2.3. Quantenmechanische Gleichgewichts-verteilungen

Mikrozustände $\longrightarrow$ quantenmech. Zustandsraum $\mathcal{H}$

klass. Zustandsraum Γ

$\xi \in \Gamma \in \mathbb{R}^{6N}$

$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ Hilbertraum

'ket' Zustandsvektor

Basis (vollständiges ONS) : $|\alpha\rangle$

$\langle\alpha|\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}$ Ortho-normal

$\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \underline{1}$ Vollständigk.

Entwicklung nach Basiszuständen $\quad |\psi\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle \langle\alpha|\psi\rangle$

'bra' 'ket'

$\langle \underline{r} | \psi\rangle = \psi(\underline{r})$ Ortsdarstellung

Wellenfunktion

Mikroobservable

klass. Phasenraumfkt $\longrightarrow$ q.m. Operatoren

$M : \Gamma \longrightarrow \mathbb{R}$ $\qquad$ $\hat{M} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$

kommutieren $\qquad$ kommutieren i.a. nicht

[Quantisierung $\hat{=}$ Aufstellen von Vertauschungsrelationen]

Maximalmessung : Messung eines vollständigen Satzes vertauschbarer Observablen $\rightarrow |\alpha\rangle$

Messwerte $\longrightarrow$ $M_\alpha \in \mathbb{R}$ Eigenwert im Eigenzustand $|\alpha\rangle$

$M(\xi)$

$$\boxed{\hat{M}\,|\alpha\rangle = M_\alpha\,|\alpha\rangle}$$

Spektraldarstellung

$$\hat{M} = \sum_\alpha \hat{M}\,|\alpha\rangle\langle\alpha|$$

$$= \sum_\alpha M_\alpha\,\underbrace{|\alpha\rangle\langle\alpha|}_{\hat{P}_\alpha}$$

Projektionsoperator auf $|\alpha\rangle$

$\Downarrow$ Observable „Ist das System im Zustand $|\alpha\rangle$"

Quantenmechanische Erwartungswerte einer Messung:

(i) $|\psi\rangle$ heißt <u>reiner Zustand</u> (Vektorzustand)

$$|\langle\alpha|\psi\rangle|^2 = \langle\psi\underbrace{|\alpha\rangle\langle\alpha|}_{P_\alpha}\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_\alpha|\psi\rangle = p_\alpha$$

$\Downarrow$

Wahrscheinlichkeit für das Resultat $|\alpha\rangle$ im Zustand $|\psi\rangle$

$$\langle\hat{M}\rangle = \langle\psi|\hat{M}|\psi\rangle = \sum_\alpha \langle\psi|\hat{M}|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle$$

$$= \qquad \uparrow \; \sum_{\alpha'} |\alpha'\rangle\langle\alpha'|$$

$$= \sum_{\alpha\alpha'} \langle\psi|\alpha'\rangle\langle\alpha|\psi\rangle\langle\alpha'|\hat{M}|\alpha\rangle$$

falls $|\alpha\rangle$ Eigenzustände zu $\hat{M}$

$$= \sum_\alpha \underbrace{\langle\psi|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle}\, M_\alpha = \boxed{\sum_\alpha p_\alpha M_\alpha = \langle\hat{M}\rangle}$$

Schreibweise mit Projektor $\hat{P}_\psi$ auf Zustand $|\psi\rangle$

$$\langle \hat{M} \rangle = \sum_\alpha \langle \alpha | \underbrace{\psi \rangle \langle \psi}_{\hat{P}_\psi} | \hat{M} | \alpha \rangle = \sum_\alpha \langle \alpha | \hat{P}_\psi \hat{M} | \alpha \rangle$$

$$= \mathrm{tr}\,(\hat{P}_\psi \hat{M}) = \boxed{\mathrm{tr}\,(\hat{M} \hat{P}_\psi) = \langle \hat{M} \rangle}$$

Def.: $\mathrm{tr}\,\hat{X} := \sum_\alpha \langle \alpha | \hat{X} | \alpha \rangle$ in einer beliebigen Basis $|\alpha\rangle$

Spur eines Operators (tr = trace = Spur)

Satz: Die Spur ist invariant bei Basiswechsel!

(ii) Quantenmechan. Gemisch

reiner Zustand | klass. Mechanik | $\xrightarrow[\text{QM Unschärfe}]{\text{prinzipielle}}$ | Quantenmechanik

makroskop. Beobachtung

$\downarrow$ unvollständige Messdaten (nur Mittelwerte)

$\downarrow$ unvollst. Information der Mikroobserv.

Gemisch | klass. Statistik | $\dashrightarrow$ | Quantenstatistik

Basis der Mikrozustände $|\alpha\rangle$ $\to$ sample set der Zufallsereignisse

$$\langle \hat{M} \rangle = \sum_\alpha p_\alpha \underbrace{\langle \alpha | \hat{M} | \alpha \rangle}_{\text{qm. Erwartungswert im reinen Zustand } |\alpha\rangle} \qquad \text{Erwartungswert}$$

$$= \sum_{\alpha\beta} P_\alpha \langle\alpha|\hat{M}|\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle$$

$$= \sum_\beta \sum_\alpha \langle\beta|\underbrace{\alpha\rangle P_\alpha \langle\alpha}_{\hat{\varrho}}|\hat{M}|\beta\rangle$$

$$= \sum_\beta \langle\beta|\hat{\varrho}\hat{M}|\beta\rangle \qquad \langle\hat{M}\rangle = \mathrm{tr}(\hat{\varrho}\hat{M})$$

mit dem statistischen Operator (Dichtematrix)

$$\hat{\varrho} = \sum_\alpha P_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_\alpha P_\alpha \hat{P}_\alpha$$

Überlagerung von Projektoren $\hat{P}_\alpha$ mit statistischen Gewichten P_α.

Bemerkung: reine Zustände $\rightarrow$ kohärente Überlagerung von Wahrscheinlichkeitsamplituden

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle$$

$$\langle\hat{M}\rangle = \sum_{\alpha\alpha'} \underline{\langle\psi|\alpha\rangle} \langle\alpha|M|\alpha'\rangle \underline{\langle\alpha'|\psi\rangle}$$

qm. Phasen

"Interferenzterme falls $\hat{M}$ nicht diagonal in $|\alpha\rangle$"

Gemisch $\longrightarrow$ inkohärente Überlagerung von reinen Zuständen

$$\hat{\varrho} = \sum_\alpha P_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

$$\langle\hat{M}\rangle = \sum_\alpha P_\alpha \langle\alpha|\hat{M}|\alpha\rangle \Rightarrow \text{keine qm. Interferenz}$$

Normierung des stat. Operators:

$$\mathrm{tr}\,\hat{\varrho} = \sum_{\beta\alpha} \langle\beta|\alpha\rangle P_\alpha \underbrace{\langle\alpha|\beta\rangle}_{\delta_{\alpha\beta}} = \sum_\alpha P_\alpha = 1$$

Darstellung reiner Zustände $|\psi\rangle$ $\qquad \hat{\varrho} = |\psi\rangle\langle\psi|$

Projektor $\hat{P}_\psi$

$$\boxed{\langle\hat{M}\rangle = \mathrm{tr}\,(\hat{\varrho}\hat{M})}$$

Mathematische Formalisierung des Zustandsbegriffes (klassisch + qm.)

Zustand = normiertes, pos. lineares Funktional auf der Algebra $\mathcal{M}$ der Observablen

$$\varrho : \mathcal{M} \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$\hat{M} \longmapsto \mathrm{tr}\,(\hat{\varrho}\hat{M}) = \langle\hat{M}\rangle$$

reiner Zustand = Extremalpunkt der konvexen Menge der Zustände

Informationsmaße

- Shannon-Information $\qquad I(\varrho) = \sum_\alpha P_\alpha \ln P_\alpha = \mathrm{tr}\,(\hat{\varrho}\ln\hat{\varrho})$

$\ln\hat{\varrho}$ ist definiert durch Spektraldarstellung

$$\ln\hat{\varrho} = \sum_\alpha \ln P_\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

- Informationsgewinn: $\qquad K(\varrho,\varrho') = \mathrm{tr}\left[\hat{\varrho}\,(\ln\hat{\varrho} - \ln\hat{\varrho}')\right]$

(Eigenschaften wie im klass. Fall ≥ 0)

Verallgemeinerte kan. statistischer Operator

$$\mathrm{tr}\,\hat{\varrho} = 1$$
$$\mathrm{tr}\,\hat{\varrho}\,\hat{M}^\nu = \langle M^\nu \rangle$$

Prinzip der vorurteilsfreien Schätzung unter Nebenbed.

$$\Rightarrow \hat{\varrho} = e^{\Psi - \lambda_\nu \hat{M}^\nu}$$

$\nu = 1, \dots, m$

- Voraussetzungen:
  - Die reinen Zustände $\hat{P}_\alpha$ haben gleiche a-priori Wahrsch.
  - $|\alpha\rangle$ ist durch Maximalmessung gegeben.
  - Die $\hat{M}^\nu$ müssen nicht untereinander kommutieren aber $[\hat{M}^\nu, H] = 0$

    damit sie Erhaltungsgrößen sind $\rightarrow$ thermodyn. Gleichgewicht

kanonischer statist. Operator

$$\hat{\varrho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}} \qquad Z := \mathrm{tr}\left(e^{-\beta \hat{H}}\right)$$