English Summary:

grandcanonical distribution

$$\rho(\xi) = \Xi^{-1} e^{-\beta(H-\mu N)} \qquad \xi \in \Gamma = \bigcup_{N=1}^{\infty} \mathbb{R}^{6N}$$

quantum-mechanical equilibrium distribution:

pure state: $\boxed{\text{class. mech.}} \xrightarrow[\text{qm. uncertainty}]{\text{principal}} \boxed{\text{quantum mech.}}$

macr. observation: class. mech. → (incomplete set of observables) → class. statistics; quantum mech. → (incomplete info. on microstates) → quantum statistics

mixture: $\boxed{\text{class. statistics}}$ - - - → $\boxed{\text{quantum statistics}}$

qm. mixture ⟷ pure state $\langle \hat{M} \rangle = \langle \psi | \hat{M} | \psi \rangle = \mathrm{tr}(\hat{\rho}_\psi \hat{M})$

projector $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$

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

P_α Wahrscheinlichkeitsverteilung

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

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

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

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

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

mit dem statistischen Operator (Dichtematrix $\hat{\varrho}_{\alpha\beta}$)

$$\boxed{\hat{\varrho} = \sum_\alpha p_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_\alpha p_\alpha \hat{\mathcal{P}}_\alpha}$$

Überlagerung von Projektoren $\hat{\mathcal{P}}_\alpha$ mit statist. Gewichten p_α

Bem.: reine Zustände $\to$ kohärente Überlagerung von Wahrscheinlichkeitsamplitude

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

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

$e^{-i\varphi}$ qm. Phasen $e^{i\varphi'}$

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

Gemisch $\longrightarrow$ inkohärente Überlagerung von reinen Zuständen

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

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

Normierung des statist. Op.

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

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

Projektor $\hat{\mathcal{P}}_\psi$

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

einheitliche Darstellung

NB: Math. Formulierung des Zustandsbegriffs:
(klass. + 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 = Extremalpkt. der konvexen Menge der Zustände

Informationsmaße

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

$$= \sum_\beta \langle \beta | \hat{\varrho} \ln \hat{\varrho} | \beta \rangle$$

$$= \sum_{\beta\alpha} P_\alpha \underbrace{\langle \beta | \alpha \rangle \langle \alpha | \beta \rangle}_{\delta_{\alpha\beta}} \ln P_\beta$$

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

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

Informationsgewinn $K(\hat{\varrho}, \hat{\varrho}') = \mathrm{tr}\left[\hat{\varrho}(\ln \hat{\varrho} - \ln \hat{\varrho}')\right]$
(Eigenschaften wie klass.: $K \geq 0$)

Verallgemeinerter kanon. statist. Op.

Vorurteilsfreie Schätzung unter Nebenbed.

$$\mathrm{tr}\,\hat{\varrho} = 1$$

$$\mathrm{tr}(\hat{\varrho}\hat{M}^\nu) = \langle M^\nu \rangle \qquad \nu = 1, \dots, m$$

Voraussetzung: Die reinen Zustände $\hat{P}_\alpha$ haben gleiche a-priori Wahrscheinl., $|\alpha\rangle$ ist durch Maximalmessung gegeben.

$$\Rightarrow \boxed{\hat{\varrho} = \exp(\psi - \lambda_\nu \hat{M}^\nu)}, \quad \psi = -\ln \mathrm{tr}\left(\exp\{-\lambda_\nu \hat{M}^\nu\}\right)$$

NB: Die $\hat{M}^\nu$ müssen nicht miteinander kommutieren, aber $[\hat{M}^\nu, H] = 0 \qquad \nu = 1, \dots, m$

damit sie Erhaltungsgrößen sind (thermodyn. Gleichgewicht)

Kanon. statist. Op. $\boxed{\hat{\varrho} = Z^{-1} e^{-\beta \hat{H}}}$ $\quad Z := \mathrm{tr}\left(e^{-\beta \hat{H}}\right)$

$\hat{H}$ Hamiltonop.

großkanon. Op. $\Rightarrow$ Fermi-, Boseverteil. $\langle \hat{N} \rangle = \mathrm{tr}(\hat{\varrho}\hat{N})$