

## Zusammenfassung der 4. Vorlesung (03.05.2010)

2.2 *Lokale Observablen, partielle Spur und Purifikation* : Messgrößen von einzelnen Teilsystemen oder Teilen eines zusammengesetzten Systems sind Observablen des Gesamtsystems. Ist  $H_i = H_i^+$  der Operator einer Observablen eines Teilsystems, dann ist der Operator der zugehörigen Observablen des Gesamtsystems

$$\mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}_{i-1} \otimes H_i \otimes \mathbf{1}_{i+1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}_N,$$

dessen Wirkung allgemein durch

$$\Psi(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N) \longmapsto \Psi(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{i-1}, H_i^+ \varphi_i, \varphi_{i+1}, \dots, \varphi_N)$$

definiert und speziell durch

$$\psi_1 \otimes \psi_2 \otimes \cdots \otimes \psi_N \longmapsto \psi_1 \otimes \psi_2 \otimes \cdots \otimes \psi_{i-1} \otimes H_i \psi_i \otimes \psi_{i+1} \otimes \cdots \otimes \psi_N$$

gegeben ist. Offenbar vertauschen die Observablen voneinander verschiedener Teilsysteme stets und sind deshalb kommensurabel. In der Quanteninformatiktheorie nennt man die Observablen von Teilsystemen auch lokale Observablen, weil sich Teilsysteme an verschiedenen Orten befinden können. Als Grundannahme scheint die Kommutabilität der Observablen voneinander verschiedener Teilsysteme deshalb gerechtfertigt zu sein, obwohl bei verschränkten Zuständen lokale Messungen an einem Ort Auswirkungen an einem anderen Ort haben können.

Ist  $\rho$  ein Dichteoperator des Gesamtsystems, dann ist durch

$$H_i \longmapsto \text{tr}(\rho \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}_{i-1} \otimes H_i \otimes \mathbf{1}_{i+1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}_N)$$

ein positives lineares Funktional mit  $\mathbf{1}_i \mapsto 1$  auf den beschränkten linearen Operatoren auf  $\mathcal{H}_i$  definiert, dass durch genau einen Dichteoperator  $\rho_i$  auf  $\mathcal{H}_i$  dargestellt werden kann

$$\text{tr}(\rho_i H_i) = \text{tr}(\rho \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}_{i-1} \otimes H_i \otimes \mathbf{1}_{i+1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}_N).$$

$\rho_i$  heißt der reduzierte Dichteoperator oder auch die partielle Spur von  $\rho$ . Um die Schreibweise zu vereinfachen schreiben wir im Folgenden

$$\mathcal{H}_a := \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_{i-1}, \quad \mathcal{H}_b := \mathcal{H}_{i+1} \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_N$$

Sind  $\{\Phi_k\}_{k=0,1,\dots,(M_a-1)}$  und  $\{\Psi_l\}_{l=0,1,\dots,(M_b-1)}$  Orthonormalbasen in  $\mathcal{H}_a$  beziehungsweise  $\mathcal{H}_b$  sowie  $\{\varphi_j\}_{j=0,1,\dots,(M_i-1)}$  eine Orthonormalbasis in  $\mathcal{H}_i$ , dann ist die partielle Spur von  $\rho$

$$\rho_i = \text{tr}_{ab}\rho = \sum_{j,j'=0}^{M_i-1} |\varphi_j\rangle \left( \sum_{k=0}^{M_a-1} \sum_{l=0}^{M_b-1} \langle \Phi_k \otimes \varphi_j \otimes \Psi_l, \rho \Phi_k \otimes \varphi_{j'} \otimes \Psi_l \rangle \right) \langle \varphi_{j'}|.$$

Die partielle Spur ist natürlich unabhängig von den Orthonormalbasen, mit denen sie gebildet wird. Die partielle Spur eines reinen Zustands des Gesamtsystems,

$$\Omega = \sum_{k=0}^{M_a-1} \sum_{j=0}^{M_i-1} \sum_{l=0}^{M_b-1} c_{kjl} \Phi_k \otimes \varphi_j \otimes \Psi_l,$$

ist im allgemeinen der gemischte Zustand

$$\text{tr}_{ab}|\Omega\rangle\langle\Omega| = \sum_{j=0}^{M_i-1} \left( \sum_{k=0}^{M_a-1} \sum_{l=0}^{M_b-1} |c_{kjl}|^2 \right) |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|$$

und nur in dem speziellen Fall

$$\Omega = \sum_{k=0}^{M_a-1} \sum_{l=0}^{M_b-1} c_{kl} \Phi_k \otimes \phi \otimes \Psi_l$$

ist  $\text{tr}_{ab}|\Omega\rangle\langle\Omega| = |\phi\rangle\langle\phi|$ .

Ist in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ein gemischter Zustand  $\rho$  gegeben und ist

$$\rho = \sum_{j=0}^{r-1} \lambda_j |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|$$

seine Spektraldarstellung, wobei  $\lambda_j > 0$  seien. Sind dann  $\{\psi_j\}_{j=0,1,\dots,(r-1)}$  orthonormale Vektoren in einem Hilbertraum  $\mathcal{K}$ , dann gilt

$$\rho = \text{tr}_{\mathcal{K}}|\Phi\rangle\langle\Phi|, \quad \text{wobei} \quad \Phi = \sum_{j=0}^{r-1} \sqrt{\lambda_j} \varphi_j \otimes \psi_j.$$

Der reine Zustand  $\Phi$  heißt eine Purifikation des gemischten Zustands  $\rho$ . Purifikationen sind manchmal für beweistechnische Zwecke vorteilhaft.

### Ein Nachtrag zur 3. Vorlesung:

Wir hatten uns in der dritten Vorlesung klar gemacht, dass die Zustände einer statistischen Theorie eine konvexe Menge bilden, wobei wir stillschweigend von der *Ensembleinterpretation* ausgegangen sind. Wir hatten dabei auch bemerkt, dass man die Zustände, die man nicht als statistische Gemische anderer Zustände darstellen kann als *rein* bezeichnet, und dass diese reinen Zustände offenbar die Extrempunkte der konvexen Menge sind, ohne genauer darauf einzugehen.

Sei  $\mathcal{B}$  die konvexe Menge der Zustände, dann ist  $\rho \in \mathcal{B}$  im oben gegebenen Sinn nicht rein, wenn er als statistisches Gemisch anderer Zustände dargestellt werden kann. Formal heißt das

$$\exists(\sigma, \tau \in \mathcal{B}, \rho \neq \sigma \neq \tau \neq \rho, \alpha \in (0, 1)) \rho = \alpha\sigma + (1 - \alpha)\tau.$$

Die reinen Zustände sind durch die Negation dieser Aussage zu charakterisieren, also

$$\forall(\sigma, \tau \in \mathcal{B}, \rho \neq \sigma \neq \tau \neq \rho, \alpha \in (0, 1)) \rho \neq \alpha\sigma + (1 - \alpha)\tau.$$

die letztere Aussage ist äquivalent zu

$$(\sigma, \tau \in \mathcal{B}, \rho \neq \sigma \neq \tau \neq \rho, \alpha \in (0, 1)) \Rightarrow \rho \neq \alpha\sigma + (1 - \alpha)\tau,$$

beziehungsweise auch äquivalent zu

$$\rho \neq \alpha\sigma + (1 - \alpha)\tau \Rightarrow \neg(\sigma, \tau \in \mathcal{B}, \rho \neq \sigma \neq \tau \neq \rho, \alpha \in (0, 1)).$$

Als Beispiel betrachten wir die Zustandsmenge der Quantenmechanik, d.h. die positiven Spurklasseoperatoren  $\rho$  mit  $\text{tr}\rho = 1$ . Da die Spurklasseoperatoren kompakte Operatoren sind, haben sie auch im Falle  $\dim \mathcal{H} = \infty$  ein rein diskretes Spektrum. Wegen  $\text{tr}\rho = 1$  gilt  $\rho \leq \mathbf{1}$ .

**Lemma:** Sei  $0 \leq \rho \leq \mathbf{1}$  und  $\rho$  habe ein rein diskretes Spektrum. Dann gilt

$$\langle \psi, \rho\psi \rangle = 1 \Rightarrow \rho\psi = \psi.$$

**Beweis:** O.B.d.A. können wir  $\|\psi\| = 1$  und

$$\rho\psi = c\psi + \omega, \quad c \in \mathbf{C}, \quad \omega \perp \psi$$

annehmen. Wegen

$$1 = \langle \psi, \rho\psi \rangle = \langle \psi, c\psi + \omega \rangle = c \quad \Rightarrow \quad \|\psi + \omega\|^2 = 1 + \|\omega\|^2.$$

Damit wird

$$\begin{aligned} 1 &\geq \frac{\langle \psi + \omega, \rho(\psi + \omega) \rangle}{1 + \|\omega\|^2} = \frac{\langle \psi + \omega, (\psi + \omega + \rho\omega) \rangle}{1 + \|\omega\|^2} \\ &= \frac{1 + \langle \psi, \rho\omega \rangle + \|\omega\|^2 + \langle \omega, \rho\omega \rangle}{1 + \|\omega\|^2} \\ &= \frac{1 + 2\|\omega\|^2 + \langle \omega, \rho\omega \rangle}{1 + \|\omega\|^2} \\ &= 1 + \frac{\|\omega\|^2 + \langle \omega, \rho\omega \rangle}{1 + \|\omega\|^2}. \end{aligned}$$

Da  $\rho \geq 0$  ist, folgt  $\omega = 0$ , was zu zeigen war.

**Satz:** Ein Dichteoperator  $\rho$  ist genau dann ein Extrempunkt der konvexen Menge  $\mathcal{B}$  der Dichteoperatoren, wenn er vom Rang 1 ist, d.h. wenn es in  $\mathcal{H}$  ein  $\psi$ ,  $\|\psi\| = 1$  gibt, so dass  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  gilt.

**Beweis:** Ist der Rang eines Dichteoperators größer als 1, dann hat er wenigstens zwei nichtverschwindende Eigenwerte und ist ein statistisches Gemisch seiner Eigenprojektoren. also nicht rein. Rang 1 ist also notwendig dafür, dass  $\rho$  ein Extrempunkt ist.

Um zu zeigen, dass dies auch hinreicht, sei

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \alpha\sigma + (1 - \alpha)\tau \quad \text{und etwa} \quad (\sigma, \tau \in \mathcal{B}, \alpha \in (0, 1)).$$

Dann gilt

$$1 = \langle \psi, \psi \rangle = \langle \psi, \psi \rangle = \alpha \langle \psi, \sigma\psi \rangle + (1 - \alpha) \langle \psi, \tau\psi \rangle,$$

was wegen  $\alpha \in (0, 1)$  nur dann möglich ist, wenn

$$\langle \psi, \sigma\psi \rangle = 1 \quad \text{und} \quad \langle \psi, \tau\psi \rangle = 1$$

ist. Nach dem vorstehenden Lemma ist damit  $\psi$  Eigenvektor zum Eigenwert 1 sowohl von  $\sigma$  als auch von  $\tau$ . Die Spektralzerlegungen dieser Operatoren haben deshalb die Form

$$\sigma = |\psi\rangle\langle\psi| + \sum_i \lambda_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|, \quad \tau = |\psi\rangle\langle\psi| + \sum_k \mu_k |\chi_k\rangle\langle\chi_k|.$$

Da  $\sigma, \tau \in \mathcal{B}$  angenommen wurden, sind deren Eigenwerte nicht negativ und ihre Summen sind 1. Folglich verschwinden die  $\lambda_i$  und die  $\mu_k$  und es gilt  $\rho = |\psi \rangle \langle \psi| = \sigma = \tau$ , also  $\neg(\sigma, \tau \in \mathcal{B}, \rho \neq \sigma \neq \tau \neq \rho, \alpha \in (0, 1))$ , was zu zeigen war.