A.14 Herleitung der Dichtematrix (2021)

In Kap. 9.2 (S.250-252) wurden die Dichtematrix (9.5), Erwartungswerte von Operatoren (9.8) und Wahrscheinlichkeiten (9.7) ohne Herleitung angegeben. In diesem Anhang leiten wir diese Beziehungen direkt aus den vertrauten Postulaten der Quantenmechanik für reine Zustände $|\psi\rangle$ her.

Wir betrachten in Verallgemeinerung der Beispiele in Kap. 9.1 nun den Fall eines Gesamtsystems (z.B. das Universum) mit vielen Freiheitsgraden. Es soll aus einer „Umgebung" mit den Freiheitsgraden (Quantenzahlen) $u^{(1)}, u^{(2)}, \ldots$. und dem eigentlich interessierenden (Teil-)„System" mit den Freiheitsgraden $s^{(1)}, s^{(2)}, \ldots$ bestehen. Um die Gleichungen besser lesbar zu machen, schreiben wir kurz u für $\{u^{(1)}, u^{(2)}, \ldots\}$ und s für $\{s^{(1)}, s^{(2)}, \ldots\}$. Die Basisvektoren des Gesamtsystems sind dann die Vektoren $|u, s\rangle \equiv |u\rangle\,|s\rangle$. Das Gesamtsystem befinde sich in einem „reinen" Zustand, d.h. dass man ihn, wie vertraut, als Vektor schreiben kann:

$$|\psi\rangle = \sum_{u,s} c_{u,s}\,|u, s\rangle\ . \tag{A.210}$$

Wir betrachten nun einen **Operator** A**, der nur auf das „System" wirkt**, $A|u\rangle|s\rangle = |u\rangle\left(\hat{A}|s\rangle\right)$. Wir berechnen den Erwartungswert von $\hat{A}$ im Zustand $|\psi\rangle$ und benutzen, dass $\hat{A}$ nicht auf die Basisvektoren $|u\rangle$ wirkt:

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \sum_{s',u'}\sum_{s,u} c^*_{u',s'}\,c_{u,s}\ \langle u', s'|\,\hat{A}\,|u, s\rangle \\
&= \sum_{s',u'}\sum_{s,u} c^*_{u',s'}\,c_{u,s}\ \langle s'|\,\hat{A}\,|s\rangle\,\underbrace{\langle u'|u\rangle}_{\delta_{u',u}} \\
&= \sum_{s',s}\underbrace{\sum_{u} c^*_{u,s'}\,c_{u,s}}_{=:\,\rho_{s's}}\langle s'|\,\hat{A}\,|s\rangle \qquad \text{= Matrixelemente von tr_u Ipsi> <psil} \qquad (\text{A.211}) \\
&= \sum_{s',s}\rho_{s's}\ \langle s'|\,\hat{A}\,|s\rangle \qquad (\text{A.212}) \\
&= \mathrm{tr}\Big(\underbrace{\sum_{s's}\rho_{s's}\,|s\rangle\langle s'|}_{=:\,\hat{\rho}_S}\ \hat{A}\Big) \equiv \mathrm{tr}\,\left(\hat{\rho}_S\,\hat{A}\right). \qquad (\text{A.213})
\end{aligned}$$

Von der vorletzten zur letzten Zeile haben wir zunächst Gl. (A.25), $\langle s'|\hat{A}|s\rangle = \operatorname{tr}\left(|s\rangle\langle s'|\,\hat{A}\right)$ und dann die Linearität der Spurbildung benutzt.

In Gl. (A.212) haben wir den Erwartungswert von $\hat{A}$ in den Freiheitsgraden des Systems allein ausdrücken können, mit Hilfe der dort definierten **Dichtematrix** mit den Matrixelementen $\rho_{s's}$. In Gl. (A.213) haben wir den Erwartungswert mit Hilfe des **Dichteoperators** $\hat{\rho}_\mathrm{S}$ geschrieben, der nur im „System" wirkt, und dessen Darstellung in der Basis $|s\rangle$ die Matrixelemente $\rho_{s's}$ sind. **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 ρ in den Freiheitsgraden s.** Die Umgebung u geht nur über die Summe $\sum_u$ in Gl. (A.211) in die Dichtematrix und damit in den Erwartungswert von $\hat{A}$ ein. In Kap. 9.5 wird gezeigt, dass $\hat{\rho}_S = \operatorname{tr}_u \hat{\rho}_\text{gesamt}$, wobei hier $\hat{\rho}_\text{gesamt} = |\psi\rangle\langle\psi|$.

Aus Gl. (A.211) und Gl. (A.213) folgt, dass der Dichteoperator $\hat{\rho}_S$ hermitesch ist. Er besitzt daher eine Spektraldarstellung (= Darstellung in seiner Eigenbasis):

$$\hat{\rho}_S \;=\; \sum_\nu p_\nu\,|\varphi_\nu\rangle\langle\varphi_\nu| \quad . \tag{A.214}$$

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

$$\langle\hat{A}\rangle \;=\; \operatorname{tr}\left(\hat{\rho}_S\,\hat{A}\right) \;=\; \sum_\nu p_\nu\,\langle\varphi_\nu|\,\hat{A}\,|\varphi_\nu\rangle \quad . \tag{A.215}$$

Aus dem Spezialfall $\langle\hat{\mathbb{1}}\rangle = 1$ folgt $\operatorname{tr}\hat{\rho} = 1$, äquivalent zu $\sum_\nu p_\nu = 1$. Damit haben wir die Beziehungen (9.5), (9.8), und (9.9) gezeigt.

Zur Umformung der Wahrscheinlichkeit $W(a_j) = |\langle\psi|a_j\rangle|^2$, den Messwert a_j bei Messung eines Operators $\hat{A} = \sum_i a_i|a_i\rangle\langle a_i|$ zu erhalten, betrachten wir den Operator $\hat{A}_j := a_j|a_j\rangle\langle a_j|$, ohne Summation. Sein Erwartungswert in $|\psi\rangle$ ist zum einen gleich $a_j\,W(a_j)$ und zum anderen gemäß Gl. (A.215)

$$\langle\hat{A}_j\rangle \;=\; \sum_\nu p_\nu\,\langle\varphi_\nu|\hat{A}_j|\varphi_\nu\rangle \;=\; \sum_\nu p_\nu\,\langle\varphi_\nu|\Big(a_j|a_j\rangle\langle a_j|\Big)|\varphi_\nu\rangle \;=\; a_j\sum_\nu p_\nu\,|\langle\varphi_\nu|a_j\rangle|^2\,.$$

Somit folgt schließlich (9.7): $W(a_j) = \sum_\nu p_\nu|\langle\varphi_\nu|a_j\rangle|^2$ (= (s.S. 251) = $\langle a_j|\hat{\rho}_S|a_j\rangle$), lesbar als Summe der Resultate für die reinen Zustände $|\varphi_\nu\rangle$, mit Wahrscheinlichkeiten p_ν (s.S. 251).