Der Dichteoperator

Erinnerung Quantenmechanik:

- Quantenmechanische Zustände sind Vektoren in einem Hilbertraum, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Dieser ist (per Definition) mit einem Skalarprodukt $\langle .,. \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ versehen.
- Das Skalarprodukt kann geschrieben werden als die Anwendung eines „Bra"-Vektors* auf einen „Ket"-Vektor, $\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$.
- In jedem Hilbertraum existiert ein vollständiges Orthonormalsystem $\{|n\rangle\}$, also: $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ und $\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$.

  Jeder Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ kann als Linearkombination der Basisvektoren geschrieben werden,

  $$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad \text{mit} \quad c_n = \langle n|\psi\rangle .$$
- Ein Operator A ist eine Abbildung, die auf dem Hilbertraum arbeitet, $A : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$. Physikalische Observablen sind durch selbstadjungierte Operatoren $(A^\dagger = A)$ charakterisiert, deren Eigenwerte möglichen Ergebnissen einer Messung entsprechen.
- Es ist möglich, Operatoren und Zustände als Matrizen darzustellen.

Diesen wesentlichen Punkten sollen im Folgenden noch einige Begriffe hinzugefügt werden.

---

*: Mathematisch präzise ausgedrückt sind die Bra-Vektoren $\langle\psi|$ Elemente des zugehörigen Dualraumes $\mathcal{H}^*$ von $\mathcal{H}$.

Def. Sei A ein Operator auf einem Hilbertraum mit vollständiger Orthonormalbasis $\{|n\rangle\}$. Dann ist die <u>Spur</u> von A definiert als

$$\mathrm{tr}(A) := \sum_n \langle n|A|n\rangle .$$

In der Quantenstatistik beschränken wir uns ausschließlich auf Operatoren, für welche diese Summe existiert und unabhängig von der gewählten Basis ist (sogenannte „Spurklasseoperatoren").

In Matrix-Darstellung geht obige Definition in die bekannte Matrix-Spur über.

Bsp. Sei $\dim(\mathcal{H}) = 2$ und $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem.

Matrix-Darstellung: $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

$$\longrightarrow \mathrm{tr}(A) = \langle 1|A|1\rangle + \langle 2|A|2\rangle$$

$$= (1\ 0)\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + (0\ 1)\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= (1\ 0)\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix} + (0\ 1)\begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \end{pmatrix} = a_{11} + a_{22}$$

Übrigens ist auch die Normiertheit der Basis leicht zu sehen:

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}(1\ 0) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}(0\ 1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1} .$$

Die meisten Eigenschaften der Spur von Matrizen übertragen sich auf die Operator-Spur, z.B.

- Invarianz unter zyklischer Vertauschung,
$$\mathrm{tr}(ABC) = \mathrm{tr}(BCA) = \mathrm{tr}(CAB) \quad ;$$
- Linearität,
$$\mathrm{tr}(\alpha A + \beta B) = \alpha\,\mathrm{tr}(A) + \beta\,\mathrm{tr}(B) \quad , \qquad \alpha, \beta \in \mathbb{C} \; ;$$
- Verhalten bei Transposition (und komplexer Konjugation),
$$\mathrm{tr}(A^\dagger) = \mathrm{tr}(A)^* \; .$$

Aus der ersten Eigenschaft folgt insbesondere die Invarianz unter Ähnlichkeitstransformationen:
$$\mathrm{tr}(U^{-1} A U) = \mathrm{tr}(\underbrace{UU^{-1}}_{\mathbb{1}} A) = \mathrm{tr}(A).$$

Als kleine Übung sollen hier einige Eigenschaften gezeigt werden.

Basis-Unabhängigkeit:

Seien $\{|n\rangle\}$ und $\{|m\rangle\}$ zwei verschiedene Orthonormalbasen des selben Hilbertraums. A sei ein beliebiger Operator darauf.

$$\mathrm{tr}(A) = \sum_n \langle n|A|n\rangle = \sum_n \langle n|A\,\mathbb{1}\,|n\rangle \overset{\mathbb{1} = \sum_m |m\rangle\langle m|}{=} \sum_n \sum_m \langle n|A|m\rangle\langle m|n\rangle$$

$$\overset{\mathbb{1} = \sum_{m'} |m'\rangle\langle m'|}{=} \sum_{n,m,m'} \langle n|m'\rangle\langle m'|A|m\rangle\langle m|n\rangle = \sum_{m,m'} \langle m| \underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{\mathbb{1}} |m'\rangle\langle m'|A|m\rangle$$

$$\overset{\langle m|m'\rangle = \delta_{mm'}}{=} \sum_m \langle m|A|m\rangle \qquad \square$$

Symmetrie:

Es seien $\{|n\rangle\}$, $\{|m\rangle\}$ wie zuvor und A, B beliebige Operatoren auf dem Hilbertraum.

$$\mathrm{tr}\,(A\,B) = \sum_n \langle n|A \underset{\uparrow \mathbb{1}}{\,} B|n\rangle = \sum_{n,m} \langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle$$

$$= \sum_{n,m} \langle m|B|n\rangle\langle n|A|m\rangle = \sum_m \langle m|B \underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{\mathbb{1}} A|m\rangle$$

$$= \mathrm{tr}\,(B\,A)$$

$\square$

adjungierter Operator:

Es seien $\{|n\rangle\}$, A wie zuvor.

$$\mathrm{tr}\,(A^\dagger) = \sum_n \underbrace{\langle n|A^\dagger}_{(A|n\rangle)^\dagger}|n\rangle = \sum_n \left(|n\rangle^\dagger A\,|n\rangle\right)^\dagger = \sum_n \underbrace{\left(\langle n|A|n\rangle\right)^\dagger}_{\langle n|A|n\rangle^*}$$

$$= \mathrm{tr}\,(A)^*$$

$\square$

Übrigens besagt die letzte Eigenschaft, dass die Spur selbstadjungierter Operatoren (Observablen) reell ist:

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{tr}\,(A^\dagger) &= \mathrm{tr}\,(A)^* \\ \mathrm{tr}\,(A^\dagger) &= \mathrm{tr}\,(A) \end{aligned}\right\} \quad \mathrm{tr}\,(A) \in \mathbb{R}\,.$$

<u>Def.</u> Sei ϱ ein Operator auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$. Es heißt ϱ <u>Dichteoperator</u>, wenn

1. er hermitesch ist, $\varrho^\dagger = \varrho$;
2. er positiv semi-definit ist,
   $\langle\psi|\varrho|\psi\rangle \geq 0 \quad \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$;
3. er ein Spurklasseoperator mit $\mathrm{tr}(\varrho) = 1$ ist.

Wozu braucht man den Dichteoperator? Wir betrachten ein System/Ensemble aus N Subsystemen.

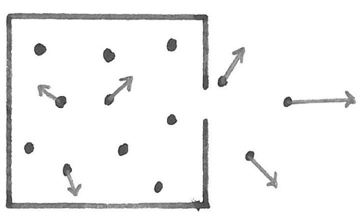
Subsystem 1	Subsystem 2		Subsystem N
Hilbertraum $\mathcal{H}_1$	Hilbertraum $\mathcal{H}_2$	....	Hilbertraum $\mathcal{H}_N$
Basis $\{|n_1\rangle\}$	Basis $\{|n_2\rangle\}$		Basis $\{|n_N\rangle\}$

Eine Möglichkeit, die Kopplung aller Subsysteme zu beschreiben, wäre die Bildung des Produktraumes,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N \,,$$

sofern genügend Observablen existieren, um Zustände in $\mathcal{H}$ präparieren zu können. Aber: Gerade das wird im Allgemeinen (insbesondere für große N) nicht möglich sein! Daher betrachten wir in der Quantenstatistik sogenannte schwach präparierte Systeme.

<u>Bsp.</u> Effusionszelle



Wir nehmen an, dass alle Subsysteme gleichbeschaffen sind (identische Hilberträume haben). Außerdem kümmern wir uns nicht mehr darum, welche Zustände von den einzelnen Subsystemen angenommen werden; wichtig sind nur die möglichen Makrozustände $|\psi_i\rangle$ des gesamten Ensembles und mit welcher Wahrscheinlichkeit p_i sie angenommen werden. Wir sprechen von einem <u>Gemisch</u> reiner Zustände.

Der Operator $P_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ projiziert auf den reinen Zustand $|\psi_i\rangle$. Damit wird der dem Ensemble zugeordnete Dichteoperator geschrieben als

$$\varrho = \sum_i p_i P_i \, .$$

Mit dessen Hilfe können die Erwartungswerte von Observablen sowie die Zeitentwicklung des Ensembles ausgedrückt werden:

$$\langle A \rangle = \mathrm{tr}(A\varrho) \, ,$$

$$i\hbar \dot{\varrho} = [H, \varrho] \, .$$

Damit enthält ϱ alle physikalisch relevanten Informationen und beschreibt das System vollständig.

Da in diesem Formalismus die reinen Zustände als Spezialfälle enthalten sind, handelt es sich um die allgemeinste Möglichkeit, ein System quantenmechanisch zu beschreiben.

Der Zusammenhang zur klassischen statistischen Mechanik ist der folgenden Tabelle zu entnehmen.

klassische Statistik		Quantenstatistik
Phasenraumfunktionen $f(\vec{q}, \vec{p})$	$\longleftrightarrow$	Observablen A
Phasenraumdichte $\varrho(\vec{q}, \vec{p})$	$\longleftrightarrow$	Dichteoperator ϱ
Poisson-Klammer $\{f, g\}$	$\longleftrightarrow$	Kommutator $\frac{1}{i\hbar}[A, B]$
Phasenraum-Integral $\int d^{3N}q \, d^{3N}p$	$\longleftrightarrow$	Spur $\mathrm{tr}(.)$

Bsp. Filter

Gegeben sei eine Apparatur, die den Eigenwert $l(l+1)$ des Quadrates das Bahndrehimpulsoperators eines Teilchens messen kann und die nur Teilchen mit $l=1$ passieren lässt. Die Quantenzahl $m_l = -1, 0, 1$ bleibt unbestimmt.

mögliche reine Zustände $|\psi_m\rangle = |l \, m_l\rangle$:

$$|\psi_1\rangle = |1\,1\rangle \, , \qquad |\psi_0\rangle = |1\,0\rangle \, , \qquad |\psi_{-1}\rangle = |1\,-1\rangle$$

Die drei Zustände seien gleich wahrscheinlich,

$$p_1 = p_0 = p_{-1} = \frac{1}{3} \, .$$

→ Dichteoperator:

$$\rho = \frac{1}{3}\left(|1\,1\rangle\langle 1\,1| + |1\,0\rangle\langle 1\,0| + |1\,-1\rangle\langle 1\,-1|\right)$$

→ Erwartungswert für die z-Komponente des Bahndrehimpulses $\left(L_z |l m_l\rangle = \hbar m_l |l m_l\rangle\right)$:

$$\langle L_z\rangle = \mathrm{tr}(L_z \rho) = \sum_{m=-1}^{1} \langle 1\,m| L_z \rho |1\,m\rangle$$

$$= \frac{1}{3}\sum_{m=-1}^{1} \langle 1\,m| \Big(\underbrace{L_z|1\,1\rangle}_{\hbar|1\,1\rangle}\langle 1\,1| + \underbrace{L_z|1\,0\rangle}_{0}\langle 1\,0| + \underbrace{L_z|1\,-1\rangle}_{-\hbar|1\,-1\rangle}\langle 1\,-1|\Big)|1\,m\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{3}\sum_{m=-1}^{1}\Big(\langle 1\,m|1\,1\rangle\underbrace{\langle 1\,1|1\,m\rangle}_{\delta_{1m}} - \langle 1\,m|1\,-1\rangle\underbrace{\langle 1\,-1|1\,m\rangle}_{\delta_{-1m}}\Big)$$

$$= \frac{\hbar}{3}\Big(\underbrace{\langle 1\,1|1\,1\rangle^2}_{1} - \underbrace{\langle 1\,-1|1\,-1\rangle^2}_{1}\Big) = \underline{\underline{0}}$$

Dieses Ergebnis war zu erwarten: Zustände, deren Projektion des Bahndrehimpulses auf die z-Achse Null beträgt, tragen nicht zu $\langle L_z\rangle$ bei, solche mit Projektionen ± 1 mitteln sich heraus, wenn sie gleich wahrscheinlich auftreten.

→ Es gilt (Vorlesung):

$$\mathrm{tr}(\rho^2) \begin{cases} = 1 & : \text{ reiner Zustand} \\ < 1 & : \text{ Gemisch} \end{cases}$$

Hier:

$$\rho^2 = \frac{1}{9}\Big(|1\,1\rangle\langle 1\,1|1\,1\rangle\langle 1\,1| + |1\,0\rangle\langle 1\,0|1\,0\rangle\langle 1\,0| + |1\,-1\rangle\langle 1\,-1|1\,-1\rangle\langle 1\,-1|\Big)$$

$$= \frac{1}{9}\left(|1\,1\rangle\langle 1\,1| + |1\,0\rangle\langle 1\,0| + |1\,-1\rangle\langle 1\,-1|\right) = \frac{1}{9}\mathbb{1}$$

$$\Rightarrow \mathrm{tr}(\rho^2) = \frac{1}{9}\,\mathrm{tr}(\mathbb{1}) = \underline{\underline{\frac{1}{3}}}\,, \quad \text{da } \dim(\mathcal{H}) = 3$$

Bsp. Polarisation von Elektronen

Wir betrachten Spin-Zustände $|s\, m_s\rangle$ mit $m_s = -s, \dots, s$. Für Elektronen ist $s = \frac{1}{2}$ und es bietet sich die Kurzschreibweise „up/down" an,

$$\left|\tfrac{1}{2}\, \tfrac{1}{2}\right\rangle \equiv |\uparrow\rangle \quad , \quad \left|\tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2}\right\rangle \equiv |\downarrow\rangle \, .$$

Es existiert eine 2-dimensionale Matrix-Darstellung des Spin-Operators $\vec{S}$, gegeben durch die Pauli-Matrizen:

$$S_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \, , \quad S_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \, , \quad S_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Diese Matrizen wirken offenbar auf 2er-Vektoren, also bietet sich als Darstellung der Zustände an:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

Betrachten wir ein Gemisch, in dem $\frac{1}{3}$ aller Spins in positive und $\frac{2}{3}$ aller Spins in negative z-Richtung ausgerichtet sind.

$\longrightarrow$ Dichtematrix:

$$\rho = \frac{1}{3}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{2}{3}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \frac{1}{3}(1\;0)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{2}{3}(0\;1)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{2}{3}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \underline{\underline{\frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}}}$$

$\mathrm{tr}(\rho) = 1$ ✓

$\mathrm{tr}(\rho^2) = \frac{5}{9}$ ✓

→ Erwartungswerte:

$$\langle S_x \rangle = tr(S_x \varrho) = \frac{1}{6} tr\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}\right] = \frac{1}{6} tr\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \underline{\underline{0}}$$

$$\langle S_y \rangle = tr(S_y \varrho) = \frac{1}{6} tr\left[\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}\right] = \frac{1}{6} tr\begin{pmatrix} 0 & -2i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \underline{\underline{0}}$$

$$\langle S_z \rangle = tr(S_z \varrho) = \frac{1}{6} tr\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}\right] = \frac{1}{6} tr\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} = \underline{\underline{-\frac{1}{6}}}$$

<u>Bem.</u> Per Definition ist ϱ hermitesch und hat Spur 1. Jede (2×2)-Matrix mit diesen Eigenschaften kann als Linearkombination der Pauli-Matrizen und der Einheitsmatrix geschrieben werden; letztere wird benötigt, weil die Pauli-Matrizen alle Spur Null haben.

Begründung: Eine Matrix $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ mit komplexen Einträgen verfügt über 8 reelle Freiheitsgrade. Die Bedingungen $b^* = c$ und $a+d = 1$ verringert diese auf 6. Das entspricht 3 komplexen Freiheitsgraden!