

VL

9.1.2007

$$\sum_n \underbrace{P_n}_{\text{}} \equiv \hat{\rho}$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr } \hat{\rho} \hat{A} \quad \text{Erwartungswerte}$$

$$\text{Tr } X \equiv \sum_{\alpha} \langle \alpha | X | \alpha \rangle \quad \text{Spur "Trace"}$$

Eigenschaften von $\hat{\rho}$

Normierung : $\text{Tr } \hat{\rho} = 1$

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

Hermitezität : $\rho = \rho^\dagger, \quad \langle \alpha | \rho | \beta \rangle = \langle \beta | \rho | \alpha \rangle^*$

Positivität : $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0 \Leftrightarrow \rho \geq 0$

Ensemble : Menge $\{p_n, |n\rangle\}$
(Ensemble von reinen Zuständen $|n\rangle$)

Satz: Ein Operator ρ ist genau dann Dichtoperator zu einem Ensemble, wenn $\text{Tr } \rho = 1$

und $\rho \geq 0$

Beweis: Annahme $\text{Tr} \rho = 1$ und $\rho \geq 0$
 $\rightarrow \rho$ auch Hermitisch (Aufgabe!)

deshalb Zerlegung $\rho = \sum_l \lambda_l |l\rangle\langle l|$, $\lambda_l \in \mathbb{R}$

wegen $\rho \geq 0$ folgt $\lambda_l \geq 0$, mit $\text{Tr} \rho = 1 =$

$\sum_l \lambda_l$: λ_l sind Wahrscheinlichkeiten, das System im Zustand $|l\rangle$

anzufinden.
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: $\rho^2 = \rho\rho = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi|$

$$\rho^2 = \rho$$

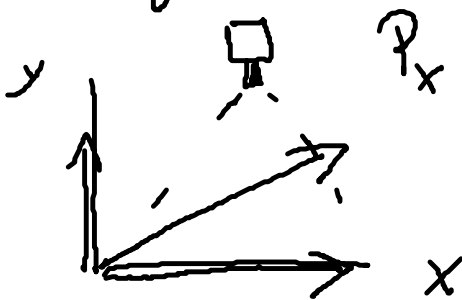
reiner Zustand

$$\text{Tr} \rho^2 = 1$$

$$\rho^2 \neq \rho$$

gemischter Zustand (Gemische)

$$\text{Tr} \rho^2 < 1$$



$P_x^2 = P_x$ Projektor

Entropie: von-Neumann-Entropie

$$S = -k_B \text{Tr} \hat{\rho} \ln \hat{\rho} = -k_B \sum_n p_n \ln p_n$$
$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|$$

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

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

(Aufgabe:
überprüfe mittels Taylor entw.)

$$S = 0 \quad \text{reiner Zustand}$$

$$S > 0 \quad \text{gemischt}$$

Thermische Zustände

Für diese haben wir die p_n aus der Quanten-
statistik bestimmt.

Für das kanonische Ensemble mit Hamiltonoperator

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

$$-\beta E_n$$

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

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

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

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

Exponentialfunktion
des Hamiltonoperators

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \quad \text{Zustandssumme}$$

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

Das ist die Gleichgewichtstatistik

Die Zeitentwicklung

Nichtes Schrödinger-Gleichung $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle$

$$|\Psi(t)\rangle = U(t) |\Psi(0)\rangle, \quad t > 0$$

unitärer Zeitentwicklungsoperator
(Propagator)

$\hbar=1$

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

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

Zeitentwicklung des Dichteoperators

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

$$|n\rangle = |n(t=0)\rangle$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{\rho}(t > 0) &= \sum_n p_n |n(t)\rangle \langle n(t)| \\ &= \sum_n p_n U(t) |n\rangle \langle n| U^\dagger(t) \\ &= U(t) \hat{\rho}(t=0) U^\dagger(t) \end{aligned}$$

Liouville-von-Neumann-Gleichung

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) &= H(t) U(t) \rho(0) U^\dagger(t) \\ &\quad - U(t) \rho(0) U^\dagger(t) H(t) \\ &= [H(t), \hat{\rho}(t)] \end{aligned}$$

$$|n\rangle = \frac{\sum_i c_i |i\rangle}{\sqrt{\sum_i |c_i|^2}}$$

Specialfall: $\rho(0) = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z}$ Gleichgewichts

$$\begin{aligned} \Rightarrow \rho(t) &= U(t) \rho(0) U^\dagger(t), \quad U(t) = e^{-i\hat{H}t} \\ &\quad \swarrow \text{vertauschen} \\ &= \rho(0) U^\dagger(t) U(t) = \rho(0) \end{aligned}$$

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

Klassischer Grenzfall: \mathcal{F} verallgemeinerte Koordinaten

statistische Beschreibung mit Vert.-funktion $\rho(q, p, t)$

$$q = (q_1, \dots, q_n)$$

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

$$\begin{aligned} \left[\frac{dS}{dt} \right] &= \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_{i=1}^F \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \\ &= \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_{i=1}^F \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial S}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \\ &\equiv \frac{\partial S}{\partial t} + \underbrace{\{S, H\}}_{\text{in } \Gamma\text{-Raum}} \end{aligned}$$

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

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

Kontinuitätsgleichung

wie in Elektrodynamik

Auf der anderen Seite hat man

$$\operatorname{div}(\underline{v}S) = \{S, H\} \quad (\text{Aufgabe})$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} S = \frac{\partial}{\partial t} S + \{S, H\} = 0 \quad \text{Poisson-Gleichung}$$

$$\text{Qm: } i \frac{\partial}{\partial t} S = [H, S] \quad \left(\text{Korrespondenzprinzip} \right)$$

$[] \Leftrightarrow \{ \}$

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

$$S(q(t), p(t), t) = S(q(0), p(0), 0)$$

PDG 1. Ordnung: Charakteristiken