Beginn 10^{15}

Gernot Schaller EW 744 (Di 13-14)

VL Do/Fr EW 203 10^{15} - 11^{45}

Sem. Do (EW 733) 16^{15} - 17^{45} in English

Sebastian Restrepo EW 063 → 705 (Di 15-16)

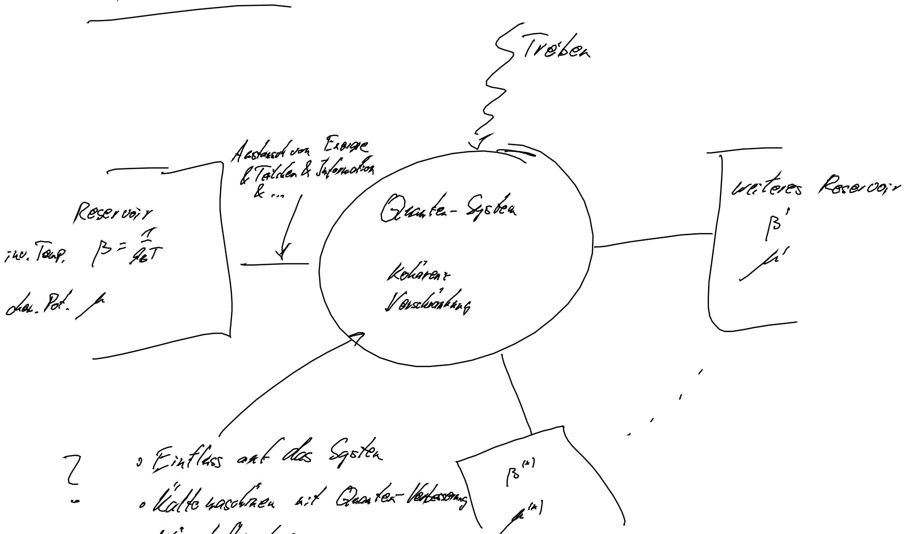
wöchentliche UA → ≥ 60% der Punkte (Abgabe in 2er/3er Gruppen)

+ aktiv & regelmäßig an VL & Uebung teilnehmen

[www.itp.tu-berlin.de/schaller/lectures.html]

gernot.schaller@tu-berlin.de

Der Plan



?

- Einfluss auf das System
- Kältemaschinen mit Quanten-Verbesserung
- Wärmekraftmaschinen
- 2. Hauptsatz der TD in Nicht-Gleichgewicht

0. Voraussetzungen

- $\hbar \to 1$ $\quad k_B \to 1$ $\quad \beta = \frac{1}{k_B T}$

  $[H \cdot t] = 1$

- DM:

$$\boxed{\begin{gathered} \rho = \sum_n \underbrace{P_n}_{\text{Wahrscheinlichkeit}} \underbrace{|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|}_{\text{Zustand}} \\ \sum_n P_n = 1 \qquad \langle\Psi_n|\Psi_n\rangle = 1 \\ 0 \le P_n \le 1 \quad \forall n \\ \langle\Psi_m|\Psi_n\rangle \neq \delta_{mn} \end{gathered}}$$

Bsp: $|\Psi_A\rangle = |0\rangle$ $\quad P_A = 1/2$

$|\Psi_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|0\rangle + |1\rangle\right]$ $\quad P_B = 1/2$

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/4 & 1/4 \\ 1/4 & 1/4 \end{pmatrix}$$

$$\langle\Psi_A|\Psi_B\rangle \neq 0$$

+ $\mathrm{Tr}\{\rho\} = 1$

+ $\rho = \rho^\dagger$

+ positiv (semi)definit $\langle\Psi|\rho|\Psi\rangle \ge 0 \quad \forall |\Psi\rangle$ oder: alle EW $\lambda_n \ge 0$

+ Spektralzerlegung $\sum_n \lambda_n = 1$

$$\rho = \sum_n \lambda_n |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|$$

$$\rho|\Phi_n\rangle = \lambda_n |\Phi_n\rangle$$

in Allg.: $\lambda_n \neq P_n$

$|\Phi_n\rangle \neq |\Psi_n\rangle$

Bsp.: $\lambda_1 = \frac{1}{4}(2-\sqrt{2})$

$\lambda_2 = \frac{1}{4}(2+\sqrt{2})$

- DM heißt "rein" falls gilt $\rho = \rho^2$

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

alle anderen sind "gemischt"

- geschlossenes Quantensystem: von-Neumann-Gleichung $\dot{\rho} = -i[H(t), \rho(t)]$ Trotter/WW-Bild

Lösung $\rho(t) = \mathcal{U}(t)\rho_0\mathcal{U}^\dagger(t)$

Zeitentw.-Operator $\dot{\mathcal{U}}(t) = -i H(t)\mathcal{U}(t)$

falls $H \to$ const $\mathcal{U}(t) = e^{-iH\cdot t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it)^n}{n!} H^n$

- ERW $\langle A\rangle = Tr\{A\rho\} = Tr\{\rho A\}$

$$= \sum_n P_n \langle\Psi_n|A|\Psi_n\rangle$$

- Messung : Observable $\hat{O} = \hat{O}^\dagger = \sum_n O_n |n\rangle\langle n|$

$$\rho \xrightarrow{(n)} \rho^{(n)} = \frac{|n\rangle\langle n|\rho|n\rangle\langle n|}{P_n}$$

$P_n = Tr\{|n\rangle\langle n|\rho\}$

WS für Messergebnis n

- kanon. GG-Zustand

$$\rho_c = \frac{e^{-\beta H}}{Tr\{e^{-\beta H}\}}$$

großkanon. GG-Zustand

$$\rho_{gc} = \frac{e^{-\beta(H-\mu N)}}{Tr\{e^{-\beta(H-\mu N)}\}}$$

chem. Potential TT-Operator

- von-Neumann-Entropie

$$S(\rho) = -Tr\{\rho\ln\rho\} = -\sum_n \lambda_n \ln\lambda_n$$

kanonisch & großkanonische GG-Zustände maximieren die von-Neumann-Entropie bei vorgeg. $\langle E\rangle$ oder $\langle E\rangle, \langle N\rangle$

- Pauli-Matrizen

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\sigma^\alpha)^2 = \mathbb{1}$$

$$H = \alpha(\vec{n}\cdot\vec{\sigma}) = \alpha(n_x\cdot\sigma^x + n_y\sigma^y + n_z\cdot\sigma^z)$$

$\vec{n}^2 = 1$

$(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2 =$

$$e^{-i\alpha\cdot t(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})} = \cos(\alpha t)\cdot\mathbb{1} - i\sin(\alpha\cdot t)(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})$$

• Basis für Produkträume C $\quad V \quad W$

$\qquad\qquad\qquad |v_i\rangle \quad |w_i\rangle$

$|c_{ij}\rangle = |v_i\rangle \otimes |w_j\rangle$

$N_C = N_V \cdot N_W$

• bosonische Leiter-Operatoren

$[b_k, b_q^\dagger] = \delta_{kq} \qquad [b_k, b_q] = 0 = [b_k^\dagger, b_q^\dagger]$

$\hat{N} = \sum_k b_k^\dagger b_k$ $\qquad$ TZ-Operator

Fock-Zustände $|n_1, \dots, n_N\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle \qquad n_i \in \{0, 1, 2, \dots\}$

$\hat{N} |n_1 \dots n_N\rangle = \left(\sum_k n_k\right) \cdot |n_1 \dots n_N\rangle$

• fermionische Leiteroperatoren

$\{f_k, f_q^\dagger\} = \delta_{kq} \qquad \{f_k, f_q\} = 0 = \{f_k^\dagger, f_q^\dagger\}$

$\{A, B\} = AB + BA$

$|n_1 \dots n_N\rangle$ mit $n_i \in \{0, 1\}$

• $H = \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k \rightsquigarrow \rho_{gc} = \dfrac{e^{-\beta(H - \mu N)}}{Tr\{e^{-\beta(H - \mu N)}\}}$

$\mu \le \omega_k \quad \forall k$

$\langle a_k \rangle_{gc} = Tr\{a_k \rho_{gc}\} = 0$

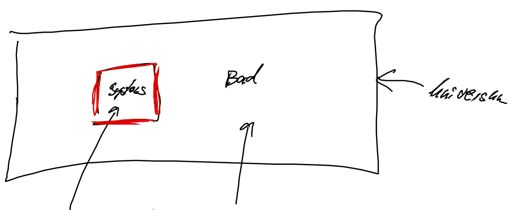
$\langle a_k^\dagger a_q \rangle_{gc} = Tr\{a_k^\dagger a_q \rho_{gc}\} = \dfrac{1}{e^{\beta(\omega_k - \mu)} - 1} \delta_{kq}$

Bose-Einstein-Verteilung

• $H = \sum_k \varepsilon_k f_k^\dagger f_k$

$\langle f_k \rangle_{gc} = 0 \qquad \langle f_k^\dagger f_q \rangle_{gc} = \dfrac{\delta_{kq}}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1}$

Fermi-Dirac-Verteilung



$H = H_S + H_I + H_B$