2. Statistische Quantenmechanik

2.1 Statistischer Operator

Observable: $\mathcal{F} = \mathcal{F}^+$, linear, selbstadjungiert

Zustände: $|\phi^1\rangle, |\phi^2\rangle, \ldots, |\phi^n\rangle$

Basis $\{|\psi_k\rangle\}$:

$$\delta_{kl} = \langle\psi_k|\psi_l\rangle$$

$$\mathbb{1} = \sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$$

Erwartungswert: $\overline{F}^j := \langle\phi^j|\mathcal{F}\phi^j\rangle$

Ensemble aus Zuständen $|\phi^1\rangle \ldots |\phi^n\rangle$

mit den Gewichten p_j

$$0 \le p_j \le 1 \quad , \quad \sum_j p_j = 1$$

Ensemble-Mittelwert:

$$\langle\mathcal{F}\rangle := \sum_j p_j \overline{F}^j = \sum_j p_j \langle\phi^j|\mathcal{F}\phi^j\rangle =$$

$$= \sum_j p_j \sum_k \langle\phi^j|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\mathcal{F}\phi^j\rangle =$$

$$= \underbrace{\sum_k \sum_j p_j \langle\psi_k|\mathcal{F}\phi^j\rangle\langle\phi^j|\psi_k\rangle}_{\mathrm{Sp}} =$$

$$= Sp\left\{ \sum_j p_j \mathcal{F} |\phi^j\rangle\langle\phi^j| \right\}$$

$$\boxed{\text{Dichteoperator: } \quad \varrho := \sum_j p_j |\phi^j\rangle\langle\phi^j|}$$

$$\varrho = \sum_j p_j \mathcal{P}^j, \quad \text{Projektor}$$

$$\boxed{\langle\mathcal{F}\rangle = Sp(\varrho\mathcal{F})} \qquad \boxed{Sp\,\varrho = 1} \longrightarrow 2/2a$$

2.2 von NEUMANN-Gleichung

In der Quantenmechanik gibt es nur partielle Zeitableitungen: $\frac{d}{dt} = \partial_t + \underline{v} \cdot \nabla$

$\underline{v}$ ist nicht definiert

$$\partial_t \varrho = \sum_j p_j \partial_t |\phi^j\rangle\langle\phi^j| + \sum_j p_j |\phi^j\rangle \partial_t \langle\phi^j| +$$

$$+ \sum_j \partial_t p_j |\phi^j\rangle\langle\phi^j|$$

SCHRÖDINGER-Gleichung: Hamiltonoperator

$$i\hbar\, \partial_t |\phi^j\rangle = \mathcal{H} |\phi^j\rangle$$

$$-i\hbar\, \partial_t \langle\phi^j| = \langle\phi^j| \mathcal{H}$$

$$\mathrm{Sp}\,\varrho = \sum_{jn} \langle \psi_n | \phi^j \rangle \langle \phi^j | \psi_n \rangle p_j =$$

$$= \sum_{jn} p_j \langle \phi^j \underbrace{| \psi_n \rangle \langle \psi_n |}_{\mathbb{1}} \phi^j \rangle =$$

$$= \sum_j p_j \underbrace{\langle \phi^j | \phi^j \rangle}_{1} = \sum_j p_j = 1$$

□ <u>Beh.</u>: Wegen der Gültigkeit der SCHRÖDINGER-Gleichung genügt der Dichteoperator der erweiterten v. NEUMANN-Gleichung

$$\partial_t \varrho = -\frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, \varrho] + \sum_j \mathcal{P}^j \partial_t p_j ,$$

mit dem Kommutator

$$[\mathcal{A}, \mathcal{B}] := \mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A}$$

und dem Projektor

$$\mathcal{P}^j := |\phi^j\rangle\langle\phi^j|$$

□

$$\partial_t \varrho = \sum_j p_j \frac{1}{i\hbar} \mathcal{H} |\phi^j\rangle\langle\phi^j| \; +$$

$$+ \sum_j p_j \left(-\frac{1}{i\hbar} |\phi^j\rangle\langle\phi^j|\mathcal{H}\rangle\right) +$$

$$+ \sum_j \partial_t p_j \, |\phi^j\rangle\langle\phi^j|$$

$$\partial_t \varrho = \frac{1}{i\hbar} \mathcal{H}\varrho - \frac{1}{i\hbar} \varrho \mathcal{H} + \sum_j \partial_t p_j \, \mathcal{P}^j$$

$$\boxed{\partial_t \varrho = -\frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, \varrho] + \sum_j \mathcal{P}^j \partial_t p_j}$$

erweiterte
v. NEUMANN-Gl.

Kommutator:
$[\mathcal{A}, \mathcal{B}] = \mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A}$

Analogie: $\{,\} \longleftrightarrow [,]$

$[\mathcal{H}, \varrho] = 0 \wedge \partial_t p_j = 0, \forall j \longrightarrow \partial_t \varrho$ Stationarität