Kapitel 4

Observable, Zustände und Unbestimmtheit

> *Entgegen allen rückschrittlichen Bemühungen ... bin ich gewiss, dass der statistische Charakter der Psi-Funktion und damit der Naturgesetze ... den Stil der Gesetze wenigstens für einige Jahrhunderte bestimmen wird ... Von einem Weg zurück zu träumen, zurück zum klassischen Stil von Newton-Maxwell ... scheint mir hoffnungslos, abwegig ...*
>
> W. Pauli 1952; Nobelpreis 1945

Wir wollen versuchen, die Bedeutung des Messprozess in der Quantenmechanik zu verstehen. Hier müssen wir zuerst zwischen zwei Klassen von Größen unterscheiden: den direkt beobachtbaren Größen und den mittelbaren Größen. Zur ersten Klasse gehören die messbaren Eigenwerte von hermiteschen Operatoren oder Wahrscheinlichkeiten, zur zweiten Klasse die Zustandsvektoren oder linearen hermiteschen Operatoren. Die folgenden Postulate der Quantenmechanik (Born, von Neumann) schaffen die Verbindung zwischen Experimenten und der Quantentheorie. Die meisten sind naheliegend und wir haben sie in unseren bisherigen Betrachtungen auch schon benutzt.

4.1 Die Postulate der Quantenmechanik

Nach dem anfänglichen Raten von Heisenberg und Schrödinger für Einzelfälle wurde der entscheidende Schritt zur „endgültigen Klärung“ der Interpretation der Quantenmechanik von Max Born in seiner Arbeit über die Quantenmechanik der Stoßvorgänge gemacht [40].

Einige dieser Postulate haben wir schon diskutiert. Andere sind naheliegend und wurden schon benutzt.

- *Der Messapparatur für eine Observable entspricht ein linearer s.a. Operator.*

  Dieses Postulat haben wir schon früher diskutiert. Es impliziert, dass im Prinzip für die interessierenden Größen eine Messapparatur stets realisierbar ist.

- *Einem reinen Zustand des Systems entspricht ein Strahl im Hilbertraum,*

  $$R_\psi = \{\lambda|\psi\rangle, \lambda \neq 0\}. \tag{4.1}$$

  Zwei Vektoren $|\psi\rangle$ und $\lambda|\psi\rangle$ mit $\lambda \neq 0$ beschreiben also denselben Zustand. Später werden wir noch allgemeinere Zustände, die *gemischten Zustände*, kennen lernen.

- *Eine Messung entspricht einer Wechselwirkung zwischen System und Apparatur.*

  Im Gegensatz zur klassischen Physik wird in der Regel eine Messung den Zustand ändern, so dass eine anschließende zweite Messung das System in einem anderen Zustand antreffen wird. Dies nennt man den *Kollaps der Wellenfunktion.* Verschiedene Messapparaturen, die verschiedenen Observablen entsprechen, ändern den Zustand auf verschiedene Weise. Es muss durchaus nicht dieselben Endresultate geben, wenn wir nicht vertauschbare Observablen in unterschiedlicher Reihenfolge messen.

- *Die möglichen Messergebnisse sind die Eigenwerte des der Observablen entsprechenden s.a. Operators A.*
  Die Apparatur sorgt für eine Spektralzerlegung des Zustandes $|\psi\rangle$ in Komponenten parallel zu den Eigenzuständen von A. Wird bei der Messung von A ein nichtentarteter Eigenwert a_n im diskreten Spektrum gemessen, so findet sich das System *nach der Messung* im Zustand

  $$P_n|\psi\rangle = \langle n|\psi\rangle\,|n\rangle, \qquad \langle n|n\rangle = 1. \tag{4.2}$$

  Bei Messungen im kontinuierlichen Spektrum muss man beachten, dass jede reale Messapparatur den Messwert nur bis auf eine endliche Breite festlegen kann. Man kann zum Beispiel nie einen scharfen Impuls messen. Dazu müsste man die Wellenfunktionen an allen Raumpunkten bestimmen. Der Ausgangszustand $|\psi\rangle$ wird durch die Messung von A in folgender Weise verändert: Findet man bei der Messung einen Wert in Δ, dann filtert die Messung die Komponente

  $$P_\Delta|\psi\rangle \in P_\Delta\mathcal{H} \tag{4.3}$$

  von $|\psi\rangle$ heraus.

- *Die Wahrscheinlichkeit dafür, für ein System im Zustand $|\psi\rangle$ für eine Observable $A = A^\dagger$ ein Messresultat im Intervall Δ zu finden, ist*

$$w_{A,\psi}(\Delta) = \langle\psi|P_\Delta|\psi\rangle = \sum_{a_n\in\Delta} |\alpha_n|^2 + \int_\Delta |\alpha(a)|^2,$$

worin gemäß (3.43) und (3.33) die Koeffizienten auf der rechten Seite gleich den Skalarpodukten der A-Eigenvektoren mit dem betrachteten Zustandsvektor sind,

$$\alpha_n = \langle n|\psi\rangle \quad \text{und} \quad \alpha(a) = \langle a|\psi\rangle, \qquad \langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

Insbesondere ist die Wahrscheinlichkeit, im Zustand $|\psi\rangle$ den (nicht-entarteten) diskreten Eigenwert a_n zu messen, gleich

$$w_{A,\psi}(a_n) = |\alpha_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2,$$

wobei α_n der Koeffizient von $|n\rangle$ in der Entwicklung von $|\psi\rangle$ nach den orthonormierten Eigenfunktionen von A ist. Mit dieser Interpretation der Entwicklungskoeffizienten $\{\alpha_n, \alpha(a)\}$ ergibt sich für den Erwartungswert der Observablen A im Zustand $|\psi\rangle$ der Wert,

$$\langle A\rangle_\psi = \sum a_n|\alpha_n|^2 + \int a\,|\alpha(a)|^2 = \langle\psi|A|\psi\rangle. \tag{4.4}$$

Ist $A = H$ die Energie, so nannte Born die Wahrscheinlichkeit $|\alpha_n|^2$ die Häufigkeit dafür, dass in einem Haufen gleicher, nicht gekoppelter Atome der Energiewert E_n vorkommt. Die Schwankung der Häufigkeiten bei mehrfacher Wiederholung des Experiments an identischen Systemen wird mit wachsender Anzahl Experimente kleiner. Im Folgenden wollen wir unter einer *Gesamtheit*, d.h. einem Haufen gleicher Systeme, eine so große Menge von Objekten verstehen, bei der es wegen der großen Anzahl nicht auf die genaue Zahl ankommt. Die Wahrscheinlichkeit einer Eigenschaft P im Zustand $|\psi\rangle$ bedeutet dann die Häufigkeit, mit der bei einer Messung mit Hilfe einer durch P symbolisierten 'ja-nein-Apparatur' (ein Projektor) der ja-Effekt an der durch $|\psi\rangle$ charakterisierten Gesamtheit auftritt. Nach dem letzten Postulat ist die Wahrscheinlichkeit einen Messwert in Δ zu finden, gleich Eins, falls $P_\Delta|\psi\rangle = |\psi\rangle$ ist.

Messen wir für A den Wert a_n (der nicht entartet sei), so kollabiert die Wellenfunktion nach der Messung in $|n\rangle$. Bei einer anschließenden zweiten Messung von A finden wir mit Sicherheit wieder den Wert a_n. Wegen $P_{(-\infty,\infty)} = \mathbb{1}$ ist die Wahrscheinlichkeit, irgendein Messresultat für A zu finden, gleich Eins.

Wir wenden die Postulate auf die Ortsmessung für ein Teilchen an. Wegen (3.46) ist die Wahrscheinlichkeit dafür, bei der Messung der Position ein Resultat in $\Delta \subset \mathbb{R}^d$ zu finden, gleich

$$w_{\hat{\boldsymbol{x}},\psi}(\Delta) = \langle\psi|P_\Delta|\psi\rangle = \int\limits_\Delta dx\,|\psi(\boldsymbol{x})|^2.$$

Dies ist ein uns wohlbekanntes Ergebnis.

Verträgliche Observable: Auf den Ausgangszustand $|\psi\rangle$ wenden wir zunächst A und dann B an. Die erste Messung möge den Eigenwert a_n liefern, die zweite den Eigenwert b_m. Seien P_{a_n} und P_{b_m} die zu a_n und b_m gehörenden Projektoren in den Spektralzerlegungen von A und B. Dann ist

$$|\psi\rangle \xrightarrow{A} P_{a_n}|\psi\rangle \xrightarrow{B} P_{b_m}P_{a_n}|\psi\rangle. \tag{4.5}$$

Wir bezeichnen A und B als verträglich, wenn sie sich bei einer Messung nicht stören, so dass es auf die Reihenfolge der Messung von A und B nicht ankommt. Das bedeutet insbesondere, dass in der Anordnung (4.5) eine nochmalige Messung von A mit Sicherheit wieder den Messwert a_n liefert. Der Endzustand ist also gleichzeitig Eigenzustand von A und B. Offensichtlich sind zwei Observablen verträglich, wenn sie vertauschen.

Ist a_n nicht entartet, dann ist $P_{a_n}|\psi\rangle \sim P_{b_m}P_{a_n}|\psi\rangle$. Findet man bei der Messung von A den Wert a_n, dann findet man bei der anschließenden Messung der mit A verträglichen Observablen B mit Sicherheit den Wert b_m. Ist aber a_n entartet, so ist $P_{a_n}\mathcal{H}$ mehrdimensional und enthält mehrere Eigenzustände von B mit im Allgemeinen verschiedenen Eigenwerten. Durch die nachfolgende Messung von B wird zumindest ein Teil der Unkenntnis aufgehoben. $P_{b_m}P_{a_n}\mathcal{H}$ ist bereits durch zwei Eigenwerte oder zwei Quantenzahlen charakterisiert. Die gemeinsamen Eigenräume $P_{b_m}P_{a_n}\mathcal{H}$ von A und B können immer noch mehrdimensional sein, und durch Messung von a_n und b_m ist der Systemzustand immer noch unbestimmt. Dann gibt es eine weitere mit A und B verträgliche Observable C, durch deren Messung $P_{b_m}P_{a_n}\mathcal{H}$ in $P_{c_p}P_{b_m}P_{a_n}\mathcal{H}$ kollabiert. Das Verfahren wird so lange fortgesetzt, bis ein vollständiger Satz von kommutierenden Observablen zu einer eindeutigen *Präparation eines Zustands* führt:

$$P_{a_m}P_{b_n}P_{c_p}\cdots\mathcal{H} = |a_m b_n c_p \dots\rangle.$$

Der Zustand ist dann durch die Spezifikation der Quantenzahlen eines vollständigen Satzes verträglicher Observablen bestimmt.

4.2 Allgemeine Unbestimmtheitsrelation

Es sei nun einer physikalischen Observablen A im Rahmen des Hilbertraum-Formalismus der Quantenmechanik ein selbstadjungierter Operator zugeordnet, den wir mit demselben Symbol A bezeichnen. Was meinen wir nun, wenn wir sagen, eine Observable A sei scharf? Offensichtlich ist eine Observable umso schärfer, je kleiner das Schwankungsquadrat $\langle(\Delta A)^2\rangle_\psi$ des zugehörigen Operators ist, wobei $\Delta A = A - \langle A\rangle_\psi \mathbb{1}$ die Abweichung des Operators von seinem Mittelwert $\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A|\psi\rangle$ bezeichnet. Insbesondere kann die Unschärfe oder Unbestimmtheit nur verschwinden, wenn

$$0 = \langle(\Delta A)^2\rangle_\psi \equiv \big\langle \Delta A\psi|\Delta A\psi\big\rangle \Longrightarrow A|\psi\rangle = \langle A\rangle_\psi|\psi\rangle \tag{4.6}$$

gilt, d.h. wenn $|\psi\rangle$ ein *Eigenvektor (eine Eigenfunktion)* des zugeordneten Operators ist.

Nun seien A und B zwei Observable[1]. Wir werden für das Produkt ihrer Schwankungsquadrate

$$\big\langle(\Delta A)^2\big\rangle_\psi \cdot \big\langle(\Delta B)^2\big\rangle_\psi$$

eine untere Schranke ableiten. Dazu führen wir den Hilfsoperator $Q = \Delta A + i\alpha\Delta B$ mit reellem α und seinem adjungierten Operator $Q^\dagger = \Delta A - i\alpha\Delta B$ ein. Natürlich muss

$$\|Q\psi\|^2 = \langle Q\psi|Q\psi\rangle = \langle\psi|Q^\dagger Q|\psi\rangle \geq 0$$

für alle α sein und das Gleichheitszeichen kann nur gelten, wenn $Q|\psi\rangle = 0$ ist. Nun ist

$$\langle Q^\dagger Q\rangle_\psi = \langle(\Delta A)^2\rangle_\psi + \alpha^2\langle(\Delta B)^2\rangle_\psi + i\alpha\langle[\Delta A, \Delta B]\rangle_\psi \equiv g(\alpha) \geq 0, \quad \forall\alpha\in\mathbb{R},$$

wobei der Erwartungswert des Kommutators der beiden symmetrischen Operatoren ΔA und ΔB imaginär ist. Verschwindet $\langle(\Delta B)^2\rangle_\psi$, so ist die Funktion $g(\alpha)$ nur dann für alle α nicht-negativ, wenn $\langle[\Delta A, \Delta B]\rangle_\psi = \langle[A, B]\rangle_\psi = 0$ ist. Falls $\langle(\Delta B)^2\rangle_\psi$ nicht verschwindet, so wird wegen $[\Delta A, \Delta B] = [A, B]$ das Minimum von $g(\alpha)$ für

$$\alpha_m = -\frac{i}{2}\frac{\langle[A, B]\rangle_\psi}{\langle(\Delta B)^2\rangle_\psi}$$

[1] Wir werden im Folgenden eine Observable und den ihr zugeordneten hermiteschen Operator nicht mehr unterscheiden.

angenommen, und es muss

$$g(\alpha_m) = \langle(\Delta A)^2\rangle_\psi + \frac{1}{4}\frac{\langle[A,B]\rangle_\psi^2}{\langle(\Delta B)^2\rangle_\psi} \geq 0$$

sein. Nach Multiplikation mit $\langle(\Delta B)^2\rangle$ ergibt sich die *allgemeine Unschärferelation*

$$\left\langle(\Delta A)^2\right\rangle_\psi \left\langle(\Delta B)^2\right\rangle_\psi \geq \left\langle \tfrac{i}{2}[A,B]\right\rangle_\psi^2 , \tag{4.7}$$

die auch gilt, wenn B scharf ist.

Angewandt auf den Ort und Impuls eines Teilchens finden wir die bekannten Ungleichungen

$$\left\langle(\Delta x^i)^2\right\rangle_\psi \left\langle(\Delta p_j)^2\right\rangle_\psi \geq \left\langle \tfrac{i}{2}[x^i,p_j]\right\rangle_\psi^2 = \frac{\hbar^2}{4}\delta^i_{\ j}. \tag{4.8}$$

Deshalb ist zum Beispiel das Produkt der Unschärfen bei der Messung von x und p_x immer größer oder gleich $\hbar/2$. Es gibt keinen Zustand, für welchen x und p_x gleichzeitig scharf sind. Solche Observable heißen *nichtverträgliche Observable* im strengen Sinn. Falls $[A,B]$ nicht ein Vielfaches der Identität ist kann es unter Umständen Zustände geben, für die $[A,B]|\psi\rangle = 0$ ist. In diesen speziellen Zuständen können dann A und B beide scharf sein, obwohl sie nicht vertauschen. Ist dies der Fall, dann heißen A und B *unverträgliche Observable* im weniger strengen Sinn. Die *Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelationen* (4.8) sind, wie wir früher gesehen haben, eine Konsequenz des Teilchen-Welle-Dualismus in der Quantenmechanik.

4.3 Reine und gemischte Zustände

Vektoren $|\psi\rangle$ im Hilbertraum $\mathcal{H}$ sind nicht allgemein genug, um die physikalisch möglichen Gesamtheiten zu charakterisieren. Nur wenn ein vollständiger Satz von kommutierenden Observablen gemessen wurde, ist der Zustand vollständig präpariert. In den meisten Situationen ist eine vollständige Präparation praktisch unmöglich und unnötig. Für makroskopische Körper mit etwa 10^{23} Atomen braucht man nicht die exakte Wellenfunktion zu kennen, um makroskopische Variablen wie Druck, Volumen, freie Energie oder Magnetisierung zu bestimmen. Aber auch für einfachere Systeme kann eine *unvollständige Präparation* gewollt sein. Man denke nur an die Streuung von *unpolarisierten* Elektronen. Steht nur ein unvollständiger Satz von Angaben über ein Quantensystem zur Verfügung, so müssen die bisher besprochenen Methoden durch statistische Verfahren ergänzt werden. Dies wird durch die sogenannte *Dichtematrix*, auch *statistischen Operator* oder *Gemisch* genannt, geleistet. Dichtematrizen sind von zentraler Bedeutung in der Quantenstatistik.

Hat man zwei Gesamtheiten $|1\rangle$ und $|2\rangle$, z.B. zwei Strahlen spinpolarisierter Elektronen, so kann man durch Mischen experimentell eine dritte Gesamtheit herstellen: Man nehme aus der ersten Gesamtheit N_1 und aus der zweiten N_2 Objekte und mische sie zu der neuen Gesamtheit aus $N = N_1 + N_2$ Objekten. Die Häufigkeit für eine ja-nein-Messung irgendeiner Observablen A, z.B. die Frage, ob der Spin in die z-Richtung zeigt, also die Häufigkeit, wie oft bei der Messung von A im Gemisch ein Wert im Intervall Δ liegt, ist dann

$$w_A(\Delta) = \frac{N_1}{N} w_{A,1}(\Delta) + \frac{N_2}{N} w_{A,2}(\Delta) = \lambda w_{A,1}(\Delta) + (1-\lambda) w_{A,2}(\Delta), \tag{4.9}$$

wobei $w_{A,i}(\Delta) = \langle i|P_\Delta|i\rangle$ die Häufigkeiten bei der Messung von A in den Gesamtheiten $|i\rangle$ sind. Da die N_i sehr große Zahlen sein sollen, kann λ praktisch alle Werte zwischen 0 und 1 annehmen. Gehören $|1\rangle$ und $|2\rangle$ zu verschiedenen Zuständen, dann hat die Wahrscheinlichkeitsfunktion $w_A(\Delta)$ nicht mehr die Form $\langle 3|P_\Delta|3\rangle$ mit einem reinen Zustand $|3\rangle$.

Wir schreiben nun die Erwartungswerte von Observablen in reinen Zuständen, $\langle\psi|A|\psi\rangle$, so um, dass das Symbol für die Gesamtheit linear auftritt, weil wir dann (4.9) leicht zusammenfassen können. Dies ist möglich mit Hilfe der *Spur eines Operators*[2]

$$\mathrm{Sp}\,(A) = \sum_n \langle n|A|n\rangle,$$

wobei die $|n\rangle$ ein vollständiges Orthonormalsystem, eine orthonormierte Basis, bilden. Bilden die $|m\rangle$ ein anderes derartiges System, so folgt mit Hilfe von $\mathbb{1} = |m\rangle\langle m|$

$$\mathrm{Sp}\,(A) = \sum_{n,m} \langle n|A|m\rangle\langle m|n\rangle = \sum_m \left(\sum_n \langle m|n\rangle\langle n|A|m\rangle\right) = \sum_m \langle m|A|m\rangle.$$

Die Spur ist also unabhängig vom gewählten Orthonormalsystem. Sei nun speziell $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ der Projektor auf den Zustand $|\psi\rangle$. Dann ist

$$\langle\psi|P_\Delta|\psi\rangle \;=\; \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|P_\Delta|\psi\rangle = \sum_n \langle n|P_\Delta|\psi\rangle\langle\psi|n\rangle = \sum_n \langle n|P_\Delta P_\psi|n\rangle = \mathrm{Sp}\,(P_\Delta P_\psi)$$

und damit ist die Wahrscheinlichkeit, bei der Messung von A im Zustand $|\psi\rangle$ einen Wert

[2]Wir wollen im Folgenden immer voraussetzen, dass diese Spuren endlich sind. Dies ist der Fall wenn A ein Spurklassen-Operator ist, d.h. wenn $\mathrm{Sp}\,|A| < \infty$ ist. Das Spektrum dieser Operatoren ist diskret.

in $\Delta \subset \mathbb{R}$ zu finden, gegeben durch

$$w_{A,\psi}(\Delta) = \mathrm{Sp}\,(P_\Delta P_\psi). \tag{4.10}$$

Entsprechend findet man für den Mittelwert von A

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \mathrm{Sp}\,(AP_\psi). \tag{4.11}$$

Ein reiner Zustand $|\psi\rangle$ kann also immer mit dem orthogonalen Projektor P_ψ identifiziert werden. Einem reinen Zustand entspricht also ein Strahl im Hilbertraum oder äquivalent ein eindimensionaler orthogonaler Projektor. Die Wahrscheinlichkeit, bei der Messung von A im Zustand P_ψ einen Wert in Δ zu finden, ist $\mathrm{Sp}\,(P_\Delta P_\psi)$, und der Erwartungswert von A im Zustand P_ψ ist $\mathrm{Sp}\,(AP_\psi)$.

Da nach Definition die Spurbildung eine lineare Operation ist, ist die Häufigkeit, bei der Messung von A im Gemisch einen Wert in Δ zu finden, gleich

$$w_A(\Delta) = \lambda\,\mathrm{Sp}\,(P_\Delta P_{\psi_1}) + (1-\lambda)\,\mathrm{Sp}\,(P_\Delta P_{\psi_2}) \equiv \mathrm{Sp}\,(P_\Delta \rho). \tag{4.12}$$

Der Erwartungswert von A im Gemisch ist

$$\langle A\rangle = \lambda\,\mathrm{Sp}\,(AP_{\psi_1}) + (1-\lambda)\,\mathrm{Sp}\,(AP_{\psi_2}) \equiv \mathrm{Sp}\,(A\rho). \tag{4.13}$$

Der unreine Zustand wird also durch den *statistischen Operator*

$$\rho = \lambda P_{\psi_1} + (1-\lambda)P_{\psi_2},$$

auch *Dichtematrix* genannt, beschrieben. Die Formeln (4.10,4.11) für reine Zustände sind identisch mit den entsprechenden Formeln (4.12,4.13) für Gemische bis auf die Tatsache, dass ρ im Allgemeinen kein Projektor ist.

Offensichtlich ist der statistische Operator ρ hermitesch, da die Projektoren P_{ψ_i} hermitesch sind und λ reell ist. Weiter ist ρ positiv

$$\langle\psi|\rho|\psi\rangle \geq 0, \qquad \forall\psi,$$

da die P_{ψ_i} positiv sind und λ sowie $(1-\lambda)$ nichtnegative Zahlen sind. Schlussendlich ist die Spur von ρ gleich

$$\mathrm{Sp}\,\rho = \lambda\,\mathrm{Sp}\,P_{\psi_1} + (1-\lambda)\,\mathrm{Sp}\,P_{\psi_2} = \lambda + (1-\lambda) = 1.$$

Für zwei beliebige positive hermitesche Operatoren ρ_1 und ρ_2 mit $\mathrm{Sp}\,\rho_i = 1$ ist der gemischte Operator $\rho = \lambda\rho_1 + (1-\lambda)\rho_2$ wieder positiv und hermitesch. Die Menge $\{\rho\}$ der Dichtematrizen bildet also eine *konvexe Menge*.

Umgekehrt kann ein positiv definiter hermitescher Operator ρ mit $\mathrm{Sp}\,\rho = 1$ nur nichtnegative diskrete Eigenwerte p_n haben und $\sum p_n = 1$. Sind $|n\rangle$ die orthonormierten Eigenfunktionen von ρ, dann ist

$$\rho = \sum_n p_n |n\rangle\langle n| \equiv \sum_n p_n P_n. \tag{4.14}$$

Also lässt sich ρ als Gemisch von reinen Zuständen mit Gewichten p_n schreiben. Das System befindet sich mit der Wahrscheinlichkeit p_n im reinen Zustand $|n\rangle$. $|n\rangle$ ist einer der denkbaren Zustände, in denen sich das System, über das wir nur unvollständig informiert sind, befinden könnte. Wenn sich das System in einem reinen Zustand befinden würde, dann wäre der Mittelwert von einer Observablen A gleich $\langle\psi|A|\psi\rangle = \mathrm{Sp}\,(P_\psi A)$. Die Unkenntnis über den genauen Zustand des Systems erzwingt eine zusätzliche statistische Mittelung

$$\langle A\rangle_\rho = \sum p_n \langle n|A|n\rangle = \sum p_n \mathrm{Sp}\,\big(P_n A\big) = \mathrm{Sp}\,\rho A. \tag{4.15}$$

Nun wollen wir noch die Frage beantworten, wann eine Dichtematrix ρ ein reiner Zustand ist, d.h. wann sie die größtmögliche Information enthält. Ein Zustand ist genau dann rein, wenn nur ein $p_n = 1$ ist und alle anderen $p_m, m \neq n$ verschwinden. Die reinen Zustände sind die Extremalpunkte der konvexen Menge von Gemischen. Wegen

$$\rho^2 = \sum_{n,m} p_n p_m P_n P_m = \sum_n p_n^2 P_n$$

und $p_n^2 < p_n$ für $p_n < 1$, gehört eine Dichtematrix genau dann zu einem reinen Zustand, wenn $\rho^2 = \rho$ ist. Wegen

$$\mathrm{Sp}\,\rho^2 = \sum p_n^2$$

ist die Summe auf der rechten Seite genau dann Eins, wenn *genau ein* $p_n = 1$ ist und die anderen verschwinden. Deshalb gilt auch

$$\mathrm{Sp}\,\rho^2 = \begin{cases} 1 & \text{falls } \rho = \rho^2 \text{ ein reiner Zustand ist} \\ < 1 & \text{falls } \rho \neq \rho^2 \text{ ein gemischter Zustand ist.} \end{cases}$$

4.3.1 Spinpolarisierte Elektronen

Wir wollen uns einmal überlegen, wie die allgemeinste Dichtematrix $\rho : \mathbb{C}^2 \longrightarrow \mathbb{C}^2$ aussieht. Eine Dichtematrix ist hermitesch und hat die Spur Eins. Da jede zweidimensionale hermitesche Matrix eine reelle Linearkombination der Identität und der *Pauli-Matrizen*

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{4.16}$$

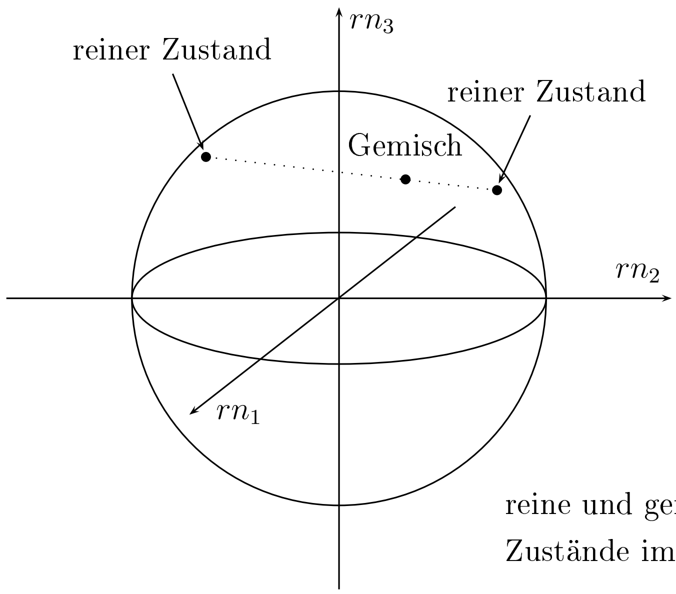
ist, hat sie die Entwicklung

$$\rho = \frac{1}{2}\big(\mathbb{1} + \boldsymbol{\xi\sigma}\big) \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\xi\sigma} = \xi_1\sigma_1 + \xi_2\sigma_2 + \xi_3\sigma_3 .$$

Die Eigenwerte einer zweidimensionalen hermiteschen Matrix mit positiver Spur sind genau dann positiv, wenn sie eine positive Determinante hat. Also ist ρ positiv für $4\det(\rho) = 1 - \boldsymbol{\xi}^2 \geq 0$. Die Dichtematrizen haben also die Form

$$\rho = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + r\boldsymbol{n\sigma}\right), \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{n}^2 = 1 \quad \text{und} \quad 0 \leq r \leq 1. \tag{4.17}$$

Die Zustände werden durch die Vektoren $r\boldsymbol{n}$ parametrisiert und können mit den Punkten der 3-dimensionalen Vollkugel mit Radius 1 identifiziert werden. Sie bilden eine konvexe Menge.



reine und gemischte Zustände im $\mathbb{C}^2$

Um die Reinheit von ρ zu testen, berechnen wir

$$\rho^2 = \frac{1}{4}\big((1+r^2)\mathbb{1} + 2r\boldsymbol{n\sigma}\big) = \tfrac{1}{4}(r^2-1)\,\mathbb{1} + \rho.$$

Also entsprechen den Punkten auf der Kugeloberfläche mir $r = 1$ reinen Zuständen. Im Gegensatz zu den reinen Zuständen kann ein Gemisch (im Allgemeinen auf viel Arten) in 2 reine Zustände zerlegt werden,

$$\begin{aligned}\rho\; &= \frac{1}{2}(\mathbb{1} + r\boldsymbol{n\sigma}) = \lambda\rho_1 + (1-\lambda)\rho_2, \quad \text{mit}\\ \rho_i &= \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{n}_i\boldsymbol{\sigma}) \quad \text{und} \quad r\boldsymbol{n} = \lambda\boldsymbol{n}_1 + (1-\lambda)\boldsymbol{n}_2.\end{aligned}$$

Es liege nun ein Gemisch von nicht-wechselwirkenden Elektronen vor, von dem wir nur die Mittelwerte der Spinkomponenten kennen,

$$\langle s_i\rangle_\rho \quad \text{mit} \quad s_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i.$$

Die s_i sind die den Spinkomponenten zugeordneten hermiteschen Operatoren. Wegen

$$\langle s_i\rangle_\rho = \mathrm{Sp}\,\rho s_i = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Sp}\,\sigma_i(\mathbb{1} + r\boldsymbol{n\sigma}) = \frac{\hbar}{2}rn_i$$

lautet dann die entsprechende Dichtematrix

$$\rho = \frac{1}{2} + \frac{1}{\hbar}\sum_i \langle s_i\rangle\sigma_i. \tag{4.18}$$

Es gibt *genau einen* unreinen Zustand für den alle drei Erwartungswerte $\langle s_i\rangle$ verschwinden. Ein Zustand ist genau dann rein, wenn gilt

$$\langle s_1\rangle^2 + \langle s_2\rangle^2 + \langle s_3\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4}.$$

Unschärferelation für gemischte Zustände: Die quadrierte Unschärfe einer Observablen A im Gemisch ρ ist

$$\langle(\Delta A)^2\rangle_\rho = \mathrm{Sp}\,\rho\big(A^2 - \langle A\rangle_\rho^2\big), \quad \text{mit} \quad \langle A\rangle_\rho = \mathrm{Sp}\,\rho A.$$

Wie für reine Zustände kann man nun die Unschärferelation für zwei Observable beweisen,

$$\langle(\Delta A)^2\rangle_\rho \cdot \langle(\Delta B)^2\rangle_\rho \ge \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle_\rho|^2. \tag{4.19}$$