2.3 Vorurteilsfreie Schätzung des statistischen Operators zu fester Zeit

$\rho(t)$ mit $t =$ fest festlegen aus Messgrößen

die im Experiment abgefragt werden, erlaubt:

- Festlegung Anfangsbedingg. $\rho(t_0)$ vor extern induzierter Dynamik durch Felder $h_\alpha(t)$, $t > t_0$
- Bestimmung stationärer Zustände $\rho(t) \equiv \rho =$ zeitlich konst

2.3.1. Unschärfemaß des statist. Operators

Mangel an Informationen $\rightarrow$ wird begegnet mit

Mangel an Frage (wenige exp. Observable abfragen)

<u>definiere</u> Satz von Observablen $\{ G_\nu \}$

<u>einfachst Bsp.</u> $\{ H \}$ $\hat{=}$ Energiemessg.

$\{ H, N \}$ $\hat{=}$ Energie, Teilchenzahl-

→ $\{G_\nu\}$ legt bereits ρ zu einem „großen Teil" massg. fest

wir müssen zunächst überlegen wie unter den exp. RB

das ρ „vorurteilsfrei" zu wählen ist:

→ man darf nicht mehr Info verlangen als durch $\{G_\nu\}$

festgelegt ist.

müssen Maß finden das unter den Bedingg. d. Experts

nicht zu viele Infos gefordert werden:

<u>Unschärfemaß</u>: $\eta(\rho) = -\underbrace{k}_{\text{legt die Temperaturskala d. Exp. fest}}\, sp(\rho \ln \rho)$

oder: Maß für das Nichtwissen, muß maximiert werden unter exp. RB

Boltzmann Konstante $k = 1{,}38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$

EW v. $\ln \rho$

legt die Temperaturskala d. Exp. fest
(wir müssen ja untereinander reden)

($\eta(\rho)$ hat Analogon in der Informationstheorie:
C. Shannon – Informationsmaß)

Def. ist sinnvoll:

a) $\eta(\rho)$ ist eine positive Zahl, um Unschärfe zu messen

$$\rho = \sum_m r_m |r_m\rangle\langle r_m|$$

$$\rho |r_m\rangle = r_m |r_m\rangle$$

$$\eta(\rho) = -k\,Sp(\rho \ln \rho) = -k \sum_m \langle r_m | \rho \ln \rho | r_m\rangle$$

$$\eta(\rho) = -k \sum_m \langle r_m | r_m \ln r_m | r_m\rangle$$

$$= -k \sum_m r_m \ln r_m \quad \text{aus } r_m > 0 \text{ (Wahrscheinlichkeiten)}$$

$$\boxed{\eta(\rho) \geq 0} \quad (\ln r_m < 0)$$

(b) bei einem reinen Zustand sollte $\eta = 0$ sein

$$\eta(\rho) = -k \sum_m r_m \ln r_m = \left| \begin{array}{l} \text{nur } 1 \; r_m = r_0 = 1 \\ \text{alle and. sind } 0 \end{array} \right| = \text{einsetzen}$$

$$\boxed{\begin{array}{c} \eta(\rho) = 0 \\ (\text{rein } Z) \end{array}} \quad (\ln 1 = 0)$$

(c) bei einem völlig unbekannten Zustand
(alle Ensemblemitglieder gleich wahrscheinlich)

$y \to \infty$

betrachte Hilbertraum der Dimension d $(d \to \infty)$

$r_m = \frac{1}{d}$, analog zu Würfel $\left(\frac{1}{6}\right)$

Wahrscheinlichkeit Ensemblemitglied zu finden ist $\forall$ gleich,

$$y(\rho) = -k \sum_{m=1}^{d} r_m \ln r_m = -k \underbrace{\sum_{m=1}^{d}}_{\cancel{d}\text{ Summand}} \frac{1}{\cancel{d}} \ln \frac{1}{d}$$

(max. gemischter Zustand)

$$\boxed{y(\rho) = k \ln d \xrightarrow[d \to \infty]{} \infty}$$

$\to$ damit sinnvolles Unschärfemaß gefunden.

jetzt soll dies maximiert werden und exp. RB

$\to \rho(t_0)$

2.3.2. Der generalisierte kanonische statistische Operator

(GKSO - Abkürzg.)

Wissen: - Satz von Observablen $\{G_\nu\}$

man sagt diese $\{G_\nu\}$ bildet eine Beobachtungsebene

- es muß gelten $\langle G_\nu \rangle = sp(\rho G_\nu), \; sp(\rho) = 1$

die Maximierg. der Unschärfe y erfolgt

unter diesen Nebenbedingungen

(Jaynesches Prinzip der maximalen Unschärfe)

Unter diesen Bedingungen ist ρ gegeben durch

$$\rho \xrightarrow[(=)]{\{G_\nu\}} R_{\{G_\nu\}} = \frac{1}{Z_{\{G_\nu\}}} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu G_\nu}$$

ist der statistische Operator (GKSO)

zur Beobachtungsebene $\{G_\nu\}$

dabei Z die Zustandssumme $Z = sp\left(e^{-\sum_\nu \lambda_\nu G_\nu}\right)$

λ_ν sind Lagrangeparameter die die RB einbauen (analog zur Mechanik) und λ_ν selbst ist durch Parameter der Umgebung festgelegt.

<u>Bemerkungen</u>:

- $R_{\{g_\nu\}}$ ist GKSO zur Beobachtungsebene $\{g_\nu\}$)
- man charakterisiert verschiedene Ensembles durch die Beobachtungsebene (Bsp: kanonische, großkanon., mikrokan. Ensemble)
- λ_ν wird durch Umgebg. festgelegt,
  man kann an $\langle g_\nu \rangle = Sp(R\, g_\nu)$
  Gleichg. der Art $\lambda_\nu = \lambda_\nu(\langle g_\nu \rangle)$ festlegen
  (gewisse Willkür bei der Interpretation von Umgebungs- und Systemgrößen)

- Hoffnung, daß nicht <u>nur</u> $\langle g_\nu \rangle$ richtig berechnet wird, kann sond. auch $\langle F_\nu \rangle \notin$ Beobachtebene
  $\longrightarrow$ $\langle F_\nu \rangle$ ✓ berechnet wird, so spricht man davon, daß $R_{\{g_\nu\}}$ repräsentativ auch für $\{F_\nu\}$ ist

Beweis, daß η durch R maximiert wird:

3 Schritte a – c

a) Unschärfemaß für R ableiten:

$$R = \frac{1}{Z} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \xi_\nu} \,, \quad \ln R = -\underbrace{\sum \lambda_\nu \xi_\nu - \ln Z}$$

$$\eta(R) = -k \, sp(R \ln R)$$

$$= k \sum_\nu \lambda_\nu \, sp(R \xi_\nu) + k \ln Z$$

b) nehmen einen and. statistischen Operator ρ an (beliebig)

z.z.: $\eta(R) \geq \eta(\rho)$ → R ist ordentlich gewählt, denn hat das größte Unschärfemaß

(richtiger Beweis in (c))

$$sp(\rho \ln R) = -\sum_\nu \lambda_\nu \, sp(\rho \xi_\nu) - \ln Z$$

$$sp(R \ln R) = -\sum_\nu \lambda_\nu \, sp(\underline{\underline{R}} \xi_\nu) - \ln Z$$

weil $sp(\rho \xi_\nu) = sp(R \xi_\nu)$ ist,

(RB: R soll $\langle \xi_\nu \rangle$ richtig beschreiben)

$$\boxed{\rightarrow \; sp(\rho \ln R) = sp(R \ln R)} \quad (*)$$

c) wirklich Beweis, daß $\eta(R) \geq \eta(\rho)$:

$$\underbrace{\mathrm{sp}(\rho \ln \rho) - \mathrm{sp}(R \ln R)}_{(*)} \geq 0 \quad \text{ist zu zeigen.}$$

$$= \mathrm{sp}(\rho \ln \rho) - \mathrm{sp}(\rho \ln R) = \left| \begin{array}{l} \text{Kein Eigenwertproblem} \\ \rho|r_m\rangle = r_m|r_m\rangle \\ R|w_n\rangle = w_n|w_n\rangle \end{array} \right| =$$

$$= \sum_m r_m \left(\ln r_m - \langle r_m | \ln R | r_m \rangle \right) \qquad (\text{Spur mit dyade } |r_m\rangle)$$

$$= \sum_m \sum_n \left(\overbrace{\langle r_m | w_n \rangle \langle w_n | r_m \rangle}^{1} r_m \ln r_m - r_m \langle r_m | \ln R \overbrace{| w_n \rangle \langle w_n |}^{1} r_m \rangle \right)$$

$$= \sum_{m,n} |\langle r_m | w_n \rangle|^2 r_m \left(\ln r_m - \ln w_n \right)$$

geometrisch aufzeichnen.

$$= \sum_{m,n} |\langle r_m | w_n \rangle|^2 \left(-r_m \left(\ln \frac{w_n}{r_n} \right) \right) \geq \sum_{m,n} |\langle r_m | w_n \rangle|^2 (-r_m) \left(\frac{w_n}{r_m} - 1 \right)$$

$$\geq \sum_{m,n} |\langle r_m | w_n \rangle|^2 (r_m - w_n)$$

$$= \sum_m r_m - \sum_n w_n = 1 - 1 = 0$$

Summe über Wahrscheinlichkeiten, obige Gl. mal $-k$

$$\boxed{\rightarrow \eta(\rho) \leq \eta(R)}$$

2.3.3. Entropie als maximales Unschärfemaß der Beobachtungsebene

2.3.3.1. Entropie

Das zu einer Beobachtungsebene gehörige maximale Unschärfemaß wird Entropie S genannt.

$$\eta(R) = -k \operatorname{sp}(R \ln R) \equiv S$$

Die Entropie wird sich ähnlich zur Mechanik später als Potential interpretieren lassen. Aus der Entropie kann man (später) Zustandsgleichungen berechnen durch Gradientenbildung.

$$S = -k \, \mathrm{sp}\left(\frac{1}{Z} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \varrho_\nu} \ln\left(\frac{1}{Z} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \varrho_\nu} \right)\right)$$

$$= -k \, \mathrm{sp}\left(\frac{1}{Z} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \varrho_\nu} \left(-\sum_\nu \lambda_\nu \varrho_\nu - \ln Z \right)\right)$$

$$\boxed{S = k \sum_\nu \lambda_\nu \langle \varrho_\nu \rangle + k \ln Z}$$

ist die explizite Form der Entropie S.