12.12.2005

Beweis in drei Schritten:

I Betrachte reine Gesamtheit mit Zustand $|\Psi\rangle$
Wähle für $\hat{W}$ Projektor $P_\psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ (QM: $\hat{P}$ Projektor $\Leftrightarrow$ $\hat{P}^+ = \hat{P}$ und $\hat{P}^2 = \hat{P}$) ($\hat{P}$ ist hier irreduzibel, d.h. U-Raum 1-dim.). Dann gilt:

1. $\langle n|\hat{P}_\Psi^+|m\rangle \overset{(10.46)}{=} \overline{\langle m|\hat{P}_\Psi|n\rangle} = \overline{\langle m|\Psi\rangle\langle\Psi|n\rangle} = \langle n|\Psi\rangle\langle\Psi|m\rangle = \langle n|\hat{P}|m\rangle$ also $P_\Psi^+ = P_\Psi$
2. $\hat{P}_\Psi|\Psi\rangle = |\Psi\rangle \underbrace{\langle\Psi|\Psi\rangle}_{=1} = 1|\Psi\rangle$
   und für zu $|\Psi\rangle$ orthogonale Zustände $|n\rangle$: $\hat{P}_\Psi|n\rangle = |\emptyset\rangle = 0|n\rangle$
   $\Rightarrow P_\Psi$ hat nur Eigenwerte 1 (zu Ψ) und 0
3. Sei $\{|n\rangle\}$ ein vonS, dem Ψ als $|0\rangle$ angehört.$\Rightarrow$
   $\mathrm{Sp}\, P_\Psi = \sum_{n\geq 0}\langle n|P_\Psi|n\rangle = \langle\Psi|\underbrace{P_\Psi|\Psi\rangle}_{=|\Psi\rangle} + \sum_{n>0}\langle n|\underbrace{P_\Psi|n\rangle}_{=0} = 1$
4. $\mathrm{Sp}\, \hat{A}\hat{P}_\Psi = \sum_{n\geq 0}\langle n|\hat{A}\hat{P}_\Psi|n\rangle = \langle\Psi|\hat{A}\hat{P}_\Psi|\Psi\rangle + \sum_{n>0}\langle n|\hat{A}\hat{P}_\Psi|n\rangle = \langle\hat{A}\rangle_\Psi + 0 = \langle\hat{A}\rangle$

II Betrachte gemischte Gesamtheit basierend auf vonS $\{|n\rangle\}$, jeder Zustand mit Wahrscheinlichkeit $p_n \geq 0$ und $\sum_n p_n = 1 \Rightarrow$
Wähle

$$\hat{W} = \sum_n p_n\hat{P}_n = \sum_n p_n|n\rangle\langle n| \tag{10.48}$$

1. $\hat{W}^+ = \sum_n \overline{p}_n\hat{P}_n^+ = \sum_n p_n\hat{P}_n = \hat{W}$
2. $\hat{W}|m\rangle = \sum_n p_n|n\rangle \underbrace{\langle n|m\rangle}_{=\delta_{n,m}} = p_m|m\rangle$ (mit $p_m \geq 0$)
3. $\mathrm{Sp}\, \hat{W} = \sum_m\langle m|\hat{W}|m\rangle = \sum_{n,m} p_n\langle m|n\rangle \underbrace{\langle n|m\rangle}_{=\delta_{n,m}} = \sum_n p_n = 1$
4. $\mathrm{Sp}\, \hat{A}\hat{W} = \sum_m\langle m|\hat{A}\hat{W}|m\rangle = \sum_{n,m} p_n\langle m|\hat{A}|n\rangle \underbrace{\langle n|m\rangle}_{=\delta_{n,m}} = \sum_n p_n\langle n|\hat{A}|n\rangle = \langle\hat{A}\rangle$

III Gegeben Gemenge aus nicht-orthonormalen Zuständen $\{|\Psi_m\rangle\}$, jeder Zustand mit Wahrscheinlichkeit $q_m \geq 0$ und $\sum_m q_m = 1$
sei $\hat{Q}_m = |\Psi_m\rangle\langle\Psi_m|$
Betrachte $\tilde{W} = \sum_m q_m\hat{Q}_m$

1. $\tilde{W} = \tilde{W}^+$ (da $\hat{Q}_m^+ = \hat{Q}_m$)
2. Daher gilt (QM): Es gibt Spektralzerlegung bzgl. vonS (Eigenzustände): $\tilde{W} =$

$\sum_n \lambda_n \hat{P}_n$. mit λ_n Eigenwerte: $\tilde{W}\hat{P}_n = \lambda_n \hat{P}_n$ (*) und

$$\begin{aligned}
\lambda_n &= \mathrm{Sp}\,(\lambda_n \hat{P}_n) \stackrel{(*)}{=} \mathrm{Sp}\,(\tilde{W}\hat{P}_n) \\
&= \sum_m q_m\,\mathrm{Sp}\,(\hat{Q}_m \hat{P}_n) \\
&\stackrel{(10.45)}{=} \sum_m q_m \left(\sum_{n'} \langle n'|\Psi_m\rangle\langle\Psi_m|n\rangle \underbrace{\langle n|n'\rangle}_{=\delta_{n,n'}} \right) \\
&= \sum_m q_m \overline{\langle\Psi_m|n\rangle}\langle\Psi_m|n\rangle = \sum_m q_m \underbrace{|\langle\Psi_m|n\rangle|^2}_{\geq 0} \geq 0
\end{aligned}$$

($\Rightarrow \tilde{W}$ lässt sich immer durch reine Gesamtheit wie II darstellen.)

3. (sei $\{|n\rangle\}$ vonS)
   $\mathrm{Sp}\,\tilde{W} = \sum_m q_m\,\mathrm{Sp}\,\hat{Q}_m \stackrel{(10.45)}{=} \sum_{m,n} q_m \langle n|\Psi_m\rangle\langle\Psi_m|n\rangle = \sum_{m,n} q_m \langle\Psi_m|n\rangle\langle n|\Psi_m\rangle \stackrel{(10.44)}{=}$ $\sum_n q_m \underbrace{\langle\Psi_m|\Psi_m\rangle}_{=1} = \sum_m q_m = 1$

4.

$$\begin{aligned}
\langle\hat{A}\rangle &\stackrel{(10.41)}{=} \sum_m q_m \langle\Psi_m|\hat{A}|\Psi_m\rangle \\
&\stackrel{(10.44)}{=} \sum_{m,n} q_m \langle\Psi_m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\Psi_m\rangle \\
&= \sum_{m,n} q_m \langle n \underbrace{|\Psi_m\rangle\langle\Psi_m|}_{=\hat{Q}_m} \hat{A}|n\rangle \\
&\stackrel{(10.45),(10.47)}{=} \mathrm{Sp}\,(\hat{A}\tilde{W})
\end{aligned}$$

Es gilt: $\hat{W}$ beschreibt reine Gesamtheit $\Leftrightarrow$ $\mathrm{Sp}\,\hat{W}^2 = 1$
Beweis:

$$\begin{aligned}
1 = \mathrm{Sp}\,\hat{W}^2 &\stackrel{(10.45)}{=} \sum_n \langle n|\hat{W}^2|n\rangle \\
&\stackrel{(10.48)}{=} \sum_n \langle n| \left(\sum_m p_m |m\rangle\langle m| \right)^2 |n\rangle \\
&= \sum_{n,m,m'} p_m p_{m'} \underbrace{\langle n|m\rangle}_{\delta_{n,m}} \underbrace{\langle m|m'\rangle}_{=\delta_{m,m'}} \langle m'|n\rangle \\
&= \sum_n p_n^2 \langle n|n\rangle = \sum_n p_n^2 \\
&\stackrel{0\leq p_n \leq 1,\, \sum p_n = 1}{\Leftrightarrow} \exists n_0 :\ p_{n_0} = 1,\, p_n = 0\,\forall n \neq n_0 \\
&\Leftrightarrow \hat{W} \text{beschreibt reine Gesamtheit}
\end{aligned}$$

Insgesamt: $\hat{W}$ entspricht klass. Phasenraumdichte $\rho(\underline{\pi})$

Schrödingergleichung: $\frac{\partial}{\partial t}|n\rangle = -i/\hbar \hat{H}|n\rangle$ $(*)$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \frac{\partial \hat{P}_n}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}|n\rangle\langle n| \\
&\overset{\text{Produktregel}}{=} \left(\frac{\partial}{\partial t}|n\rangle\right)\langle n| + |n\rangle\frac{\partial}{\partial t}\langle n| \\
&\overset{(*)}{=} -i/\hbar\hat{H}|n\rangle\langle n| + |n\rangle\left(-i/\hbar\hat{H}\langle n|\right) \\
&\overset{(10.46)}{=} -i/\hbar\left(\hat{H}|n\rangle\langle n| - |n\rangle\langle n|\hat{H}\right) \\
&= -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{P}_n] \\
\Rightarrow \quad \frac{\partial \hat{W}}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{W}]
\end{aligned} \tag{10.49}$$

(da die $p_n \neq p_n(t)$)
die quantenmechanische Liouvillegleichung.

Bewegungsgleichung für Mittelwerte (hier $\hat{A} \neq \hat{A}(t)$)

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \frac{d}{dt}\,\mathrm{Sp}\,(\hat{A}\hat{W}) = \mathrm{Sp}\left(\hat{A}\frac{\partial\hat{W}}{\partial t}\right)$$

Bei stationärer Gesamtheit $\frac{\partial \hat{W}}{\partial t} = 0$ $\Rightarrow$Mittelwerte zeitlich konstant.

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle &\overset{(10.49)}{=} -\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{Sp}\,(\hat{A}[\hat{H},\hat{W}]) \overset{\text{Def.}[.,.]}{=} -\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{Sp}\,(\hat{A}\hat{H}\hat{W} - \hat{A}\hat{W}\hat{H}) \\
&\overset{(10.47)}{=} -\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{Sp}\,(\hat{A}\hat{H}\hat{W} - \hat{H}\hat{A}\hat{W}) \overset{\text{Def.}[.,.]}{=} \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{Sp}\,([\hat{H},\hat{A}]\hat{W})
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$falls $\hat{A}$ Erhaltungsgröße ($[\hat{H},\hat{A}] = 0$)
$\Rightarrow\langle A\rangle(t)$ =const. (analog zur klass. Mechanik)

Anmerkung: Schrödingerbild: Zustände zeitabhängig $\rightarrow$ Projektoren $\hat{P}_n$ zeitabhängig, aber nicht Observablen (außer explizit $\hat{A} = \hat{A}(t)$)
Heisenbergbild: Zustände Zeitunabhängig, aber Observablen $\rightarrow$ Bewegungsgleichung für Observablen.

Verschiedene (konjugierte) makroskopische Messwerte $\hat{A}, \hat{A}'$ (wieder ohne genaue Def.) können nicht gleichzeitig scharf werden, also nicht gleichzeitig $\sigma^2_\Psi(\hat{A}^{(\prime)}) := \langle(\hat{A}^{(\prime)} - \langle\hat{A}^{(\prime)}\rangle)^2\rangle_\Psi = 0$
$\Rightarrow$betrachte relative Schwankungen (im Zustand $\Psi(t)$)

$$\Gamma_\Psi(\hat{A}) = \frac{\sigma_\Psi(\hat{A})}{\langle\hat{A}\rangle_\Psi}$$

Ergodenhypothese (QM):
Im Limes makroskopischer Systeme ($N \rightarrow \infty$) existiert für jede beliebe makroskopische Observable $\hat{A}$ und (fast) alle Anfangszustände $\Psi(0)$ die von $\Psi(0)$ unabhängigen Grenzwerte

$$\tilde{A} = \lim_{t\rightarrow\infty}\langle\hat{A}\rangle_{\Psi(t)} \quad \text{und} \quad \tilde{\Gamma}(\hat{A}) = \lim_{t\rightarrow\infty}\Gamma_{\Psi(t)}(\hat{A}) = 0$$

$\rightarrow$ Übergang zu Ensemblemittelwerten (analog klass. Mechanik)