha|X|\alpha\rangle$$ Spur „Trace"

<u>Eigenschaften von $\hat{\varrho}$</u>

Normierung : $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = 1$

$$\mathrm{Tr}\sum p_n|n\rangle\langle n| = \sum p_n = 1$$

Hermitizität : $\varrho = \varrho^{\dagger}$, $\langle\alpha|\varrho|\beta\rangle = \langle\beta|\varrho|\alpha\rangle^{*}$

Positivität : $\langle\psi|\varrho|\psi\rangle \geq 0 \iff \varrho \geq 0$

Ensemble : Menge $\{p_n, |n\rangle\}$

(Ensemble von reinen Zuständen $|n\rangle$).

<u>Satz:</u> Ein Operator ϱ ist genau dann Dichteoperator zu einem Ensemble, wenn $\mathrm{Tr}\,\varrho = 1$

und $\rho \geq 0$

Beweis: Annahme $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$ und $\rho \geq 0$

$\rightarrow$ ρ auch Hermitisch (Aufgabe!)

deshalb Zerlegung $\rho = \sum_\ell \lambda_\ell |\ell\rangle\langle\ell|$, $\lambda_\ell \in \mathbb{R}$

wegen $\rho \geq 0$ folgt $\lambda_\ell \geq 0$, mit $\mathrm{Tr}\,\rho = 1 = \sum_\ell \lambda_\ell$: λ_ℓ sind Wahrscheinlichkeiten, das System im Zustand $|\ell\rangle$ vorzufinden.

andere Richtung: siehe oben.

Betrachte $\rho = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|$

Ein reiner Zustand hat die Form $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$

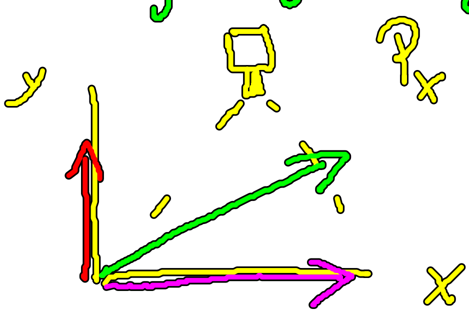
Projektionsoperator: $\rho^2 = \rho\rho = |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{1}\langle\psi|$

$= |\psi\rangle\langle\psi| = \rho$

$\rho^2 = \rho$ reiner Zustand $\mathrm{Tr}\,\rho^2 = 1$

$\rho^2 \neq \rho$ gemischter Zustand (Gemische)

$\mathrm{Tr}\,\rho^2 < 1$



$P_x^2 = P_x$ Projektor

Entropie: von-Neumann-Entropie

$$S = -k_B \,\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} \ln \hat{\rho} = -k_B \sum_n p_n \ln p_n$$

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

Hierbei Funktion eines Operators in Diagonaldarstellung, $\hat{X} = \sum_n x_n |n\rangle\langle n|$

$$f(X) = \sum_n f(x_n) |n\rangle\langle n|$$

(Aufgabe: überprüfe mittels Taylorentw.)

$S = 0$ reiner Zustand

$S > 0$ Gemisch

<u>Thermische Zustände</u>

Für diese haben wir die p_n aus der Quantenstatistik bestimmt.

Für das kanonische Ensemble mit Hamiltonoperator

$$\hat{H}|n\rangle = E_n |n\rangle$$

$-\beta E_n$

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle\langle n| = \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} |n\rangle\langle n|$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$$

Exponentialfunktion des Hamiltonoperators

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \hat{H}}$$

Zustandssumme

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta \hat{H}}}$$

Das ist die Gleichgewichtsstatistik

Die Zeitentwicklung

mittels Schrödingergleichung $\quad i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \qquad \hbar = 1$

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{U(t)}_{\text{unitärer Zeitentwicklungsoperator (Propagator)}} |\psi(0)\rangle, \quad t > 0$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H(t) U(t)$$

z.B. für zeitunabh. $\hat{H}(t) = \hat{H}$, $\quad U(t) = e^{-i\hat{H}t/\cancel{\hbar}}$

Zeitentwicklung des Dichteoperators

$$\hat{\rho}(t=0) = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|, \qquad |n\rangle = |n(t=0)\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \hat{\rho}(t>0) = \sum_n p_n |n(t)\rangle\langle n(t)|$$
$$= \sum_n p_n\, U(t)|n\rangle\langle n| U^\dagger(t)$$
$$= U(t)\; \hat{\rho}(t=0)\; U^\dagger(t)$$

<u>Liouville-von-Neumann-Gleichung</u>

$$\left(|n\rangle = \sum_i c_i |i\rangle \quad |c_i|^2 \right)$$

$$\underline{i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t)} = H(t)U(t)\rho(0)U^\dagger(t) - U(t)\rho(0)U^\dagger(t)H(t)$$
$$= \underline{[H(t), \hat{\rho}(t)]}$$

Spezialfall: $\quad \rho(0) = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z}$ Gleichgewicht

$$\Rightarrow \quad \rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t), \quad U(t) = e^{-i\hat{H}t}$$

vertauschen

$$= \rho(0)\, U(t)U^\dagger(t) = \underline{\rho(0)}$$

Deshalb Definition: Ein Gleichgewichtszustand eines durch $\hat{H}$ beschriebenen Systems ist ein Zustand ρ mit
$$[\hat{\rho}, \hat{H}] = 0 .$$

<u>Klassischer Grenzfall</u>: $\exists$ verallgemeinerte Koordinaten q_i, p_i

statistische Beschreibung mit Vert.-Funktion $\rho(q, p, t)$
$$q = (q_1, \ldots, q_f)$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \text{Hamiltonsche Gleichungen}$$

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i}\dot{p}_i\right)$$

$$= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)$$

$$\equiv \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\}$$ im Γ-Raum

Poisson-Klammer $\{X, H\} = \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial X}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial X}{\partial p_i}\right)$

$0 = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\underline{v}\rho)$, $\underline{v} = (\dot{q}, \dot{p})$

Kontinuitätsgleichung

wie in Elektrodynamik

Auf der anderen Seite hat man

$\operatorname{div}(\underline{v}\rho) = \{\rho, H\}$ (Aufgabe)

$\Rightarrow$ $\frac{d}{dt}\rho = \frac{\partial}{\partial t}\rho + \{\rho, H\} = 0$ Liouville-Gleichung

QM: $i\frac{\partial}{\partial t}\rho = [H, \rho]$ (Korrespondenzprinzip $[\,] \Leftrightarrow \{\,\}$)

$\frac{d}{dt}\rho = 0 \Rightarrow \forall t > 0$ gilt

$\rho(q(t), p(t), t) = \rho(q(0), p(0), 0)$

PDG 1. Ordnung: Charakteristiken