1 Матрица плотности

Распределение Гиббса

Принцип максимальности энтропии

Матрица плотности

Запишем УШ.

собственные энергия

$$H|a\rangle = E_a |a\rangle$$

собственные состояния

Предположим $\langle a|a'\rangle = \delta_{a,a'}$

Стац сост: $|\psi\rangle = \sum_a c_a |a\rangle$

$$\sum_a |c_a|^2 = 1$$

Среднее (из КМ)

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \mathrm{Tr}\,\rho A$$

Где $\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{a,b} c_a c_b^* |a\rangle\langle b|$

матрица плотности чистого состояния

$$\mathrm{Tr}\,\rho = 1 \qquad \rho^2 = \rho$$

Матрица плотности смешанного состояния

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{Система может находиться в } |\psi_j\rangle \\ \text{с вероятностью } p_j,\ j = 1 \dots k \quad \sum_{j=1}^{k} p_j = 1\end{array}}$$

Определим среднее

$$\bar{A} = \sum_{j=1}^{k} p_j \langle\psi_j|A|\psi_j\rangle = \mathrm{Tr}\,\rho A$$

$$\rho = \sum_{j=1}^{k} p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$

$$\boxed{\mathrm{Tr}\,\rho = 1 \qquad \rho^2 \neq \rho \qquad \mathrm{Tr}\,\rho^2 < 1}$$

Динамика матрицы плотности

$$i\,\partial_t |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle$$

$$\rho(t) = e^{-iHt}\rho(0)\,e^{iHt}$$

$$\Downarrow$$

$$\partial_t \rho = i[\rho, H]$$

Уравнение Лиувилля. Матрица замкнутой системы удовлетворяет ему.

Распределение Гиббса

Для многих изолированных систем

(каноническое распред.)

ρ описывается распределением Гиббса

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \qquad Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}$$

(каноническая стат. сумма)

– стат сумма

$\beta = \frac{1}{T}$ – обратная температура

Среднее $\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\, \rho A$

Система + ρ (Гиббса) = термодинам равновес.

Принцип максимальности энтропии

Определим энтропию через ρ

$$S = -\mathrm{Tr}\,\rho \ln \rho$$

Максимизируем энтропию с условием

$$\mathrm{Tr}\,\rho H = E = \mathrm{const}$$

Не понял

ЗАВТРА