Kapitel 1

W'hlg Prinzipien der QM

Wir wiederholen – es ist schließlich schon mehr als ein Jahr her – die Prinzipien der Quantenmechanik wie Sie sie in "QM-I" kennengelernt haben. Unter dem Stichwort "Kinematik" Begriffe wie Zustand und alles was mit der Messung zu tun hat. Unter dem Stichwort "Dynamik" das Schicksal von unbeobachteten Quantensystemen. Und unter dem Stichwort "Identische Teilchen" die quantenmechanischen Besonderheiten der Ununterscheidbarkeit.

Hilbertraum? ... ist ein komplexer, vollständiger und separabler Vektorraum $\mathcal{H}$ mit Skalarprodukt, für zwei Vektoren ϕ, ψ notiert $\langle\phi|\psi\rangle$. Das Skalarprodukt vermittelt die Norm $\|\psi\| := \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$, und die wiederum die Metrik $d(\psi,\phi) := \|\psi - \phi\|$.

1.1 Kinematik

Sie erinnern sich: ein quantenphysikalisches System (Elektron, Atom, Kartoffel, Universum) ist charakterisiert durch einen **Hilbertraum** $\mathcal{H}$, dessen Elemente ψ die möglichen **Zustände** des Systems beschreiben, und eine Menge selbstadjungierter Operatoren, deren Elemente $\hat{A}$ als **Observable** des Systems fungieren. Im Unter-

Operator? ... ist in der Quantenmechanik ein Tupel $(\hat{A}, \mathcal{D})$, wo $\hat{A}$ eine lineare Abbildung von $\mathcal{H}$ (dem Hilbertraum des Systems) mit Definitionsbereich $\mathcal{D} \subset \mathcal{H}$. Linear bedeutet $\hat{A}(\alpha\phi + \beta\psi) = \alpha\hat{A}\phi + \beta\hat{A}\psi$ für alle ϕ, ψ aus dem Definitionsbereich und alle komplexen Koeffizienten α, β. Meist wird ein Operator einfach beim Namen der Operationsvorschrift $\hat{A}$ gerufen.
Der adjungierte von $\hat{A}$, notiert $\hat{A}^\dagger$, ist definiert $\langle\phi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle := \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle^*$ für alle $\phi \in \mathcal{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$ und alle $\psi \in \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger) \subset \mathcal{H}$. Selbstadjungiert bedeutet nun, dass sich die Abbildungen und die Defintionsbereiche gleichen, kurz $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ bzw. $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle^*$ für alle $\phi, \psi \in \mathcal{D}(\hat{A}) = \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$. Um den Text nicht mit zuviel technischen Details zu belasten, nehmen wir hier immer an, dass alle Bereichfragen geklärt sind ... und dass insbesondere alle Definitionsbreiche wenn schon nicht ganz $\mathcal{H}$, dann doch zumindest dicht in $\mathcal{H}$.

schied zur klassischen Mechanik kodiert ein Zustand(svektor) dabei nicht die Eigenschaften eines individuellen Systems (das Elektron, das ich hier gerade in der Hand halte), sondern die statistischen Eigenschaften eines **Ensembles** gleichartig (nämlich ψ-) präparierter Teilchen. Wird so ein Ensemble im Zustand ψ einer A-Messung unterworfen, so sind die Messwerte zufällig verteilt, mit Mittelwert

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi := \frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\,, \tag{1.1}$$

Ist der Zustandsvektor normiert, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, entfällt der Nenner. In diesem Fall ist der statistische Mittelwert offensichtlich gleich dem Diagonalelement von $\hat{A}$, dann auch genannt **Erwartungswert** von A im Zustand ψ.

Unterschiedliche physikalische Zustände werden durch unterschiedliche Vektoren beschrieben, aber Ununterscheidbarkeit von Zuständen impliziert nicht Ununterscheidbarkeit der zugeordneten Vektoren. Zwei nichttriviale Vektoren ψ und ψ', die sich nur dadurch unterscheiden, dass der eine ein Vielfaches des anderen – die also linear abhängig sind – geben nach (1.1) für alle Observable den gleichen Erwartungswert. Mathematisch sind sie verschieden, physikalisch aber ununterscheidbar.[1] "Lineare Abhängigkeit" ist eine Äquivalenzrelation, die Äquivalenklassen nennt man Strahl, bei Beschränkung auf normierte Vektoren genannt **Einheitsstrahl**, notiert $[\psi] := \{e^{i\varphi}|\psi\rangle \mid |\psi\rangle \in \mathcal{H},\ \|\psi\| = 1,\ \varphi \in \mathbb{R}\}$. Die Menge aller Einheitsstrahlen bildet einen eigenen Raum, genannt der (komplexe) **projektive Raum** über $\mathcal{H}$, bezeichnet $\mathcal{P}(\mathcal{H})$. Einheitsstrahlen, im Gegensatz zu Vektoren, sind in einer eins-zu-eins Korrespondenz mit physikalischen Zuständen. Das klingt gut. Leider erweist sich die Formulierung der QM unter Rückgriff auf projektive Räume als etwas sperrig. Das Superpositionsprinzip, beispielsweise, läss sich mit Einheitsstrahlen nur äußerst umständlich formulieren: die Linearkombination $\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle := |\chi\rangle$ ist ein Vektor,

[1] Nichttrivial sind alle Vektoren außer dem Null-Vektor.

beschreibt also nach Normierung einen physikalischen Zustand, aber der Einheitsstrahl $[\chi]$ ist eben keine Linearkombination der Strahlen $[\psi]$ und $[\phi]$. Wir werden daher die "Strahlsprache" so weit wie möglich vermeiden, und stattdessen weiterhin etwas lax von "Zustandsvektoren" sprechen.

Neben dem Mittelwert ist häufig auch die (quadratische) Varianz in einem statistischen Experiment von Bedeutung, für normierte Zustände definiert

$$\Delta^2_\psi(A) := \langle\psi|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_\psi)^2|\psi\rangle\,. \tag{1.2}$$

Sie erinnern sich – die Wurzel aus der quadratischen Varianz vermittelt ein Maß für die Streuung der Messwerte um den Mittelwert.

Die Menge der möglichen Messwerte einer A-Messung ist durch das **Spektrum** σ_A des zugeordenten Operators $\hat{A}$ gegeben. Mit $\hat{A}$ selbstadjungiert ist das Spektrum in jedem Fall reell. Instruktiv der Fall des reinen Punktspektrums $\sigma_A = \{a_1, a_2, \ldots\}$ worin a_i die diskreten Eigenwerte von $\hat{A}$, also $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ mit $|a_i\rangle$ Eigenvektor von $\hat{A}$ zum Eigenwert a_i. Die Eigenvektoren bilden eine **vollständiges Orthonormalsystem**,

$$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}\,, \qquad \sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = \hat{1}\,. \tag{1.3}$$

Vollständigkeit garantiert, dass jede Präparation vermessen werden kann: jede Wellenfunktion $|\psi\rangle$ gestattet eine Entwicklung nach den $|a_i\rangle$,

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i|a_i\rangle \tag{1.4}$$

mit eindeutig bestimmten Entwicklungskoeffizienten $\psi_i = \langle a_i|\psi\rangle$.[2] Orthogonalität garantiert, dass die einzelnen Messausgänge $|a_i\rangle$ wohlunterscheidbar sind. Ausgedrückt durch Eigenwerte a_i und Eigenvektoren $|a_i\rangle$ liest sich Gl. (1.1) $\langle\hat{A}\rangle = \sum a_i|\langle a_i|\psi\rangle|^2$, kurz: bei der A-Messung wird mit W'keit $|\psi_i|^2 \equiv |\langle a_i|\psi\rangle|^2$ der Messwert a_i abgelesen.

Formal ist das Spektrum als Komplement der sog *Resolventenmenge* definiert, $\sigma_A = \mathbb{C} \setminus \varrho_A$, worin $\varrho := \{z \in \mathbb{C}|(z - \hat{A})^{-1}$ beschränkt$\}$. Mit $\hat{A}$ selbstadjungiert ist das Spektrum reell, die Spektralschar vollständig. Die meisten Observablen sind durch ein Spektrum gekennzeichnet das zwei Anteile enthält, $\sigma_A = \sigma_{\rm pp} \bigcup \sigma_{\rm ac}$, wobei $\sigma_{\rm pp}$ – das sog *Punktspektrum* – die Menge der Eigenwerte von $\hat{A}$, und $\sigma_{\rm ac}$ das sog *kontinuierliche Spektrum*.

[2] Die Folge $(\psi_i = \langle a_i|\psi\rangle)_{i=1}^{\dim\mathcal{H}}$ vermittelt die sog. *A-Darstellung* von $|\psi\rangle$.

Wird bei einer A-Messung ein Wert a_i abgelesen, und wird dieser Messwert in einer unmittelbar anschließenden Kontrollmessung bestätigt, ist die A-Messung in einem idealen Messgerät verwirklicht. Messgeräte im Labor sind natürlich nie ideal; wer aber nur genügend Geld in die Hand nimmt, kann die Abweichungen seines Geräts vom Ideal beliebig klein machen. Wenn im Folgenden von einer A-Massung die Rede ist, ist immer die Messung mit einem idealen Messgerät gemeint. In diesem Fall bedeutet die A-Messung eine Zustandsänderung

$$|\psi\rangle \to |a_i\rangle \qquad \text{mit W'keit } |\langle a_i|\psi\rangle|^2 \tag{1.5}$$

zuweilen genannt **Kollaps der Wellenfunktion**. Man beachte, dass eine quantenmechanische Messung irreversibel ist: aus den W'keiten $\langle a_i|\psi\rangle|^2$ – im Jargon auch genannt **Übergangswahrscheinlichkeiten** – lässt sich der Zustand ψ i.A. nicht rekonstruieren: Dazu bräuchte man nämlich sowohl Betrag jeder **Übergangsamplitude** $\langle a_i|\psi\rangle$ (der experimentell ermittelt werden kann) als auch deren Phase (über die eine A-Messung nichts zu sagen hat).

Um etwas vor Augen zu haben, rufen wir uns Spin-$\frac{1}{2}$ in Erinnerung. Hilbertraum $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ ist $\simeq \mathbb{C}^2$. Observable sind die Paulioperatoren $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$. Die Paulis sind selbstadjungiert und genügen der Algebra $[\sigma_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\sigma_z$ (xyz zyklisch) nebst $\hat{\sigma}_a^2 = \hat{1}$, worin $\hat{1}$ die Identität auf $\mathcal{H}_{\text{spin}}$, für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{\text{spin}}$ also $\hat{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$. Die Algebra garantiert, dass jede Linierkombination $\hat{\sigma}_a := a_x\hat{\sigma}_x + a_y\hat{\sigma}_y + a_z\hat{\sigma}_z$ mit reellen Koeffizienten a_x, a_y, a_z, normiert $a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 = 1$, eine Observable "Spin-Einstellung in a-Richtung" mit Eigenwerten $+1$ und -1, die zugehörigen Eigenvektoren bezeichnet $|\uparrow_a\rangle$ und $|\downarrow_a\rangle$ (lies: "rauf" und "runter").[3] Das entsprechende Messgerät ist ein Stern-Gerlach Magent mit Orientierung in a-Richtung (bezeichnet SGM_a): Teilchen

[3] In der sog Standardarstellung werden die Eigenvektoren von $\hat{\sigma}_z$ mit Spaltenvektoren identifiziert,

$$|\uparrow_z\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\downarrow_z\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{1.6}$$

die den SGM_a durch den oberen Kanal verlassen (Messwert +1) sind mit Sicherheit im Zustand $|\uparrow_a\rangle$, Teilchen die den SGM_a im unteren Kanal verlassen sind mit Sicherheit im Zustand $|\downarrow_a\rangle$. Werden Teilchen, die im Zustand $|\psi\rangle = |\uparrow_b\rangle$ präpariert sind, einer SGM_a-Messung unterzogen, werden sie mit W'keit $|\langle\uparrow_a \mid \uparrow_b\rangle|^2 = \frac{1+\vec{a}\cdot\vec{b}}{2}$ zu einem Messwerte +1 Anlass geben, entsprechend das SGM_a durch den oberen Kanal verlassen, und mit W'keit $|\langle\downarrow_a \mid \uparrow_b\rangle|^2 = \frac{1-\vec{a}\cdot\vec{b}}{2}$ einen Messwert -1 anzeigen, entsprechend das SGM_a durch den unteren Kanal verlassen.

Ist ein Teil oder gar das ganze Spektrum kontinuierlich entsprechend $|\langle a|\psi\rangle|^2 da$ die W'keit, einen Messwert im Intervall da bei a abzulesen. Pedanten weisen darauf hin, dass Elemente a im kontinuierlichen Spektrum im strengen Sinne keine Eigenwerte und daher die $|a\rangle$ auch keine Eigenvektoren: das Eigenwertproblem $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ hat für $a \in \sigma_{\mathrm{ac}}$ keine Lösung $|a\rangle$ im Hilbertraum, sondern ledigliche in einem sog *aufgetakelten* Hilbertraum (engl. *rigged Hilbert space*). Streng genommen ist nur das Spektradifferential $\hat{P}(a, da) := |a\rangle\langle a|da$ von Bedeutung – vgl. Ergänzung Indikatorobservable. Trotzdem werden wir auch die Zahlen im kontinuierlichen Spektrum als Eigenwerte bezeichnen, und die $|a\rangle$ als Eigenvektoren – wenn's denn sein muss als *verallgemeinerte Eigenvektoren*.[4].

Um auch hier etwas vor Augen zu haben, rufen wir uns den Massepunkt in Erinnerung, zur Vereinfachung mit einem Freiheitsgrad. Wichtige Observable, sog *Basisobservable*, sind der Ort $\hat{q}$ und der kanonischn konjugierte Impuls $\hat{p}$. Andere Observable sind Funktionen von Ort und Impuls wie beispielsweise die Hamiltonsche Energie

---

und die Paulioperatoren mit Matrizen

$$\hat{\sigma}_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{1.7}$$

[4] Wieder so ein Begriff, der eigentlich sinnlos ist. Kennen wir schon: auch die Diracfunktion ist schließlich keine Funktion – aber was soll's ...

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$. Ort und Impuls genügen der *kanonischen Vertauschungsrelation*,

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar\,. \tag{1.8}$$

In der sog *Ortsdarstellung* wirkt $\hat{q}$ definitionsgemäß wie "Multiplikation mit der Koordinate x", also $(\hat{q}\psi)(x) = x\psi(x)$.[5] Der Impulsoperator wirkt wie "Ableitung", also $(\hat{p}\psi)(x) = \frac{\hbar}{i}\psi'(x)$. Hilbertraum ist in dieser Darstellung $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$ – der Funktionenraum der quadratintegrabeln komplexwertigen Funktionen über einerm Maßraum $(\mathbb{R}, dx)$. Als Skalarprodukt fungiert $\langle\phi|\psi\rangle = \int \phi^*(x)\psi(x)dx$. Ist die Wellenfunktion normiert, $\int |\psi(\vec{x}, t)|^2 dx = 1$, vermittelt das Absolutquadrat $|\psi(x)|^2$ die W'keitsdichte für die Ortsmessung: mit W'keit $|\psi(x)|^2 dx$ wird ein Teilchen, das im Zustand ψ präpariert ist, bei einer Ortsmessung in einer Umgebung dx bei x gefunden.

Ortsmessung ist nett, aber beileibe nicht die einzige Messung, die man vornehmen kann. Wenn man beispielsweise an Impulsen interessiert ist, vermittel die Fouriertransformiert $\tilde{\psi}(k) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ikx}\psi(x)dx$ die Wellenfunktion in der Impulsdarstellung, und $|\tilde{\psi}(k)|^2 dk$ entsprechend die W'keit bei einer Impulsmessung einen Messwert in einer Umgebung $\hbar dk$ bei $\hbar k$ abzulesen.

Ach ja – die Streuungen der Messwerte von Ort und Impuls genügen der **Heisenbergschen Unschärferelation**

$$\Delta^2_\psi(q)\Delta^2_\psi(p) \geq \frac{\hbar^2}{4}\,, \tag{1.9}$$

die Sie in der QM-I bewiesen und dort auch ausführlich interpretiert haben ...

[5] Analogie: ist $\hat{M}$ eine Diagonalmatrix mit Matrixelementen $M_{mn} = m\delta_{mn}$, wirkt $\hat{M}$ auf einen Vektor v gemäss $(\hat{M}v)_m = \sum_n M_{mn}v_n = mv_m$.

1.2 Dynamik

Die irreversible Zustandsänderung der Messung (1.5) kontrastiert scharf mit der reversiblen Zustandsänderung die das System durchmacht während es von seiner Umgebung (Umwelt, Messgerät etc) isoliert ist. Zuständig ist in diesem Fall die **Schrödingergleichung**

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle\,, \tag{1.10}$$

worin $\hat{H}$ der **Hamiltonoperator** des Systems.

Um nicht in Konflikt mit der W'keitsinterpretation zu geraten, ist der Hamiltonoperator notwendig selbstadjungiert. Formal fungiert er als *Erzeugender*, gebildet *Generator*, zeitlicher Verschiebungen. Abstrakt notiert

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle \tag{1.11}$$

worin $\hat{U}(t) := e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ unitär, sog **Zeitentwicklungsoperator**, auch *Propagator*, und $|\Psi(0)\rangle$ ein beliebiger Zustandsvektor, sog **Anfangszustand**.

Die Dynamik des Zustandsvektors bedeutet eine Zeitabhängigkeit der Erwartungswerte, $\langle\hat{A}\rangle_{\Psi(t)} = \langle\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)\rangle_{\Psi(0)}$. Verabredet man hier in einem sog **Heisenbergbild** zeitabhängige Operatoren $\hat{A}_{\mathrm{H}}(t) := \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)$, schaut man auf Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_{\mathrm{H}}(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_{\mathrm{H}}(t), \hat{H}_H(t)\right]\,, \tag{1.12}$$

mit Anfangsbdingung $\hat{A}_{\mathrm{H}}(t=0) = \hat{A}$, und $\hat{H}_{\mathrm{H}}(t) := \hat{U}^\dagger(t)\hat{H}(t)\hat{U}(t)$ der Hamiltonoperator im Heisenbergbild ($\hat{H}_{\mathrm{H}}(t) = \hat{H}$ falls $\hat{H}$ zeitunabhängig). Ist $\hat{A}$ explizit zeitabhängig (Beispiel: $\hat{A} = \hat{q}+t$) ist die rechte Seite um einen Term $\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}$ zu ergänzen (im Beispiel $\frac{\partial A}{\partial t} = 1$).

Eine Operator, der sich unter der Zeitentwicklung nicht ändert– alternativ: dessen Erwartungswert zeitunabhängig – heißt eine Konstante der Bewegung, auch **Erhaltungsgröße**. Offensichtlich konstituiert $\hat{A}$ genau dann eine Erhaltungsgröße, wenn $\hat{A}$ mit dem Hamiltonoperator kommutiert. Das Paradebeispiel vermittelt atomarer Wassertstoff, nicht-relativistisch und ohne Spin, wie Sie ihn in der QM-I Vorlesung kennengelernt haben. Der Bahndrehimpuls $\hat{\vec{\ell}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ – genauer gesagt: jede kartesische Komponente $\hat{\ell}_a = \vec{a} \cdot \hat{\vec{\ell}}$ mit $\vec{a}$ Euklidischer Einheitsvektor "in a-Richtung" – kommutiert mit dem Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}|}$ und ist daher eine Erhaltungsgröße, $\langle\psi(t)|\hat{\vec{\ell}}|\psi(t)\rangle = \overrightarrow{const.}$.

Zwei kommutierende Observable $\hat{A}$ und $\hat{B}$ besitzen ein gemeinsames System von Eigenvektoren (kurz: $\hat{A}$ und $\hat{B}$ lassen sich gemeinsam diagonalisieren). Im Falle atomaren Wasserstoffs sind die $\psi_{nlm}(r\vartheta,\varphi)$ mit $n = 1, 2, \ldots$, $\ell = 0, 1, \ldots, n-1$, $m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell$ sowohl Eigenfunktionen von $\hat{H}$, nämlich $\hat{H}\psi_{nlm} = \varepsilon_{n\ell}\psi_{nlm}$ mit $\varepsilon_{n\ell} = -\frac{\mathrm{Ry}}{n^2}$, als auch Eigenfunktionen von $\hat{\ell}_z$ und $\hat{\vec{\ell}}^2$, nämlich $\hat{\ell}_z\psi_{nlm} = \hbar m\psi_{nlm}$ und $\hat{\vec{\ell}}^2\psi_{nlm} = \hbar^2\ell(\ell+1)\psi_{nlm}$. Kein Wunder – schließlich kommutieren $\hat{\ell}_z$ und $\hat{\vec{\ell}}^2$ sowohl untereinander (das gemeinsame System von Eigenfunktionen sind die Kugelflächenfunktionenen $Y_{\ell m}$) als auch mit $\hat{H}$. Die Index-Variablen ℓ und m sind sog. **gute Quantenzahlen**

1.3 Symmetrien und Erhaltungsgrößen

Viele Systeme sind durch ihre Symmetrien charakterisiert. Das System "Massepunkt im Zentralfeld", beispielsweise, ist "drehsymmetrisch", womit gemeint ist, dass die Hamiltonfunktion $H(\vec{p},\vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(|\vec{r}|)$ invariant ist unter Drehungen, kanonisch dargestellt $(\vec{r},\vec{p}) \mapsto (\underline{R}\vec{r}, \underline{R}\vec{p})$, wo $\underline{R} \in SO(3)$ orthogonale 3×3-Matrix, $R^{-1} = R^T$,

die die Orientierung respektiert, $\mathrm{Det}(\underline{R}) = 1$.

Symmetrie impliziert Erhaltungsätze – so lässt sich das **Noether'sche Theorem** in drei Worten zusammenfassen. Etwas ausführlicher: die Erzeugenden einer kontinuierlichen Symmetriegruppe sind erste Integrale der Bewegung. So ist beispielsweise die z-Komponente des Bahndrehimpulses Erzeugende einer infinitesimalen Drehung um die z-Achse. Durch Hintereinanderausführen derartiger infinitesimaler Drehungen lässt sich jede endliche Drehung um die z-Achse erzeugen. Weist das System Rotationssymmetrie bezüglich Drehungen um die z-Achse auf, ist nach dem Noetherschen Theorem die Erzeugende ℓ_z eine Konstante der Bewegung.[6]

In der Quantenmechanik werden kanonische Transformationen wie Drehungen, aber auch Verschiebungen, Spiegelungen durch die sog **Wigner-Automorphismen** dargestellt. Unter einem Wigner-Automorphismus T ("T" wie Transformation) versteht man in diesem Zusammenhang eine bijektive Abbildung von Zuständen (=Einheitsstrahlen) $[\psi] \mapsto T([\psi])$, die von einer Abbildung der Observablen (=selbstadjungierte Operatoren) $\hat{A} \mapsto T(\hat{A})$ begleitet wird, derart, dass die Verteilungen bzw. Übergangswahrscheinlichkeiten unter T invariant sind. Ist gar der Hamiltonoperator unter T invariant, also $T(\hat{H}) = \hat{H}$, ist T eine Symmetrietransformation für das betrachtete System.

Der **Satz von Wigner** besagt nun, dass jeder derartige Automorphismus im Hilbertraum realisiert werden kann

$$\psi \mapsto \psi' = \hat{U}\psi\,, \qquad \hat{A} \mapsto \hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1} \tag{1.13}$$

[6] Im übrigen verdanken Symmetrietransformatione ihre hervorragende Bedeutung dem einfachen Umstand, dass sich mit ihrer Hilfe verschiedene Lösungen zu einer gegebenen Bewegungsgleichung generieren lassen. Hat man beispielsweise eine bestimmte Keplerellipse, die die Bewegung des Probeteilchens im Schwerefeld beschreibt, erhält man durch eine einfache Drehung dieser Ellipse eine weitere, physikalisch realisierbare Bahn. Die beiden Ellipsen mögen verschieden sein, die Bewegungsgleichungen, die ihnen zugrunde liegen, sind es wegen der Rotationsinvarinz der Hamiltonfunktion nicht.

Eine **kanonische Transformation** ist eine Selbstabbildung des (q, p)-Phasenraums unter der Hamiltonsche Vektorfelder auf Hamiltonsche Vektorfelder abgebildet werden. Eine Menge kanonischer Transformationen, in der zu jeder in ihr enthaltenen Transformation auch eine Umkehrung in der Menge existiert, und die unter der Verknüpfung "Hintereinanderausführung" abgeschlossen ist, definert eine bestimmte **Transformationsgruppe**. Ist die Hamiltonfunktion eines physikalischen Systems invariant unter den kanonischen Transformationen einer Transformationsgruppe spricht man von einer **Symmetriegruppe** des Systems. Eine Transformations- bzw. Symmtriegruppe heit eine **kontinuierliche** der Dimension d, wenn sich die Transformationen mit d wesentlichen Parametern analytisch parametrisieren lassen (d. h. die Parameter sollen sich nicht als Funktionen von weniger Parametern darstellen lassen) und **diskret**, falls die Parametermannigfaltikeit eine Teilmenge der natürlichen Zahlen.
Eine infintesimale Transformation $q \mapsto Q_\varepsilon = q + \varepsilon\eta(q,p) + \ldots$, $p \mapsto P_\varepsilon = p + \varepsilon\zeta(q,p) + \ldots$ mit $\ldots$ von Ordnung ε^2 für $|\varepsilon| \ll 1$, ist kanonisch, wenn es eine Funktion $F(q,p)$ – genannt die **Erzeugende** der Transformation – gibt, so dass $\eta = \frac{\partial F}{\partial p}$ und $\zeta = -\frac{\partial F}{\partial q}$.

wobei $\hat{U} \equiv \hat{U}(T)$, bis auf eine globale Phase durch T eindeutig bestimt, entweder unitär und linear,

$$\langle \hat{U}\phi|\hat{U}\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle\,, \qquad \hat{U}(\alpha|\phi\rangle + \beta|\psi\rangle) = \alpha\hat{U}|\phi\rangle + \beta\hat{U}|\psi\rangle \tag{1.14}$$

oder **antiunitär** und **antilinear**

$$\langle \hat{U}\phi|\hat{U}\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*\,, \qquad \hat{U}(\alpha|\phi\rangle + \beta|\psi\rangle) = \alpha^*\hat{U}|\phi\rangle + \beta^*\hat{U}|\psi\rangle \tag{1.15}$$

Ob nun unitär oder antiunitär – in jedem Fall

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}\,. \tag{1.16}$$

Antiunitäre begegnen einem in der Quantenmechanik bei der Zeitumkehr und der Ladungskonjugation. Andere Transformationen, wie beispielsweise räumliche Spiegelungen, räumliche Verschiebungen und Drehungen, aber auch Schübe (Galilei bzw. Lorentz) werden durch unitäre Operatoren dargestellt. Der unitäre $\hat{U}_a := e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}$, beispielsweise, dient der Darstellung einer Transformation "Verschiebung". In der Ortsdarstellung $\hat{p} \mapsto \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ ist $(\hat{U}_a\psi)(x) = \psi(x-a)$. Lies: erzeugt eine Maschine M Teilchen im Zustand $\psi(x)$, so erzeugt die um a verschobene Maschine Teilchen im Zustand $\psi'(x) = \psi(x-a)$. Aus der infinitesimalen Verschiebung um ε, $\psi \mapsto \psi' = \psi - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{p}\psi$ liest man die Erzeugende der Verschiebung ab – der kanonische Impuls! Gefragt, was denn nun der kanonische Impuls sei, dürfen Sie nun gebildet antworten "Die Erzeugende der Verschiebung!".[7]

Sei nun $\hat{A}$ eine Observable, nicht notwendig eine Erhaltungsgröße, die im Folgenden die Rolle einer Erzeugenden übernimmt. Dann ist der Operator $\hat{U}_\varepsilon := e^{-i\varepsilon\hat{A}}$, worin ε eine reelle Zahl, in jedem Fall unitär, daher legitimer Kandidat für einen Wigner-Automorphismus. Hat man dann eine Lösung $|\Psi(t)\rangle$ einer Schrödingergleichung zum

[7] Noch besser: "Die Erzeugende der virtuellen Verrückung."

Hamiltonoperator $\hat{H}$, so ist $|\Psi_\varepsilon(t)\rangle := \hat{U}_\varepsilon|\Psi(t)\rangle$ Lösung einer Schrödingergleichung zum Hamitlonoperator $\hat{H}_\varepsilon := \hat{U}_\varepsilon\hat{H}\hat{U}_\varepsilon^\dagger$. Im Allgemeinen sind die Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ und $\hat{H}_\varepsilon$ verschieden, sind also unterschiedlichen Systemen zugeordnet. Ist jedoch $\hat{A}$ eine Erhaltungsgröße, kommutieren also $\hat{H}$ und $\hat{U}_\varepsilon$, ist $\hat{H} = \hat{H}_\varepsilon$, d.h. das System (nicht die Zustände!) ist invariant unter der Transformation mit $\hat{U}_\varepsilon$, kurz: die mit $\hat{A}$ erzeugte kontinuierliche Transformationsgruppe ist eine Symmetriegruppe des Systems.

In der Elementarteilchenphysik stellt man zunächst experimentell Erhaltungssätze fest, postuliert entsprechende Symmetriegruppen, und schränkt so die möglichen Hamitonoperatoren ein. Rotationsinvarianz, beispielsweise, bedeutet dass die Spin-Wechselwirkung zweier Teilchen 1 und 2 notwendig von der Form $\gamma\hat{\vec{s}}_1 \cdot \hat{\vec{s}}_2$, worin γ eine experimentell zu ermittelnde Funktion, die nur vom Abstand der beiden Teilchen abhängen kann.

1.4 Aus zwei mach eins – zusammengesetzte Systeme

Führt man zwei Systeme A und B zusammen, entsteht ein neues System, genannt *zusammengesetztes System* bzw. *Verbundsystem*, bezeichnet AB. Der Hilbertraum des zusammengesetzten Systems, $\mathcal{H}^{(AB)}$, ist das Tensorprodukt $\mathcal{H}^{(AB)} := \mathcal{H}^{(A)} \otimes \mathcal{H}^{(B)}$. Bevölkert wird $\mathcal{H}^{(AB)}$ von den sog *Produktzuständen* $|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle$, $\phi \in \mathcal{H}^{(A)}$, $\chi \in \mathcal{H}^{(B)}$ und deren Linearkombinationen, die im Allgemeinen nicht die Form von Produktzuständen haben. Das Skalarprodukt auf $\mathcal{H}^{(AB)}$ wird über das Skalarprodukt der Faktorräume erklärt,

$$(\langle\alpha| \otimes \langle\beta|)\,(|\gamma\rangle \otimes |\delta\rangle) = \langle\alpha|\gamma\rangle^{(A)}\langle\beta|\delta\rangle^{(B)} \tag{1.17}$$

Als Basis von $\mathcal{H}^{(AB)}$ kann eine sog *Produktbasis* gewählt werden

$$|c_{ij}\rangle = |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle \,. \tag{1.18}$$

Ein allgemeiner Zustand des Verbundsystems ist dann die Linearkombination

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle \,. \tag{1.19}$$

Kann man Vektoren $|\phi\rangle \in \mathcal{H}^{(A)}$ und $|\chi\rangle \in \mathcal{H}^{(B)}$ finden, so dass $|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle$ nennt man $|\psi\rangle$ einen *Produktzustand*. Andernfalls nennt man $|\psi\rangle$ einen *verschränkten Zustand*. In den Übungen zeigen Sie, dass die verschränkten Zustände die Regel sind, die Produktzustände die Ausnahmen.[8]

Als Beispiel betrachten wir zwei Qubits bzw. zwei Spin-$\frac{1}{2}$, i.e. Hilberträume $\mathcal{H}^{(A)} \simeq \mathbb{C}^2$, $\mathcal{H}^{(B)} \simeq \mathbb{C}^2$. Der Hilbertraum des zusammengesetzten Systems ist 4-dimensional, $\mathcal{H}^{(A)} \times \mathcal{H}^{(B)} \simeq \mathbb{C}^4$. Mittels Matrixdarstelllung in den Faktorräumen

$$|\phi\rangle \mapsto \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^2 \,, \qquad |\chi\rangle \mapsto \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^2 \,, \tag{1.20}$$

induzieren wir eine Matrixdarstellung eines Produktzustands,

$$|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle \mapsto \begin{bmatrix} \phi_1 \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \\ \phi_2 \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1\chi_1 \\ \phi_1\chi_2 \\ \phi_2\chi_1 \\ \phi_2\chi_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^4 \,. \tag{1.21}$$

[8] Für endlichdimensionale Fakotrräume mit $M := \dim\mathcal{H}^{(A)}$, $N := \dim\mathcal{H}^{(B)}$ ist die Menge der Produktzuständen eine Mannigfaltigkeit der Dimension $2(M+N)-4$ (-4 wegen Phasen und Betrag), wohingegen die Menge aller Zustandsvektoren eine Mannigfaltikgeit der Dimension $2MN-2$ (MN ist die Dimension des Produktraumes, -2 wegen Phase und Betrag).

Eine Observable $\hat{A}$ des Subsystems A wird als Observable des Verbundsystems pedantisch notiert $\hat{A} \otimes \hat{1}^{(B)}$, worin $\hat{1}^{(B)}$ die Identität auf $\mathcal{H}^{(B)}$. Eine allgemeine Observable des Verbundsystems kann – zumindest formal – immer als eine Summe von Produkten der Form $\hat{A} \otimes \hat{B}$ geschrieben werden.

Die Beschreibung zusammengesetzter Systeme mittels Tensorierung ist nicht auf Bi-partite Systeme beschränkt. Atome, Moleküle und Festkörper sind "zusammengesetzte Systeme", nur dass der Hilbertraum des Gesamtsystems ein vielfaches Produkt der Hilberträume der einzelnen Teilchen.

Eine wichtige Klasse zusammengesetzter Systeme sind die Vielteilchensysteme der Festkörperphysik, der (ultrakalten) Gase oder Flüssigkeiten. Vielteilchensysteme – Sie erinnern sich an Ihre Thermodynamik-Vorlesung – werden gerne statistisch beschrieben – schließlich hat man kaum die Zeit oder die Nerven alle 10^{23} Freiheitsgrade in einem Liter Luft genau zu beschreiben wenn man doch nur am Druck bei einer gegebenen Temperatur interessiert ist.

Vielteilchensysteme sind noch aus einem anderen Grund wichtig: Umgebungen eines Systems oder die Messgeräte an die das System zu Zwecken der Messung gekoppelt wird, sind typischerweise Vielteilchensysteme, involvieren viele Freiheitsgrade. Die Kopplung eines kleinen Systems mit wenig Freiheitsgraden an ein System mit vielen Freiheitsgraden – zuweilen genannt "Bad" – und sei die Kopplung noch so schwach, führt zu irreversiblem Verhalten des kleinen Systems – denken Sie nur an die Dämpfung eines Pendels (das System), das in Luft (das Bad) schwingt. Die Dynamik des Gesamtsystem "Pendel + Luft" ist dabei weiterhin reversibel – schließlich ist das System der Newtonschen Bewegungsgleichungen wie auch die Schrödingergleichung des Gesamtsystems invariant unter Zeitumkehr.

1.5 Gemische Zustände – Quantenmechanik 2.0

Kann der Zustand eines Quantensystems durch einen Hilbertraumvektor beschriebenwerden, sagt man das Quantensystem liege in einem reinen Zustand vor. Ein System in einem reinen Zustand zu präparieren ist allerdings nur selten möglich. Im allgemeinen wird in einem gegebenen physikalischen Aufbau das System in einem statistischen Gemisch reiner Zustände präpariert. So ein Zustandsgemisch, nennen wir es ρ, besteht beispielsweise aus einer gewissen Zahl, sagen wir N, reiner Zustände ψ_i, $i = 1\ldots, N$, und einer Wahrscheinlichkeitsverteilung $p_1, \ldots, p_N$, wobei p_i die W'keit, dass ψ_i im Gemisch vertreten ist. Die ψ_i müssen dabei weder paarweise verschieden noch paarweise orthogonal sein. In jedem Fall aber $\sum_{i=1}^{N} p_i = 1$.

Wird nun das fragliche System einer A-Messung unterzogen, wäre $\langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle$ der Erwartungwert sofern das System im reinen Zustand $[\psi_i]$ vorläge. Entsprechend ist der Erwartungswert für das Gemisch

$$\langle\hat{A}\rangle_\rho = \sum_{i=1}^{N} p_i \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle\,. \tag{1.22}$$

Mit der Verabredung

$$\hat{\rho} := \sum_{i=1}^{N} p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\,, \tag{1.23}$$

läßt sich Gl. (1.22) kurz und bündig formulieren

$$\langle\hat{A}\rangle_\rho = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}\} \tag{1.24}$$

wo $\mathrm{Tr}\{\hat{X}\}$ die **Spur** von $\hat{X}$ bezeichnet. In einer Matrixdarstellung bzgl. eine Hilbertraumbasis $|\phi_\mu\rangle$ also $\mathrm{Tr}\{\hat{X}\} = \sum_\mu \langle\phi_\mu|\hat{X}|\phi_\mu\rangle$.

Der in (1.23) definierte Operator ist ein Beispiel für einen sog **Dichteoperator**, zuweilen auch genannt *statistischer Operator*. Allgemein qualifiziert sich ein Operator $\hat{\rho}$ als Dichteoperator, wenn er folgende Eigenschaften aufweist:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger \qquad \text{selbstadjungiert} \tag{1.25}$$

$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0 \qquad \text{positiv definit} \tag{1.26}$$

$$\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\} = 1 \qquad \text{normiert} \tag{1.27}$$

In den Übungen zeigen Sie, dass der in (1.23) definierte Operator diesen Anforderungen genügt.

Ein Dichteoperator ist selbstadjungiert. Er kann daher immer diagonalisiert werden,

$$\hat{\rho} = \sum_\mu \rho_\mu |\rho_\mu\rangle\langle\rho_\mu| \tag{1.28}$$

wo ρ_μ die reellen Eigenwerte, und $|\rho_\mu\rangle$ Eigenvektoren. Positivität von $\hat{\rho}$ impliziert nicht-Neagitivität der Eigenwerte, also $\rho_\mu \geq 0$, und Normiertheit von $\hat{\rho}$ bedeutet $0 \leq \rho_\mu \leq 1$, insbesondere $\sum_\mu \rho_\mu = 1$. Kurz: die Eigenwerte von $\hat{\rho}$ haben die Bedeutung von Wahrscheinlichkeiten. Im besonderen Fall, dass alle Eigenwerte bis auf einen den Wert Null haben, ist $\hat{\rho}$ ein Projektor der Form $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$. Man spricht dann von einem **reinen Zustand**. In allen anderen Fällen spricht man von einem **Zustandsgemisch**. Offensichtlich stehen die reinen Zustände der Quantenstatistik in einer eins-zu-eins Korrepondenz mit den Einheitsstrahlen der gewöhnlichen Quantenmechanik (und also in einer eins-zu-eins Korrespondenz mit den physikalischen Zuständen).

Dichteoperatoren die ein Gemisch beschreiben sind Ihnen aus der Thermodynamikvorlesung wohl vertraut. Der harmonische Oszillator, beispielsweise, in einem Wärmebed der Temperatur T, wird im thermodynamischen Gleichgewicht beschrieben durch

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z}\exp\{-\beta\hat{H}\} \tag{1.29}$$

worin $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2$ der Hamiltonoperator des Harmonischen Oszillators, ω seine Eigenfrequenz, $\beta = \frac{1}{k_\mathrm{B}T}$ mit k_B die Boltzmannkonstante, und $Z = \mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\}$ die kanonische Zustandssumme. In der Energiedarstellung $\hat{\rho} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\beta\varepsilon_n}}{Z}|n\rangle\langle n|$, worin $|n\rangle$ Eigenvektor von $\vec{H}$ zum Eigenwert $\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

Für Dichteopertoren gilt ganz allgemein

$$\mathrm{Tr}\{\rho^2\} \leq 1 \tag{1.30}$$

wobei die Ungleichung genau für die reinen Zustände gesättigt,

$$\mathrm{Tr}\{\rho^2\} = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\rho} \text{ ist reiner Zustand} \tag{1.31}$$

Letztere Gleichung kodiert ein einfach anzuwendenes Kriterium um einen gegebenen Zustand auf Reinheit zu überprüfen.

Die Menge der Dichteoperatoren – genannte der **Zustandsraum**, bezeichnet $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ – ist eine **konvexe Teilmenge** aller Operatoren. Hat man nämlich zwei Dichteoperatoren ρ_0 und ρ_1 so ist

$$\rho_\lambda = \lambda\rho_1 + (1-\lambda)\rho_0 \tag{1.32}$$

für jedes reelle $\lambda \in [0,1]$ wiederum Dichteoperator.

Das Zustandspostulat der Quantenmechanik kann nun modifiziert werden

Zustandspostulat 2.0 Der Zustand eine quantenphysikalischen Systems ist vollständig durch einen Dichteoperator charakterisiert.

Und weil wir grad dabei sind, modifizieren wir auch gleich das Observablenpostulat

Observablenpostulat 2.0 Der statistische Mittelwert der Messergebnisse einer A-Messung an einem System im Zustand $\hat{\rho}$ ist gegeben $\langle\hat{A}\rangle_\rho = \mathrm{Tr}\{\hat{A}\hat{\rho}\}$.

Das Zeitentwicklungspostulat stellen wir zurück. Lediglich für abgeschlossene Systeme können wir jetzt schon formulieren

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\rho}\right] . \tag{1.33}$$

sog. **Liouville-von Neumann Gleichung**. Der Beweis ist denkbar einfach: wie oben schon gesagt, wird die Dynamik eines abgeschlossenen Systems für Zustandsvektoren durch die Schrödingergleichung beschrieben. Für das Paradigma in der Einleitung zu diesem Abschnitt bedeutet das $\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i |\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)|$, und also $\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t)$ wie in (1.33) angegeben. Man beachte die strukturelle Ähnlichkeit der Liouvill-von Neumann Gleichung mit den Heisenberggleichung (). Lediglich die Reihenfolge der Operatoren auf der rechten Seite ist vertauscht.

Die Modifikationen bedeutet glücklicherweise keine "Änderung" der Quantenmechanik. Alles, was Sie in der QM-I gelernt haben, ist nach wie vor gültig. Jede Situation, die die Anhänger der 2.0-Postulate mit einem Dichteoperator beschreiben, können Sie in der Sprache der QM-I beschreiben (wie sie aus den ersten beiden Absätzen zu diesem Abschnitt unschwer ablesen können). Aber Achtung! Die Zusammensetzung eines Gemisches – also die ψ_i und ihre Gewichte p_i – lassen sich aus einem gegebenen Dichteoperator i.A. nicht rekonstruieren. Dazu ein kleines Beispiel, wie immer Spin-$\frac{1}{2}$. Produziert eine Quelle Q_1 Teilchen in Zuständen $|\uparrow_z\rangle$ und $|\downarrow_z\rangle$ mit jew. W'keit 0.5, und eine andere Quelle Q_2 Teilchen in Zuständen $|\uparrow_x\rangle$ und $|\downarrow_x\rangle$, auch mit jew. W'keit 0.5, ist der Dichteoperator für beide Quellen $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\hat{1}$.

Eine Ausnahme von der "Nicht-Rekonstruierbarkeit der Zusammensetzung" bilden Dichteoperatoren der Form $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$. Man nennt so einen Dichteoperator einen **reinen Zustand** (wie man auch einen Dichteoperator zuweilen einfach als 'Zustand' bezeichnet).

Nehmen wir an, das zusammengesetzte System läge in einem reinen Zustand vor,

also $|\psi\rangle = \sum_{i\mu} \psi_{i\mu}|s_i\rangle \otimes |\beta_\mu\rangle$, bzw

$$\varrho_{SB} = \sum ij \sum_{\mu\nu} \rho_{i\mu,j\nu}|s_i\beta_\mu\rangle\langle s_j\beta_\nu| \tag{1.34}$$

worin $\rho_{i\mu,\jmath\nu}$ die Matrixelemente des Dichteoperators, $\rho_{i\mu,\jmath\nu} = \langle s_i\beta_\mu|\hat{\rho}_{SB}|s_j\beta_\nu\rangle$.

Eine Systemobservable $\vec{A}_S$ wird nun für das zusammengesetzte System dargestellt $\hat{A}_{SB} = \hat{A}_S \otimes \hat{1}_B$. Der Erwartungswert

$$\langle \hat{A}_{SB}\rangle_{\rho_{SB}} \tag{1.35}$$

Führt man an dieser Stelle die sog. **Partialspur** über die Bad-Variable ein,

$$\hat{\rho}_S := \mathrm{Tr}_B \hat{\rho}_{SB} \equiv \sum_{i,j} |s_i\rangle\langle s_j| \sum_{\mu} \langle s_i\beta_\mu|\hat{\rho}_{AB}|s_j\beta_\mu\rangle \tag{1.36}$$

lässt sich () kurz und knapp formulieren

$$\langle \hat{A}_{SB}\rangle_{\rho_{SB}} = \mathrm{Tr}_S \hat{A}_S \hat{\rho}_S\,. \tag{1.37}$$

Man beachte, dass hier auf der rechten Seite nur noch von den Zuständen und Observablen von S die Rede ist. Das Bad ist in () eliminert worden – allerdings nicht ohne seinen Fußabdruck im reduzierten Dichteoperator $\hat{\rho}_S$ – dem Systemzustand – zu hinterlassen.