Formalizm kwantowej fizyki statystycznej

Jacek Jurkowski, Fizyka Statystyczna

Instytut Fizyki

2015

Formalizm: przestrzeń Hilberta

Formalizm: przestrzeń Hilberta

- Rolę przestrzeni fazowej odgrywa przestrzeń Hilberta $\mathcal{H}$:
  - (zupełna, ośrodkowa) przestrzeń wektorowa (niekoniecznie o skończonym wymiarze)
  - z iloczynem skalarnym (unitarnym) $\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ o własnościach

a) $\langle x | y \rangle = \langle y | x \rangle^*$

b) $\langle x | y + z \rangle = \langle x | y \rangle + \langle x | z \rangle$

c) $\langle x | \alpha y \rangle = \alpha \langle x | y \rangle$

d) $\langle x | x \rangle \geqslant 0$, przy czym $\langle x | x \rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0$

  - można określić długość dowolnego wektora $x \in \mathcal{H}$ jako $|x| = \sqrt{\langle x | x \rangle}$

Przykłady przestrzeni Hilberta

Przykłady przestrzeni Hilberta

1. Przestrzeń $\mathbb{C}^n$ (skończony wymiar) z iloczynem skalarnym

$$\langle x \,|\, y \rangle \;=\; \sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i$$

gdzie $x = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{C}^n$ oraz $y = (y_1, \ldots, y_n) \in \mathbb{C}^n$

Przykłady przestrzeni Hilberta

1. Przestrzeń $\mathbb{C}^n$ (skończony wymiar) z iloczynem skalarnym

$$\langle x \,|\, y \rangle \;=\; \sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i$$

gdzie $x = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{C}^n$ oraz $y = (y_1, \ldots, y_n) \in \mathbb{C}^n$

2. Przestrzeń funkcji $L^2(\mathbb{R})$ (nieskończony wymiar) z iloczynem skalarnym

$$\langle f \,|\, g \rangle \;=\; \int_{\mathbb{R}} f^*(x) g(x)\, dx$$

gdzie $f, g \in L^2(\mathbb{R}) \;=\; \left\{ f : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \,;\, \langle f \,|\, f \rangle < \infty \right\}$

Obserwable

Obserwable

- Obserwable: liniowe, samosprzężone operatory działające na $\mathcal{H}$, tzn. $\widehat{A} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$

Obserwable

- Obserwable: liniowe, samosprzężone operatory działające na $\mathcal{H}$, tzn. $\widehat{A}:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$
  - liniowość: $\widehat{A}(x+y)=\widehat{A}(x)+\widehat{A}(y)$ oraz $\widehat{A}(\alpha x) = \alpha\widehat{A}(x)$
  - operatorem sprzężonym do $\widehat{A}$ nazywamy taki operator $\widehat{A}^*$, że $\langle x\,|\,\widehat{A}y\rangle = \langle\widehat{A}^* x\,|\,y\rangle$
  - operator jest samosprzężony, jeśli $\widehat{A} = \widehat{A}^*$

Obserwable

- Obserwable: liniowe, samosprzężone operatory działające na $\mathcal{H}$, tzn. $\widehat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$
  - liniowość: $\widehat{A}(x+y) = \widehat{A}(x) + \widehat{A}(y)$ oraz $\widehat{A}(\alpha x) = \alpha \widehat{A}(x)$
  - operatorem sprzężonym do $\widehat{A}$ nazywamy taki operator $\widehat{A}^*$, że $\langle x \,|\, \widehat{A} y \rangle = \langle \widehat{A}^* x \,|\, y \rangle$
  - operator jest samosprzężony, jeśli $\widehat{A} = \widehat{A}^*$
- Przykłady: Operatory położenia, pędu i hamiltonian na przestrzeni $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ mają odpowiednio postać

$$\widehat{x}(\psi) = x\psi \,, \qquad \widehat{p}(\psi) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \,, \qquad \widehat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Stany układu kwantowego

Stany układu kwantowego

1. Stany czyste — wektory z przestrzeni Hilberta o długości 1, tzn. unormowane: $|x| = 1$

Stany układu kwantowego

1. Stany czyste — wektory z przestrzeni Hilberta o długości 1, tzn. unormowane: $|x| = 1$
   - Stanom czystym odpowiadają operatory rzutu $\widehat{P}_x$ na kierunek wektora x, ich działanie jest następujące $\widehat{P}_x(y) = \langle x | y \rangle x$

$$\widehat{P}_x \longleftrightarrow x \in \mathcal{H} \quad \text{unormowany}$$

1. Stany czyste — wektory z przestrzeni Hilberta o długości 1, tzn. unormowane: $|x| = 1$
   - Stanom czystym odpowiadają operatory rzutu $\widehat{P}_x$ na kierunek wektora x, ich działanie jest następujące $\widehat{P}_x(y) = \langle x | y \rangle x$

$$\widehat{P}_x \longleftrightarrow x \in \mathcal{H} \quad \text{unormowany}$$

2. Stany mieszane (statystyczne) — wypukłe kombinacje stanów czystych, tzn. jeśli x_i są stanami czystymi, to stan układu mieszanego określa operator gęstości

$$\widehat{\rho} = \sum_i p_i \widehat{P}_{x_i} , \quad \text{gdzie} \quad \sum_i p_i = 1$$

Własności operatorów gęstości

Własności operatorów gęstości

- dodatnio określony, tzn. $\langle x \,|\, \widehat{\rho}\, x \rangle \geqslant 0$
- samosprzężony, tzn. $\widehat{\rho}^* = \widehat{\rho}$
- klasy śladowej, tzn. $\mathrm{Tr}\,\widehat{\rho} = \sum_i \langle b_i \,|\, \widehat{\rho}\, b_i \rangle = 1$,
- Zbiór stanów mieszanych

$$\mathcal{P} \;=\; \left\{ \widehat{\rho}\,;\; \widehat{\rho} \geqslant 0\,,\; \widehat{\rho}^* = \widehat{\rho}\,,\; \mathrm{Tr}\,\widehat{\rho} = 1 \right\}$$

- dodatnio określony, tzn. $\langle\, x \,|\, \widehat{\rho}\, x \,\rangle \geqslant 0$
- samosprzężony, tzn. $\widehat{\rho}^* = \widehat{\rho}$
- klasy śladowej, tzn. $\mathrm{Tr}\, \widehat{\rho} = \sum_i \langle\, b_i \,|\, \widehat{\rho}\, b_i \,\rangle = 1,$
- Zbiór stanów mieszanych

$$\mathcal{P} \;=\; \left\{ \widehat{\rho}\,;\; \widehat{\rho} \geqslant 0\,,\; \widehat{\rho}^* = \widehat{\rho}\,,\; \mathrm{Tr}\, \widehat{\rho} = 1 \right\}$$

6. Średnia wartość obserwabli

$$\langle \widehat{A} \rangle_{\hat{\rho}} \;=\; \mathrm{Tr}\, (\widehat{\rho}\widehat{A})$$

Ewolucja stanu czystego

7. Ewolucja stanu czystego $|\psi(t)\rangle$ — równanie Schrödingera

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle \;=\; \widehat{H}(t)|\psi(t)\rangle\,, \quad \text{dla} \quad |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

7. Ewolucja stanu czystego $|\psi(t)\rangle$ — równanie Schrödingera

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle \;=\; \widehat{H}(t)|\psi(t)\rangle\,, \quad \text{dla} \quad |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

- Rozwiązanie jest postaci

$$|\psi(t)\rangle \;=\; \widehat{U}_{t,t_0}|\psi(t_0)\rangle\,,$$

gdzie

$$\widehat{U}_{t,t_0} = T\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int\limits_{t_0}^{t}\hat{H}(s)ds\right].$$

7. Ewolucja stanu czystego $|\psi(t)\rangle$ — równanie Schrödingera

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \widehat{H}(t)|\psi(t)\rangle\,, \quad \text{dla} \quad |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

- Rozwiązanie jest postaci

$$|\psi(t)\rangle = \widehat{U}_{t,t_0}|\psi(t_0)\rangle\,,$$

gdzie

$$\widehat{U}_{t,t_0} = T\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int\limits_{t_0}^{t}\hat{H}(s)ds\right].$$

- $\{\widehat{U}_t\}$ tworzą grupę operatorów unitarnych, tzn. $U_t^{-1} = U_t^*$ i spełniają równanie

$$i\hbar\frac{d}{dt}\widehat{U}_{t,t_0} = \widehat{H}(t)\widehat{U}_{t,t_0}\,, \qquad \widehat{U}_{t_0,t_0} = I$$

Ewolucja stanu mieszanego

Ewolucja stanu mieszanego

- Wychodząc ze stanu początkowego

$$\hat{\rho}(t_0) = \sum_\alpha p_\alpha |\psi_\alpha(t_0)\rangle\langle\psi_\alpha(t_0)|$$

otrzymamy

$$\hat{\rho}(t) = \widehat{U}_{t,t_0}\hat{\rho}(t_0)\widehat{U}^*_{t,t_0}$$

8. Równanie von Neumanna — ewolucji stanu mieszanego $\hat{\rho}(t)$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) \ = \ [\widehat{H}(t), \hat{\rho}(t)]$$

Ewolucja stanu mieszanego

- Wychodząc ze stanu początkowego

$$\hat{\rho}(t_0) = \sum_{\alpha} p_\alpha |\psi_\alpha(t_0)\rangle\langle\psi_\alpha(t_0)|$$

otrzymamy

$$\hat{\rho}(t) = \widehat{U}_{t,t_0}\hat{\rho}(t_0)\widehat{U}^*_{t,t_0}$$

8. Równanie von Neumanna — ewolucji stanu mieszanego $\hat{\rho}(t)$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) \;=\; [\widehat{H}(t), \hat{\rho}(t)]$$

- Wprowadzając operator Liouville'a $\mathcal{L}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\widehat{H}, \,\cdot\,]$ otrzymamy w ogólności

$$\hat{\rho}(t) = T\exp\left[\int_{t_0}^{t} \mathcal{L}(s)ds\right]$$

Ewolucja układów otwartych

- Zredukowana dynamika układu złożonego: układ (S) + rezerwuar (R) na przestrzeni Hilberta
$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$$

Ewolucja układów otwartych

- Zredukowana dynamika układu złożonego: układ (S) + rezerwuar (R) na przestrzeni Hilberta

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$$

- Produktowy stan początkowy $\widehat{\rho}_S(t_0) \otimes \widehat{\rho}_R(t_0)$

Ewolucja układów otwartych

- Zredukowana dynamika układu złożonego: układ (S) + rezerwuar (R) na przestrzeni Hilberta
$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$$

- Produktowy stan początkowy $\widehat{\rho}_S(t_0) \otimes \widehat{\rho}_R(t_0)$
- Ewolucję na $\mathcal{H}$ opisuje operator unitarny $\widehat{U}_{t,t_0}$

$$\widehat{\rho}(t) = \widehat{U}_{t,t_0}(\hat{\rho}_S(t_0) \otimes \hat{\rho}_R(t_0))\widehat{U}^*_{t,t_0}$$

Ewolucja układów otwartych

- Zredukowana dynamika układu złożonego: układ (S) + rezerwuar (R) na przestrzeni Hilberta
$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$$

- Produktowy stan początkowy $\widehat{\rho}_S(t_0) \otimes \widehat{\rho}_R(t_0)$
- Ewolucję na $\mathcal{H}$ opisuje operator unitarny $\widehat{U}_{t,t_0}$
$$\widehat{\rho}(t) = \widehat{U}_{t,t_0}(\hat{\rho}_S(t_0) \otimes \hat{\rho}_R(t_0))\widehat{U}^*_{t,t_0}$$

- Stany układu S podlegają zredukowanej dynamice
$$\widehat{\rho}_S(t) = \mathrm{Tr}_R(\widehat{\rho}(t)) = \mathrm{Tr}_R\left(\widehat{U}_{t,t_0}(\hat{\rho}_S(t_0) \otimes \hat{\rho}_R(t_0))\widehat{U}^*_{t,t_0}\right)$$

gdzie
$$\langle \phi_1 | \mathrm{Tr}_R \widehat{A} | \phi_2 \rangle = \sum_\alpha \langle \phi_1 | \otimes \langle \alpha | \widehat{A} | \alpha \rangle \otimes | \phi_2 \rangle$$

dla dowolnych stanów układu $|\phi_1\rangle$ oraz $|\phi_2\rangle$ i bazy $|\alpha\rangle$ w przestrzeni rezerwuaru $\mathcal{H}_R$

Ewolucja zredukowana

Ewolucja zredukowana

- Hamiltonian $H(t) = H_S(t) \otimes \mathbb{1}_R + \mathbb{1}_S \otimes H_R(t) + \lambda H_I(t)$

Ewolucja zredukowana

- Hamiltonian $H(t) = H_S(t) \otimes \mathbb{1}_R + \mathbb{1}_S \otimes H_R(t) + \lambda H_I(t)$
- Ewolucja na $\mathcal{H}$

$$\rho(t) = U_{t,t_0} \rho(t_0) U_{t,t_0}^{\dagger}$$

Ewolucja zredukowana

- Hamiltonian $H(t) = H_S(t) \otimes \mathbb{1}_R + \mathbb{1}_S \otimes H_R(t) + \lambda H_I(t)$
- Ewolucja na $\mathcal{H}$

$$\rho(t) = U_{t,t_0} \rho(t_0) U^{\dagger}_{t,t_0}$$

- Kompletnie dodatnia ewolucja zredukowana zachowująca ślad

$$\rho_S(t) = \sum_{\alpha,\beta} W_{\alpha\beta}(t,t_0) \rho_S(t_0) W_{\alpha\beta}(t,t_0)^{\dagger} = V(t,t_0)\rho_S(t_0)$$

Ewolucja zredukowana

- Hamiltonian $H(t) = H_S(t) \otimes \mathbb{1}_R + \mathbb{1}_S \otimes H_R(t) + \lambda H_I(t)$
- Ewolucja na $\mathcal{H}$

$$\rho(t) = U_{t,t_0} \rho(t_0) U_{t,t_0}^\dagger$$

- Kompletnie dodatnia ewolucja zredukowana zachowująca ślad

$$\rho_S(t) = \sum_{\alpha,\beta} W_{\alpha\beta}(t,t_0) \rho_S(t_0) W_{\alpha\beta}(t,t_0)^\dagger = V(t,t_0)\rho_S(t_0)$$

- Rodzina $\{V(t,t_0)\}$ nie musi spełniać prawa składania

$$V(t',s)V(s,t) = V(t',t) \quad t' > s > t \geqslant 0$$

Ewolucja zredukowana

- Hamiltonian $H(t) = H_S(t) \otimes \mathbb{1}_R + \mathbb{1}_S \otimes H_R(t) + \lambda H_I(t)$
- Ewolucja na $\mathcal{H}$

$$\rho(t) = U_{t,t_0}\rho(t_0)U^\dagger_{t,t_0}$$

- Kompletnie dodatnia ewolucja zredukowana zachowująca ślad

$$\rho_S(t) = \sum_{\alpha,\beta} W_{\alpha\beta}(t,t_0)\rho_S(t_0)W_{\alpha\beta}(t,t_0)^\dagger = V(t,t_0)\rho_S(t_0)$$

- Rodzina $\{V(t,t_0)\}$ nie musi spełniać prawa składania

$$V(t',s)V(s,t) = V(t',t) \quad t' > s > t \geqslant 0$$

- Jeśli spełnia prawo składania, to tworzy niejednorodną półgrupę dynamiczną, której generator $\mathcal{L}(t)$ spełnia relacje

$$V(t,t_0) = T\exp\left[\int_{t_0}^{t} \mathcal{L}(s)ds\right] \longrightarrow \dot{V}(t,t_0) = \mathcal{L}(t)V(t,t_0)$$

Kwantowa półgrupa dynamiczna

Kwantowa półgrupa dynamiczna

- Jeśli Hamiltonian nie zależy od czasu i ustalimy $t_0 = 0$, to $\{V(t)\}_{t \geqslant 0}$ jest rodziną kompletnie dodatnich zachowujących ślad przekształceń dynamicznych, które jednak nie muszą tworzyć półgrupy.

Kwantowa półgrupa dynamiczna

- Jeśli Hamiltonian nie zależy od czasu i ustalimy $t_0 = 0$, to $\{V(t)\}_{t \geqslant 0}$ jest rodziną kompletnie dodatnich zachowujących ślad przekształceń dynamicznych, które jednak nie muszą tworzyć półgrupy.
- Jeśli $\{V(t)\}_{t \geqslant 0}$ spełniają prawo składania

$$V(t)V(s) = V(t+s) \quad t, s \geqslant 0\,,$$

to generatorem (jednorodnej) półgrupy nazywamy operator $\mathcal{L}$, taki że $V(t) = \exp(\mathcal{L}t)$.

Kwantowa półgrupa dynamiczna

- Jeśli Hamiltonian nie zależy od czasu i ustalimy $t_0 = 0$, to $\{V(t)\}_{t\geqslant 0}$ jest rodziną kompletnie dodatnich zachowujących ślad przekształceń dynamicznych, które jednak nie muszą tworzyć półgrupy.
- Jeśli $\{V(t)\}_{t\geqslant 0}$ spełniają prawo składania

$$V(t)V(s) = V(t+s) \quad t, s \geqslant 0\,,$$

to generatorem (jednorodnej) półgrupy nazywamy operator $\mathcal{L}$, taki że $V(t) = \exp(\mathcal{L}t)$.

- $\widehat{\rho}_S(t)$ spełnia (zamiast równania von Neumanna) równanie różniczkowe

$$i\hbar \frac{d}{dt}\hat{\rho}_S(t) \;=\; \mathcal{L}(\hat{\rho}_S(t))$$

z generatorem Lindblada-Kossakowskiego ($\hbar = 1$)

$$L(\hat{\rho}_S) = -i[H, \hat{\rho}_S] + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij}\left([F_i\hat{\rho}_S, F_j^*] + [F_i, \hat{\rho}_S F_j^*]\right)$$

Entropia von Neumanna i entropia względna

Entropia von Neumanna i entropia względna

- Entropia von Neumanna

$$S(\rho) = \begin{cases} -k\mathrm{Tr}(\rho \ln \rho) & \\ +\infty & \rho \ln \rho \text{ nie jest klasy śladowej} \end{cases}$$

Entropia von Neumanna i entropia względna

- Entropia von Neumanna

$$S(\rho) = \begin{cases} -k\mathrm{Tr}(\rho \ln \rho) & \\ +\infty & \rho \ln \rho \text{ nie jest klasy śladowej} \end{cases}$$

- Entropia względna

$$S(\rho|\sigma) = \begin{cases} k\mathrm{Tr}(\rho \ln \rho) - k\mathrm{Tr}(\rho \ln \sigma) & \\ +\infty & \mathrm{Ker}\,\sigma \cap \mathrm{Supp}\,\rho \neq \emptyset \end{cases}$$

gdzie $\mathrm{Ker}\,\sigma = \{x \, : \, \sigma x = 0\}$ oraz $\mathrm{Supp}\rho = \{x \, : \, \rho x = \lambda x \, , \, \lambda \neq 0\}$

Własności entropii

Własności entropii

- Nierówność Kleina $S(\rho|\sigma) \geqslant 0$

Własności entropii

- Nierówność Kleina $S(\rho|\sigma) \geqslant 0$
- Dla $\dim\mathcal{H} = N$ $0 \leqslant S(\rho) \leqslant k \ln N$

Własności entropii

- Nierówność Kleina $S(\rho|\sigma) \geqslant 0$
- Dla $\dim\mathcal{H} = N \;\; 0 \leqslant S(\rho) \leqslant k \ln N$
- Subaddytywność ze względu na podukłady: $S(\rho_{AB}) \leqslant S(\rho_A) + S(\rho_B)$

Własności entropii

- Nierówność Kleina $S(\rho|\sigma) \geqslant 0$
- Dla $\dim\mathcal{H} = N \;\; 0 \leqslant S(\rho) \leqslant k \ln N$
- Subaddytywność ze względu na podukłady: $S(\rho_{AB}) \leqslant S(\rho_A) + S(\rho_B)$
- Wklęsłość entropii: $S(\alpha\rho_1 + (1-\alpha)\rho_2) \geqslant \alpha S(\rho_1) + (1-\alpha)S(\rho_2)$

Własności entropii

- Nierówność Kleina $S(\rho|\sigma) \geqslant 0$
- Dla $\dim\mathcal{H} = N$ $0 \leqslant S(\rho) \leqslant k \ln N$
- Subaddytywność ze względu na podukłady: $S(\rho_{AB}) \leqslant S(\rho_A) + S(\rho_B)$
- Wklęsłość entropii: $S(\alpha\rho_1 + (1-\alpha)\rho_2) \geqslant \alpha S(\rho_1) + (1-\alpha) S(\rho_2)$
- Addytywność z uwagi na iloczyn tensorowy $S(\rho_1 \otimes \rho_2) = S(\rho_1) + S(\rho_2)$

Własności entropii

- Nierówność Kleina $S(\rho|\sigma) \geqslant 0$
- Dla $\dim\mathcal{H} = N$ $0 \leqslant S(\rho) \leqslant k \ln N$
- Subaddytywność ze względu na podukłady: $S(\rho_{AB}) \leqslant S(\rho_A) + S(\rho_B)$
- Wklęsłość entropii: $S(\alpha\rho_1 + (1-\alpha)\rho_2) \geqslant \alpha S(\rho_1) + (1-\alpha)S(\rho_2)$
- Addytywność z uwagi na iloczyn tensorowy $S(\rho_1 \otimes \rho_2) = S(\rho_1) + S(\rho_2)$
- $S(\rho_1 \otimes \sigma|\rho_2 \otimes \sigma) = S(\rho_1|\rho_2)$

Własności entropii

- Nierówność Kleina $S(\rho|\sigma) \geqslant 0$
- Dla $\dim\mathcal{H} = N$ $0 \leqslant S(\rho) \leqslant k \ln N$
- Subaddytywność ze względu na podukłady: $S(\rho_{AB}) \leqslant S(\rho_A) + S(\rho_B)$
- Wklęsłość entropii: $S(\alpha\rho_1 + (1-\alpha)\rho_2) \geqslant \alpha S(\rho_1) + (1-\alpha)S(\rho_2)$
- Addytywność z uwagi na iloczyn tensorowy $S(\rho_1 \otimes \rho_2) = S(\rho_1) + S(\rho_2)$
- $S(\rho_1 \otimes \sigma|\rho_2 \otimes \sigma) = S(\rho_1|\rho_2)$
- Unitarna niezmienniczość $S(U\rho U^\dagger|U\sigma U^\dagger) = S(\rho|\sigma)$

Nieodwracalność ewolucji

Nieodwracalność ewolucji

- Ewolucja entropii względnej

$$S(V(t)\rho|V(t)\sigma) \leqslant S(\rho|\sigma)$$

Nieodwracalność ewolucji

- Ewolucja entropii względnej

$$S(V(t)\rho|V(t)\sigma) \leqslant S(\rho|\sigma)$$

- Niech σ będzie stanem stacjonarnym dla $V(t)$, tzn. $V(t)\sigma = \sigma$

$$S(V(t)\rho|V(t)\sigma) = S(V(t)\rho|\sigma) \leqslant S(\rho|\sigma)$$

Nieodwracalność ewolucji

- Ewolucja entropii względnej

$$S(V(t)\rho|V(t)\sigma) \leqslant S(\rho|\sigma)$$

- Niech σ będzie stanem stacjonarnym dla $V(t)$, tzn. $V(t)\sigma = \sigma$

$$S(V(t)\rho|V(t)\sigma) = S(V(t)\rho|\sigma) \leqslant S(\rho|\sigma)$$

- Zmiana entropii

$$\Delta S = S(V(t)\rho) - S(\rho) = \Delta_p S - \Delta_e S$$

gdzie

$$\begin{aligned} \Delta_p S &= S(\rho|\sigma) - S(V(t)\rho|\sigma) \geqslant 0 \\ \Delta_e S &= k\mathrm{Tr}[(V(t)\rho - \rho)\ln\sigma] \end{aligned}$$

Bilans zmian entropii

Bilans zmian entropii

- Niech stanem stacjonarnym σ będzie stan Gibbsa

$$\sigma = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$$

Bilans zmian entropii

- Niech stanem stacjonarnym σ będzie stan Gibbsa

$$\sigma = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$$

- Szybkość produkcji entropii

$$\begin{aligned}
\Pi &= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta_p S}{\Delta t} = -\frac{d}{dt} S(V(t)\rho|\sigma) \\
&= -k\mathrm{Tr}[\mathcal{L}\rho \ln(V(t)\rho)] + k\mathrm{Tr}(\mathcal{L}\rho \ln \sigma)
\end{aligned}$$

Bilans zmian entropii

- Niech stanem stacjonarnym σ będzie stan Gibbsa

$$\sigma = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$$

- Szybkość produkcji entropii

$$\begin{aligned} \Pi &= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta_p S}{\Delta t} = -\frac{d}{dt} S(V(t)\rho|\sigma) \\ &= -k\mathrm{Tr}[\mathcal{L}\rho \ln(V(t)\rho)] + k\mathrm{Tr}(\mathcal{L}\rho \ln \sigma) \end{aligned}$$

- Strumień entropii

$$J = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta_e S}{\Delta t} = k\mathrm{Tr}(\mathcal{L}\rho \ln \sigma)$$

Bilans zmian entropii

- Niech stanem stacjonarnym σ będzie stan Gibbsa

$$\sigma = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$$

- Szybkość produkcji entropii

$$\begin{aligned} \Pi &= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta_p S}{\Delta t} = -\frac{d}{dt} S(V(t)\rho|\sigma) \\ &= -k\mathrm{Tr}[\mathcal{L}\rho \ln(V(t)\rho)] + k\mathrm{Tr}(\mathcal{L}\rho \ln \sigma) \end{aligned}$$

- Strumień entropii

$$J = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta_e S}{\Delta t} = k\mathrm{Tr}(\mathcal{L}\rho \ln \sigma)$$

- Z $\Delta S = \Delta_p S - \Delta_e S$ wynika bilans entropii

$$\Pi = \frac{dS}{dt} + J$$

Stany równowagi

10. Makrostany kwantowe ze względu na obserwable $\widehat{A}_1, \ldots, \widehat{A}_r$

$$\mathcal{K}_{\hat{A}_1,\ldots,\hat{A}_r} = \left\{ \rho \in \mathcal{P} \, ; \, \langle \widehat{A}_i \rangle_{\hat{\rho}} = m_i \, , \, i = 1, \ldots, r \right\}$$

10. Makrostany kwantowe ze względu na obserwable $\widehat{A}_1, \dots, \widehat{A}_r$

$$\mathcal{K}_{\hat{A}_1,\dots,\hat{A}_r} = \left\{ \rho \in \mathcal{P} \; ; \; \langle \widehat{A}_i \rangle_{\hat{\rho}} = m_i \, , \; i = 1, \dots, r \right\}$$

11. Rozkład reprezentatywny makrostanu kwantowego $\mathcal{K}_{\hat{A}_1,\dots,\hat{A}_r}$

$$\widehat{\rho}^* = Z^{-1}(\lambda_1, \dots, \lambda_r) \exp\left[-\sum_{i=1}^{r} \lambda_i \widehat{A}_i \right]$$

gdzie $Z(\lambda_1, \dots, \lambda_r) = \mathrm{Tr} \exp\left[-\sum_{i=1}^{r} \lambda_i \widehat{A}_i \right]$

oraz $m_i = -\dfrac{\partial \ln Z}{\partial \lambda_i}$ przy $i = 1, \dots, r$.

Stany równowagi

Stany równowagi

Postulat

Stan równowagi układu kwantowego określamy jako rozkład reprezentatywny kwantowego makrostanu związanego z operatorem Hamiltona $\widehat{H}$ oraz operatorem liczby cząstek $\widehat{N}$, tzn.

$$\mathcal{K}_{\hat{H},\hat{N}} = \left\{ \rho \in \mathcal{P} \, ; \, \langle \widehat{H} \rangle_{\hat{\rho}} = U \, , \, \langle \widehat{N} \rangle_{\hat{\rho}} = \mathcal{N} \right\}$$

Stany równowagi

Postulat

Stan równowagi układu kwantowego określamy jako rozkład reprezentatywny kwantowego makrostanu związanego z operatorem Hamiltona $\widehat{H}$ oraz operatorem liczby cząstek $\widehat{N}$, tzn.

$$\mathcal{K}_{\hat{H},\hat{N}} = \left\{ \rho \in \mathcal{P} \; ; \; \langle \widehat{H} \rangle_{\hat{\rho}} = U \, , \; \langle \widehat{N} \rangle_{\hat{\rho}} = \mathcal{N} \right\}$$

Stan równowagi ma postać

$$\widehat{\rho}^* = \mathcal{Z}^{-1}(\beta,\mu) \exp \left[\beta(\mu \widehat{N} - \widehat{H}) \right]$$

gdzie

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\beta,\mu) &= \mathrm{Tr} \, \exp \left[\beta(\mu \widehat{N} - \widehat{H}) \right] \\ U - \mu \mathcal{N} &= -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta} \\ \beta \mathcal{N} &= \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \mu} \end{aligned}$$