

# Kapitel 9

## Teilsysteme: Dichtematrix, gemischte Zustände (Version 2023)

Wir haben bisher immer ein einzelnes Teilchen behandelt, mit Orts- und Spin- (bzw. Polarisations-) Eigenschaften. Wir haben aber oft nur eine dieser Eigenschaften diskutiert und die andere ignoriert. Dies ist u.a. dann so trennbar, wenn das Teilchen in einem sogenannten **Produktzustand** ist,

$$|\text{Gesamtzustand}\rangle = |\text{Zustand im Ortsraum}\rangle \otimes |\text{Zustand im Spinraum}\rangle.$$

Oft haben wir auch nur die x-Richtung betrachtet und dabei implizit vorausgesetzt, dass

$$|\psi\rangle = |\psi_x\rangle |\psi_y\rangle |\psi_z\rangle |\psi_{Spin}\rangle \Leftrightarrow \psi(\vec{x}, \sigma) = \psi_1(x) \psi_2(y) \psi_3(z) \psi_{Spin}(\sigma),$$

dass also der Zustand im Ortsraum selber ein Produktzustand ist, der in Anteile bezüglich der Koordinatenrichtungen  $x, y, z$  zerfällt. Ein quantenmechanischer Zustand enthält aber in der Regel eine nicht faktorisierbare Linearkombination von Produktzuständen und man kann dann z.B. Ort und Spin (bzw. Polarisation) nicht mehr ohne Weiteres getrennt behandeln. Ein solcher „verschränkter“ Zustand (s.a. Kap. 10) taucht etwa beim Stern-Gerlach Experiment auf: der Gesamtzustand besteht vor dem Schirm aus dem oberen Strahl mit „Spin-up“ und dem unteren Strahl mit „Spin-down“, etwa

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} ( |\text{oben}, \uparrow\rangle + |\text{unten}, \downarrow\rangle ).$$

Inwieweit kann man dann noch Ort und Spin getrennt behandeln? Allgemeiner muss man fragen, inwieweit man überhaupt ein Untersystem (z.B.

---

ein Teilchen) *getrennt vom Rest der Welt beschreiben* kann, obwohl es mit diesem quantenmechanisch wechselwirkt.

Als eng verwandt stellt sich die einfache Frage heraus, wie man einen unpolarisierten Strahl (etwa von Photonen) beschreiben könnte. Dies wäre ein Ensemble von Teilchen, dessen Polarisation nicht festgelegt (präpariert, „gemessen“) worden ist. Bei einer Messung der Polarisation an diesem Ensemble sollte man mit gleicher Wahrscheinlichkeit die Polarisation  $|e_x\rangle$  wie  $|e_y\rangle$  finden, bezüglich jeder beliebigen Basis  $|e_x\rangle, |e_y\rangle$  der Polarisationsrichtungen. Es liegt zunächst nahe, die Beschreibung mit einem Zustand wie z.B.

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} ( |e_x\rangle + |e_y\rangle )$$

zu versuchen. Diese Linearkombination beschreibt aber *keinen* unpolarisierten Strahl, sondern einen polarisierten Strahl mit einer anderen Richtung, hier etwa um 45 Grad gegenüber  $|e_x\rangle$  gedreht. Die bisher behandelten sogenannten „reinen“ Zustände, dargestellt durch einen Vektor  $|\psi\rangle$ , sind in der Tat ungeeignet, einen unpolarisierten Strahl zu beschreiben.

Eine weitere verwandte Frage ist bezieht sich auf den Zustand eines Gesamtsystems nach einer „unvollständigen“ Messung/Präparation, die nicht alle messbaren Eigenschaften des Gesamtsystems festgelegt hat.

Die Lösung dieser Fragen findet man mit Hilfe einer Erweiterung des *Formalismus* der Quantenmechanik (keine neue Physik!) auf sogenannte **gemischte Zustände**. Solche Zustände ergeben sich in der Regel, wenn man von einem Gesamtsystem<sup>1</sup> in einem reinen Zustand  $|\psi\rangle$  nur einen Teil der Freiheitsgrade (ein „Teilsystem“) untersucht und Messungen nur an den Freiheitsgraden des Teilsystems macht. Das Teilsystem ist dabei eine beliebige Untermenge an Freiheitsgraden, z.B. die getrennte Betrachtung von Spins und /oder eine Untermenge an Teilchen. Wie wir sehen werden, kann man dann die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten mit Hilfe der sogenannten „reduzierten Dichtematrix“ schreiben, welche nur Freiheitsgrade dieses Teilsystems enthält, statt des großen Gesamtsystems.

---

<sup>1</sup>z.B. das gesamte Universum (?)

## 9.1 Beispiele für Erwartungswerte in einem Teilsystem eines reinen Zustands

Wir betrachten zwei Beispiele. Zunächst ein Doppelspalt-Experiment mit Teilchen, die alle den Spin  $|\uparrow\rangle$  besitzen. Wir schreiben für den Zustand der einzeln auftreffenden Teilchen am Ort des Schirms

$$|\psi_{\uparrow}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\text{Spalt 1}, \uparrow\rangle + |\text{Spalt 2}, \uparrow\rangle \right) \quad (9.1)$$

$$\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\text{Spalt 1}\rangle + |\text{Spalt 2}\rangle \right) \otimes |\uparrow\rangle, \quad (9.2)$$

wobei „Spalt 1“ für den Anteil steht, der durch den oberen Spalt gegangen ist und wir  $|\text{Spalt 1}, \uparrow\rangle \equiv |\text{Spalt 1}\rangle \otimes |\uparrow\rangle$  benutzt haben. Dies ist ein **Produktzustand** aus Orts- und Spin-Freiheitsgraden. Wir berechnen die **Wahrscheinlichkeit**  $|\langle\psi_{\uparrow}|x\rangle|^2 = \langle\psi_{\uparrow}|x\rangle\langle x|\psi_{\uparrow}\rangle$ , das Teilchen an einem Ort  $x$  auf dem Schirm zu finden. Sie ist gleich dem Erwartungswert des Operators  $\hat{O}_x := |x\rangle\langle x|$ :

$$\begin{aligned} \langle\psi_{\uparrow}|\hat{O}_x|\psi_{\uparrow}\rangle &= \frac{1}{2} \langle\uparrow| \left( \langle\text{Spalt 1}| + \langle\text{Spalt 2}| \right) \hat{O}_x \left( |\text{Spalt 1}\rangle + |\text{Spalt 2}\rangle \right) |\uparrow\rangle \\ &= \frac{1}{2} \left( \langle\text{Spalt 1}| + \langle\text{Spalt 2}| \right) \hat{O}_x \left( |\text{Spalt 1}\rangle + |\text{Spalt 2}\rangle \right) \end{aligned}$$

wegen  $\langle\uparrow|\uparrow\rangle = 1$ . Im Ergebnis kommt der Spin nicht mehr vor. Wir erhalten für den Produktzustand  $|\psi_{\uparrow}\rangle$  dasselbe Ergebnis wie ohne Berücksichtigung des Spins, nämlich typischerweise quantenmechanische *Interferenz* zwischen den beiden Strahlen aufgrund der Terme  $\langle\text{Spalt 1}|\hat{O}_x|\text{Spalt 2}\rangle$  und  $\langle\text{Spalt 2}|\hat{O}_x|\text{Spalt 1}\rangle$ .

Als zweites Beispiel betrachten wir ein Gedankenexperiment, bei dem auf den Doppelspalt die beiden Strahlen eines Stern-Gerlach-Experiments auftreffen. Der Zustand am Schirm sei jetzt

$$|\psi_{\uparrow\downarrow}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\text{Spalt 1}, \uparrow\rangle + |\text{Spalt 2}, \downarrow\rangle \right). \quad (9.3)$$

Dies ist ein zwischen dem zu messenden Teilfreiheitsgrad „Ort“ und dem bei der Messung ignorierten Spin **verschränkter Zustand**, den man nicht

Dieses Beispiel taucht, mit anderen Namen, im Folgenden immer wieder auf!

## 9.2. Gesamtsystem: Dichtematrix für einen reinen Zustand

als Produktzustand  $|\psi_{\text{Ort}}\rangle \otimes |\psi_{\text{Spin}}\rangle$  schreiben kann. Die Auftreffwahrscheinlichkeit wird jetzt zu

$$\begin{aligned}\langle \psi_{\uparrow\downarrow} | \hat{O}_x | \psi_{\uparrow\downarrow} \rangle &= \frac{1}{2} \left( \langle \text{Spalt 1, } \uparrow | + \langle \text{Spalt 2, } \downarrow | \right) \hat{O}_x \left( | \text{Spalt 1, } \uparrow \rangle + | \text{Spalt 2, } \downarrow \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( \langle \text{Spalt 1} | \hat{O}_x | \text{Spalt 1} \rangle + \langle \text{Spalt 2} | \hat{O}_x | \text{Spalt 2} \rangle \right)\end{aligned}$$

wegen  $\langle \uparrow | \uparrow \rangle = 1$  und wegen  $\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0$ . Die gemischten Terme und damit die Interferenz sind bei diesem verschränkten Zustand verschwunden! Wir erhalten die Summe der beiden klassischen Einzelwahrscheinlichkeiten für Teilchen, die entweder durch den ersten oder durch den zweiten Spalt gehen. Dies liegt daran, dass die Teilchen an Spalt 1 (mit Spin  $|\uparrow\rangle$ ) mit denen an Spalt 2 (mit Spin  $|\downarrow\rangle$ ) wegen  $\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0$  nicht interferieren können.

Wir suchen somit einen Formalismus, der sowohl das Auftreten von Interferenz als auch von klassischen Wahrscheinlichkeiten effizient beschreibt, aber dabei idealerweise nur die Freiheitsgrade des gemessenen Teilsystems benutzt. Die obige Beispielrechnung werden wir in Kap. 9.4.4 noch einmal aufnehmen.

## 9.2 Gesamtsystem: Dichtematrix für einen reinen Zustand

Wir schauen uns zunächst Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeiten für das Gesamtsystem an, welches (wie immer) in einem Zustand  $|\psi\rangle$  aus dem Hilbertraum aller Zustände sein soll. Im Zusammenhang mit Dichtematrizen nennt man dies einen "reinen Zustand".

Der Erwartungswert eines beliebigen Operators  $\hat{A}$  ist, wie bekannt,  $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ . Dies kann man auch schreiben als

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \text{tr} \left( \underbrace{|\psi\rangle \langle \psi|}_{=: \hat{\rho}} \hat{A} \right) \equiv \text{tr} \left( \hat{\rho} \hat{A} \right), \quad (9.4)$$

wobei wir den

DICHTEOPERATOR (STATISTISCHER OPERATOR, DICHEMATRIX) FÜR  
EINEN REINEN ZUSTAND  $|\psi\rangle$

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (9.5)$$

eingeführt haben.

Die Wahrscheinlichkeit, bei Messung von  $\hat{A}$  den Eigenwert  $a_i$  zu finden, kann man ebenfalls mit  $\hat{\rho}$  formulieren:

$$W(a_i) = |\langle a_i|\psi\rangle|^2 = \langle a_i|\psi\rangle\langle\psi|a_i\rangle = \langle a_i|\hat{\rho}|a_i\rangle. \quad (9.6)$$

### 9.3 Teilsystem: reduzierte Dichtematrix, gemischter Zustand

Wir betrachten in Verallgemeinerung der obigen beiden Beispiele nun den Fall eines Gesamtsystems (z.B. das Universum) mit vielen Freiheitsgraden. Es soll aus einer „Umgebung“ mit den Freiheitsgraden (Quantenzahlen, Basisnummerierung)  $u^{(1)}, u^{(2)}, \dots$  und dem eigentlich interessierenden (Teil-)„System“ mit den Freiheitsgraden  $s^{(1)}, s^{(2)}, \dots$  bestehen. Um die Gleichungen besser lesbar zu machen, schreiben wir kurz  $u$  für  $\{u^{(1)}, u^{(2)}, \dots\}$  und  $s$  für  $\{s^{(1)}, s^{(2)}, \dots\}$ . Die Basisvektoren des Gesamtsystems sind dann die Vektoren  $|u, s\rangle \equiv |u\rangle|s\rangle$ . Das Gesamtsystem befinde sich weiterhin in einem „reinen“ Zustand, d.h. dass man es, wie vertraut, als Vektor schreiben kann:

$$|\psi\rangle = \sum_{u,s} c_{u,s} |u, s\rangle. \quad (9.7)$$

(Zur Notation siehe auch Kap. A.12.4 (‐Reine Zustände mit mehreren Freiheitsgraden‐). Die Rechnung umfasst auch den Fall, dass das ‐System‐ das Gesamtsystem ist.)

Wir betrachten nun einen Operator  $\hat{A}$ , der nur auf das ‐System‐ wirkt, d.h.

$$\hat{A}|u\rangle|s\rangle = |u\rangle\left(\hat{A}|s\rangle\right). \quad (9.8)$$

(Dies ist äquivalent dazu, dass  $\hat{A}$  die Tensorproduktform  $\hat{A} = \hat{\mathbb{1}}_u \otimes (\sum_{ss'} A_{ss'}|s\rangle\langle s'|)$  hat.)

### 9.3. Teilsystem: reduzierte Dichtematrix, gemischter Zustand

Wir berechnen den Erwartungswert von  $\hat{A}$  im Zustand  $|\psi\rangle$  und benutzen, dass  $\hat{A}$  nicht auf die Basisvektoren  $|u\rangle$  wirkt,  $\hat{A}|u\rangle|s\rangle = |u\rangle\hat{A}|s\rangle$  :

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &\stackrel{(9.4)}{=} \text{tr}_{u,s} \left( |\psi\rangle\langle\psi| \hat{A} \right) \\
 &= \sum_{u,s} \langle u,s| |\psi\rangle\langle\psi| \hat{A} |u,s\rangle \\
 &= \sum_s \langle s| \left( \sum_u \langle u| |\psi\rangle\langle\psi| |u\rangle \right) \hat{A} |s\rangle \\
 &= \text{tr}_s \left( \underbrace{\text{tr}_u ( |\psi\rangle\langle\psi| )}_{=: \hat{\rho}_s} \hat{A} \right) \\
 &= \text{tr}_s \left( \hat{\rho}_s \hat{A} \right)
 \end{aligned} \tag{9.9}$$

$$\tag{9.10}$$

Wir haben hiermit den Erwartungswert von  $\hat{A}$  in den Freiheitsgraden des Systems allein ausgedrückt, mit Hilfe der dort definierten

REDUZIERTEN DICHTEOPERATORS	
$\hat{\rho}_s = \text{tr}_u \hat{\rho} .$	(9.11)

Die Umgebung geht nur indirekt ein, mit Hilfe der Spur über die Umgebung.

Wir können die Rechnung alternativ auch zunächst ohne Spur durchführen, und dabei auch die explizite Form der Matrixelemente  $\rho_{s',s} = \langle s' | \hat{\rho}_s | s \rangle$  von  $\hat{\rho}_s$  erkennen:

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \sum_{s',u'} \sum_{s,u} c_{u',s'}^* c_{u,s} \langle u',s' | \hat{A} |u,s\rangle \\
 &= \sum_{s',u'} \sum_{s,u} c_{u',s'}^* c_{u,s} \langle s' | \hat{A} |s\rangle \underbrace{\langle u'|u\rangle}_{\delta_{u',u}} \\
 &= \sum_{s',s} \underbrace{\sum_u c_{u',s'}^* c_{u,s}}_{=: \rho_{s's}} \langle s' | \hat{A} |s\rangle = \text{tr}_s \left( \sum_{s's} \rho_{s's} |s\rangle\langle s' | \hat{A} \right)
 \end{aligned}$$

In der letzten Zeile haben wir zunächst Gl. (A.25),  $\langle s' | \hat{A} | s \rangle = \text{tr} ( |s\rangle\langle s' | \hat{A} )$  und dann die Linearität der Spurbildung benutzt.

Wenn man sich auf Operatoren  $\hat{A}$  beschränkt, die nur auf das „System“ wirken, braucht man somit zur Berechnung von Erwartungswerten (und Wahrscheinlichkeiten, s.u.) nicht den Gesamtzustand  $|\psi\rangle$  mit allen Freiheitsgraden  $u$  und  $s$ , sondern nur die Dichtematrix  $\rho_s$  in den Freiheitsgraden  $s$ . Die Umgebung  $u$  geht nur über die Summe  $\sum_u$  in Gl. (9.11) in die Dichtematrix und damit in den Erwartungswert von  $\hat{A}$  ein.

Wenn ein (Teil-)System über eine solche reduzierte Dichtematrix beschrieben wird, spricht man von einem **„gemischten Zustand“**.

Aus Gl. (9.5) folgt, dass der Dichteoperator  $\hat{\rho}_S$  hermitesch ist. Er besitzt daher eine Spektraldarstellung (= Darstellung in seiner Eigenbasis):

SPEKTRALDARSTELLUNG EINES DICHTEOPERATORS  $\hat{\rho}_S$

$$\hat{\rho}_S = \sum_{\nu} p_{\nu} |\varphi_{\nu}\rangle\langle\varphi_{\nu}| . \quad (9.12)$$

(s.a. S.274)

Durch Einsetzen und nochmaliges Benutzen von Gl. (A.25), jetzt in der Form  $\text{tr}(|\varphi_{\nu}\rangle\langle\varphi_{\nu}|\hat{A}) = \langle\varphi_{\nu}|\hat{A}|\varphi_{\nu}\rangle$ , erhält man

ERWARTUNGSWERT EINES OPERATORS  $\hat{A}$ , DER NUR AUF DAS  
„SYSTEM“ WIRKT

$$\langle\hat{A}\rangle = \text{tr}(\hat{\rho}_S \hat{A}) = \sum_{\nu} p_{\nu} \langle\varphi_{\nu}|\hat{A}|\varphi_{\nu}\rangle . \quad (9.13)$$

Aus dem Spezialfall  $\langle\hat{1}\rangle = 1$  folgt  $\text{tr} \hat{\rho}_S = 1$ , äquivalent zu  $\sum_{\nu} p_{\nu} = 1$  und  $p_{\nu} \geq 0$  (s.u.)

Wir können jetzt auch für einen gemischten Zustand die Wahrscheinlichkeit berechnen, bei Messung von  $\hat{A} = \sum_j a_j |a_j\rangle\langle a_j|$  den Messwert  $a_j$  zu finden: Zum einen gilt  $\langle\hat{A}\rangle = \sum_j a_j W(a_j)$ , zum anderen ist

$$\begin{aligned} \langle\hat{A}\rangle &= \sum_{\nu} p_{\nu} \langle\varphi_{\nu}|\sum_j a_j |a_j\rangle\langle a_j|\varphi_{\nu}\rangle \\ &= \sum_j a_j \sum_{\nu} p_{\nu} |\langle\varphi_{\nu}|a_j\rangle|^2 , \end{aligned}$$

Beweis zu  $p_{\nu} \geq 0$  : Betrachte  $A = |\text{phi\_nu}\rangle\langle\text{phi\_nu}|$ . Dann folgt aus (9.13):  $\langle A \rangle = p_{\nu}$ . Andererseits gilt kann man  $\langle A \rangle$  auch mit dem Gesamtzustand  $|\text{psi}\rangle$  berechnen:  $\langle A \rangle = \langle \text{psi} | A | \text{psi} \rangle = |\langle \text{psi} | \text{phi\_nu} \rangle|^2 \geq 0$ .

### 9.3. Teilsystem: reduzierte Dichtematrix, gemischter Zustand

woraus man die

WAHRSCHEINLICHKEIT FÜR DEN MESSWERT $a_j$ IM ZUSTAND $\hat{\rho}_s$
$W(a_j) = \langle a_j   \hat{\rho}_s   a_j \rangle \equiv \sum_{\nu} p_{\nu}  \langle a_j   \varphi_{\nu} \rangle ^2. \quad (9.14)$

ablesen kann.

Die  $p_{\nu}$  kann man somit als *Wahrscheinlichkeiten* interpretieren, den Zustand  $|\varphi_{\nu}\rangle$  bei Untersuchung des gemischten Zustands  $\hat{\rho}$  zu finden, und  $\hat{\rho}$  als ein *statistisches Gemisch*. Für die verschiedene Werte von  $\nu$  addieren sich die zugehörigen *Wahrscheinlichkeiten* statt Wahrscheinlichkeitsamplituden. Daher *interferieren* diese Teile mit verschiedenen Indizes  $\nu$  *nicht miteinander* (siehe auch 2. Beispiel in diesem Kapitel). Innerhalb der einzelnen  $|\varphi_{\nu}\rangle$  kann weiterhin quantenmechanische Interferenz auftreten.

#### 9.3.1 Unterscheidung reiner und gemischter Zustand

Ein Dichteoperator  $\rho$  gehört genau dann zu einem reinen Zustand, wenn er die Form  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  hat. Dagegen kann ein nicht-reiner Zustand nur als Linearkombination von *mehreren* Termen der Form (9.12) geschrieben werden.

Um zu entscheiden, ob ein gegebener Dichteoperator  $\hat{\rho}$  (z.B. als Matrix gegeben) ein reiner Zustand ist, gibt es mehrere Möglichkeiten. Eine notwendige und hinreichende Charakterisierung eines reinen Zustandes ist die Bedingung

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \quad (9.15)$$

Sie ist notwendig, da Gl. (9.5) das unmittelbar verlangt. Dass sie hinreichend ist, folgt über die Spektraldarstellung von  $\hat{\rho}$ . Ebenfalls notwendig und hinreichend ist die auf den ersten Blick schwächere Bedingung

$$\text{tr } \hat{\rho}^2 = 1. \quad (9.16)$$



### 9.3.2 Schrödingergleichung für einen gemischten Zustand

Aus der Zeitentwicklung des Zustandsvektors erhalten wir auch die Zeitentwicklung für einen gemischten Zustand. Wir beginnen mit dem statistischen Operator zu einem reinen Zustand  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$  und benutzen  $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ .

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} &= i\hbar \frac{d}{dt} (|\psi\rangle\langle\psi|) = \left( i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle \right) \langle\psi| + |\psi\rangle \left( i\hbar \frac{d}{dt} \langle\psi| \right) \\
 &= \left( i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle \right) \langle\psi| - |\psi\rangle \left( i\hbar \frac{d}{dt} \langle\psi| \right)^\dagger \\
 &= \hat{H} \left( |\psi\rangle \langle\psi| \right) - |\psi\rangle \left( \hat{H} |\psi\rangle \right)^\dagger \\
 &= \hat{H} \left( |\psi\rangle \langle\psi| \right) - \left( |\psi\rangle \langle\psi| \right) \hat{H} \\
 &= \hat{H} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H}^\dagger = \left[ \hat{H}, \hat{\rho} \right] .
 \end{aligned}$$

Der statistische Operator zu einem beliebigen gemischten Zustand ist eine Linearkombination der statistischen Operatoren von reinen Zuständen. Deswegen lautet auch die Schrödingergleichung für einen allgemeinen statistischen Operator (gemischten Zustand) ebenfalls

ZEITENTWICKLUNG EINES STATISTISCHEN OPERATORS  $\hat{\rho}$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \quad . \quad (9.17)$$

Oft wechselwirkt das System (fast) nicht mit der Umgebung, d.h.  $\hat{H} = \hat{H}_u \otimes \hat{\mathbb{1}}_s + \hat{\mathbb{1}}_u \otimes \hat{H}_s$ . Dann gilt für die reduzierte Dichtematrix analog zu Gl. (9.17)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_s(t) = [\hat{H}_s, \hat{\rho}_s(t)] \quad (9.18)$$

und man kann für Observable im System die Zeitentwicklung ganz auf das System beschränken.

## 9.4 Beispiele

### 9.4.1 Wärmebad

Ein System sei in Kontakt mit einem äußeren „Wärmebad“ bei einer festen Temperatur  $T$ . Oft kann man die Details der Wechselwirkungen mit dem Bad vernachlässigen, bis auf den Effekt der Temperatur, die dafür sorgt, dass die Zustände des Systems abhängig von ihrer Energie  $E_i$  mit dem Boltzmanngewicht

$$p_i \propto \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \quad (9.19)$$

gewichtet werden. Dies kann man wieder als statistisches Gemisch interpretieren.

### 9.4.2 Unabhängiges System

Die besondere Situation, dass das „System“ und die „Umgebung“ voneinander völlig unabhängig sind, wird durch Gewichte  $\rho_{uu' ss'}$  beschrieben, die in Anteile des Systems und der Umgebung faktorisieren:

$$\rho_{uu' ss'} = \rho_{uu'} \rho_{ss'} . \quad (9.20)$$

Man kann sie getrennt normieren,  $\text{tr}_u \rho_{uu'} = \text{tr}_s \rho_{ss'} = 1$ . Dann gilt

$$\hat{\rho}_{us} = \hat{\rho}_u \hat{\rho}_s , \quad (9.21)$$

wobei die beiden Faktoren auch die reduzierten Dichtematrizen sind. Die Umgebung hat dann keinen Einfluss mehr auf die reduzierte Dichtematrix und damit auf Erwartungswerte im System (und umgekehrt) und kann völlig fortgelassen werden. Umgebung und System können jeweils einzeln gemischte oder reine Zustände sein. Ein Beispiel dazu besprechen wir in Kap. 9.4.6.

Eine solche Unabhängigkeit haben wir in den früheren Kapiteln implizit angenommen.

### 9.4.3 Produktzustand

Ein Spezialfall von unabhängigen Systemen ist die Situation, dass sich das Gesamtsystem in einem Produktzustand aus reinen Zuständen der Umgebung und des Systems befindet:

$$|\psi\rangle = |\psi_u\rangle |\psi_s\rangle. \quad (9.22)$$

Dann ist der reduzierte Dichteoperator einfach

$$\hat{\rho}_s = \text{tr}_u \left( |\psi_u\rangle |\psi_s\rangle \langle \psi_s| \langle \psi_u| \right) = \langle \psi_u | \psi_u \rangle |\psi_s\rangle \langle \psi_s| = |\psi_s\rangle \langle \psi_s|, \quad (9.23)$$

$|\psi_u\rangle$  normiert angenommen

d.h. das „System“ ist wieder unabhängig, und sogar in einem reinen Zustand.

### 9.4.4 Verschränkter Zustand

Wir behandeln noch einmal ein Beispiel wie in Kap. 9.1, diesmal mit dem Formalismus der reduzierten Dichtematrix.

Das Gesamtsystem sei in einem reinen, aber zwischen Umgebung und System verschränkten Zustand, etwa

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |1_u, 0_s\rangle + |0_u, 1_s\rangle \right). \quad (9.24)$$

Derselbe Zustand wie auf Seite 249 unten, mit anderen Namen.

Dann lautet der Dichteoperator

$$\hat{\rho}_{us} = |\psi\rangle \langle \psi| = \frac{1}{2} \left( |1_u, 0_s\rangle + |0_u, 1_s\rangle \right) \left( \langle 1_u, 0_s| + \langle 0_u, 1_s| \right)$$

und der reduzierte Dichteoperator für das System ist wegen  $\langle u|u'\rangle = \delta_{uu'}$

$$\hat{\rho}_s = \text{tr}_u \hat{\rho}_{us} = \sum_{u=0_u, 1_u} \langle u| \hat{\rho} |u\rangle = \frac{1}{2} \left( |0_s\rangle \langle 0_s| + |1_s\rangle \langle 1_s| \right), \quad (9.25)$$

(die Koeffizienten sind spezifisch für dieses Beispiel)

= Spektraldarstellung !

=> Erwartungswerte wie S.250. (Rechnung s.u.)

oder in Matrixform

$$\rho_s = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

diagonal in diesem Beispiel (9.24)  
(die reduzierte Dichtematrix ist i.a. nicht diagonal)

Obwohl das Gesamtsystem in einem reinen Zustand ist, finden wir somit einen *gemischten* Zustand (wegen  $\rho^2 = \frac{1}{2}\rho \neq \rho$ ) mit einem statistischen Gemisch ohne Interferenzterme, wenn wir uns auf das Teilsystem beschränken !

Gleichung (9.25) ist schon die Spektraldarstellung (9.14) von  $\rho_s$ , mit den Eigenwerten  $p_1 = p_2 = 1/2$  und den Eigenzuständen  $|\phi_1\rangle = |0_s\rangle$  und  $|\phi_2\rangle = |1_s\rangle$ .

Aus Gl.(9.13) erhält man die Erwartungswerte eines Operators A:

$$\langle A \rangle = \text{tr}(\rho_s A) = \sum_{\nu} p_{\nu} \langle \phi_{\nu} | A | \phi_{\nu} \rangle = \frac{1}{2} (\langle 0_s | A | 0_s \rangle + \langle 1_s | A | 1_s \rangle)$$

Dies ist auch genau das direkt aus dem Gesamtzustand berechnete Ergebnis von S.250 (mit anderen Namen).

## 9.4. Beispiele

### 9.4.5 Unpolarisierter Strahl

Das vorige Beispiel führt uns auch zur Beschreibung eines unpolarisierten Strahls. Aus einem zunächst mit weiteren Freiheitsgraden verschränkten Gesamtzustand kann für das Teilsystem "Polarisation" der Zustand

Erläuterung  
unten auf der Seite

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} |e_x\rangle\langle e_x| + \frac{1}{2} |e_y\rangle\langle e_y|. \quad (9.26)$$

entstehen. Die Wahrscheinlichkeiten (9.14)  $W(x) = \langle e_x | \hat{\rho} | e_x \rangle = \frac{1}{2}$  und  $W(y) = \langle e_y | \hat{\rho} | e_y \rangle = \frac{1}{2}$  sind dann in der Tat gleich.

In Gl. (9.26) erkennt man, dass der Dichteoperator  $\hat{\rho}$  für das unpolarisierte Ensemble einfach der (passend normierte) Einheitsoperator ist! Daher kann man ihn auch in jeder anderen Basis schreiben:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \hat{\mathbb{1}} = \frac{1}{2} |e_{x'}\rangle\langle e_{x'}| + \frac{1}{2} |e_{y'}\rangle\langle e_{y'}|. \quad (9.27)$$

Die Polarisation in diesem gemischten Zustand ist deshalb auch bezüglich jeder anderen Basis Null.

### 9.4.6 Unvollständige Präparation

(Beispiel zu Kap. 9.4.2)

Von den vielen Freiheitsgraden eines quantenmechanischen Systems werden durch eine typische Präparation nur einige festgelegt (z.B. der Ort beim Durchgang durch einen Doppelspalt), andere aber nicht (z.B. die Polarisation des Strahls durch den Doppelspalt). Wie kann man einen Strahl beschreiben, der durch Spalt 1 gegangen und nicht polarisiert ist?

Dazu müssen wir wie in Abschnitt 9.4.5 über die Polarisationsrichtungen summieren. Der unpolarisierte Strahl durch Spalt 1 ist daher ein gemischter Zustand mit der Dichtematrix

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \sum_i |e_i, s_1\rangle\langle e_i, s_1| = \frac{1}{2} \left( \sum_i |e_i\rangle\langle e_i| \right) \otimes |s_1\rangle\langle s_1| \quad (9.28)$$

Er zerfällt in einen Anteil im Raum der Polarisierungen (gemischt) und einen Anteil im Ortsraum (Spalte, rein). Wenn man nur den Ortsraum betrachtet und die Polarisierungen nicht misst, kann man diesen Zustand als reinen Zustand  $|\psi_s\rangle = |s_1\rangle$  beschreiben. Gleiches gilt für eine Linearkombination  $|\psi_s\rangle = c_1|s_1\rangle + c_2|s_2\rangle$ , solange Ort und Polarisation nicht verschränkt sind. Deswegen konnten wir bei der ursprüngliche Behandlung des Doppel-

**Herkunft eines unpolarisierten Strahls von Photonen:** Quelle der einzelnen Photonen ist jeweils ein angeregtes Atom.

**Nach Emission des Photons befindet sich das Atom wegen der Drehimpulserhaltung in einem Zustand, der mit der Polarisation des Photons korreliert ist.**

(Wir nehmen als Basis die Zustände  $|L\rangle$  und  $|R\rangle$  der zirkulären Polarisation. Dies sind Zustände mit verschiedenem Drehimpuls in Flugrichtung.

Die Zustände  $|e_x\rangle$  und  $|e_y\rangle$  sind Linearkombinationen von  $|L\rangle$  und  $|R\rangle$ )

Nach Emission gibt es für Atom und Photon zusammen die Basiszustände  $|Atom_R, Photon_L\rangle$  und  $|Atom_L, Photon_R\rangle$

**Der Zustand nach Emission ist eine Linearkombination dieser beiden Basiszustände, d.h. i.d.R. ein verschränkter Zustand.** Bei gleichen Koeffizienten ist dies

$|\psi\rangle = (1/\sqrt{2}) (|Atom_R, Photon_L\rangle + |Atom_L, Photon_R\rangle)$  Dies ist genau die Struktur von Gl.(9.24) und vom 2. Beispiel auf S.249.

Bei Messung nur des Teilsystems "Photon" sagt dann Gl.(9.25) (äquivalent zu 9.26) und äquivalent zur Rechnung auf S.250 oben),

dass beide Polarisierungen mit gleicher Wahrscheinlichkeit gemessen werden (und deswegen auch in jeder Basis, etwa  $|e_x\rangle$ ,  $|e_y\rangle$  mit gleicher Wahrscheinlichkeit.