2. Beweisen Sie die folgenden Eigenschaften des Dichteoperators, der gegeben ist durch

$$\hat{\varrho} = \sum_r P_r \, |\psi_r\rangle\langle\psi_r| \quad \text{mit: } 0 \leq P_r \leq 1, \quad \sum_r P_r = 1; \quad \langle\psi_r|\psi_{r'}\rangle = \delta_{rr'}$$

a) $\hat{\varrho}^\dagger = \hat{\varrho}$ HERMITEzität

b) $\mathrm{Sp}\hat{\varrho} = 1$

c) $\langle\varphi|\hat{\varrho}|\varphi\rangle \geq 0 \quad \forall\, |\varphi\rangle$

d) $\hat{\varrho}^2 = \hat{\varrho}$ für reine Zustände; $\hat{\varrho}^2 \neq \hat{\varrho}$ für gemischte Zustände

e) Eigenwertproblem: $\hat{\varrho}\,|\phi_m\rangle = \varrho_m\,|\phi_m\rangle$ liefert
reelle Eigenwerte mit $0 \leq \varrho_m \leq 1$, $\sum_m \varrho_m = 1$ und orthonormierte Eigenzustände $\langle\phi_m|\phi_{m'}\rangle = \delta_{mm'}$

f) $\mathrm{Sp}\,\hat{\varrho}^2 < 1$ (falls mehr als ein Zustand in $\hat{\varrho}$ enthalten)

a) $$\hat{\rho}^\dagger = \sum_r \underbrace{P_r^*}_{=P_r \in \mathbb{R}} \underbrace{\left(|\psi_r\rangle\langle\psi_r|\right)^\dagger}_{=|\psi_r\rangle\langle\psi_r|} = \hat{\rho}$$

b) $$\mathrm{Sp}\,\hat{\rho} \underset{1.c)}{=} \sum_r P_r \underbrace{\mathrm{Sp}\,|\psi_r\rangle\langle\psi_r|}_{\underset{2.}{=}\langle\psi_r|\psi_r\rangle = 1} = \sum_r P_r = 1$$

c) $$\langle\varphi|\rho|\varphi\rangle = \sum_r \underbrace{P_r}_{\geq 0} \underbrace{\langle\varphi|\psi_r\rangle\langle\psi_r|\varphi\rangle}_{= \underbrace{|\langle\varphi|\psi_r\rangle|^2}_{\geq 0}} \geq 0$$

d) $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \Leftrightarrow \hat{\rho}$ reiner Zustand

"$\Rightarrow$" $\hat{\rho}^2 = \sum_{r,r'} p_r p_{r'} |\psi_r\rangle \underbrace{\langle\psi_r|\psi_{r'}\rangle}_{=\delta_{rr'}} \langle\psi_{r'}|$

$= \sum_r p_r^2 |\psi_r\rangle\langle\psi_r|$

$\stackrel{!}{=} \sum_r p_r |\psi_r\rangle\langle\psi_r| = \hat{\rho}$

$\underset{|\psi_r\rangle\langle\psi_r| \text{ linear unabhängig}}{\Rightarrow}$ $p_r^2 = p_r \Rightarrow p_r = 0$ oder $p_r = 1$

Da $\sum_r p_r \stackrel{!}{=} 1$ und $p_r \geq 0$ muss also genau ein $p_{r^*} = 1$ existieren

$\Rightarrow p_r = \begin{cases} 1 & \text{f. } r = r^* \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

$\Rightarrow \hat{\rho} = |\psi_{r^*}\rangle\langle\psi_{r^*}|$ reiner Zustand

„$\Leftarrow$" Sei $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ ein reiner Zustand.

Dann ist

$$\hat{\rho}^2 = |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{=1}\langle\psi|$$

$$= |\psi\rangle\langle\psi|$$

$$= \hat{\rho}$$

//

e) Wir zeigen: Erfüllt ein Operator $\hat{\rho}$ die Eigenschaften a), b) u. c), so lässt er sich notwendigerweise in der Form

$$\hat{\rho} = \sum_m \rho_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m| \quad , \quad 0 \leq \rho_m \leq 1, \ \sum_m \rho_m = 1,$$
$$\langle \phi_m | \phi_{m'} \rangle = \delta_{mm'}$$

schreiben

Beweis. Da $\hat{\rho}$ wegen a) hermitesch, ex. ein VONS von Eigenzuständen $\{|\phi_m\rangle\}$ so, dass

$$\hat{\rho}|\phi_m\rangle = \rho_m |\phi_m\rangle \quad , \quad \rho_m \in \mathbb{R}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{\rho} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Spektral-} \\ \text{darstellung}}}{=} \sum_m \rho_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m|$$

Wegen c) sind Eigenwerte nicht-negativ:

$$\rho_m = \langle\phi_m|\hat{\rho}|\phi_m\rangle \geq 0$$

Wegen b) ist

$$\sum_m \rho_m = \mathrm{Sp}\,\hat{\rho} = 1 \quad \Rightarrow \quad 0 \leq \rho_m \leq 1$$

f) $$\mathrm{Sp}\,\rho^2 \overset{d)}{=} \begin{cases} \mathrm{Sp}\,\hat{\rho} = 1 & \text{falls } \hat{\rho} \text{ reiner Zustand} \\ \mathrm{Sp}\left(\sum_r p_r^2 |\psi_r\rangle\langle\psi_r|\right) & \text{falls } \hat{\rho} \text{ gemischt} \end{cases}$$

$$\overset{\text{vgl. b)}}{=} \begin{cases} 1 & \text{falls } \hat{\rho} \text{ reiner ZS} \\ \sum_r p_r^2 < 1 & \text{falls } \hat{\rho} \text{ gemischter ZS} \end{cases}$$

4. Betrachten Sie im Folgenden ein Spin-1/2-Gemisch.

a) Zeigen Sie, dass sich dessen Dichteoperator $\hat{\varrho}$ stets durch eine Linearkombination aus Eins-Operator und den PAULIschen Spinmatrizen $\hat{\sigma}_i$ $(i = 1,2,3)$ darstellen lässt:

$$\hat{\varrho} = \frac{1}{2}\{\mathbf{1} + n_x\,\hat{\sigma}_x + n_y\,\hat{\sigma}_y + n_z\,\hat{\sigma}_z\}$$

Welche Bedingungen müssen die n_i erfüllen?

b) Berechnen Sie die Eigenwerte λ_1 und λ_2 von $\hat{\varrho}$.

Welcher Zusammenhang besteht zwischen der durch $\Pi \equiv \dfrac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2}$ definierten Polarisation des Gemisches und dem Vektor $\vec{n} = \sum_i n_i\,\vec{e}_i$?

c) Zeigen Sie, dass für die Erwartungswerte der drei PAULI-Matrizen in dem durch $\hat{\varrho}$ beschriebenen Zustand gilt: $\langle\hat{\sigma}_i\rangle = n_i$

a) b)

Spin - $\frac{1}{2}$ - Gemisch $\Rightarrow$ Zustände sind Superpositionen von $|\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ und $|\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

$\Rightarrow$ Dichtematrix hat Form

$$\hat{\rho} = \sum_{\sigma\sigma'} \rho_{\sigma\sigma'}\,|\sigma\rangle\langle\sigma'| = \begin{pmatrix}\rho_{\uparrow\uparrow} & \rho_{\uparrow\downarrow}\\ \rho_{\downarrow\uparrow} & \rho_{\downarrow\downarrow}\end{pmatrix}$$

Wegen Hermitezität, gilt: $\rho_{\uparrow\uparrow}, \rho_{\downarrow\downarrow} \in \mathbb{R}$

$$\rho_{\uparrow\downarrow} = \rho_{\downarrow\uparrow}^* = \underbrace{\rho'_{\uparrow\downarrow}}_{\in\mathbb{R}} + i\,\underbrace{\rho''_{\uparrow\downarrow}}_{\in\mathbb{R}}$$

$\Rightarrow \exists$ 4 unabhängige reelle Parameter

$\Rightarrow$ Raum d. Hermiteschen 2×2 Matrizen ist 4D

Eine mögliche Basis sind Pauli Matrizen:

$$\{ \sigma_0, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z \}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{\rho} = \rho_0 \sigma_0 + \rho_x \sigma_x + \rho_y \sigma_y + \rho_z \sigma_z$$

mit $\rho_0, \rho_x, \rho_y, \rho_z \in \mathbb{R}$

Wegen

$$1 = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho} = \rho_0 \underbrace{\mathrm{Tr}\, \sigma_0}_{=2} + \underbrace{\rho_x \underbrace{\mathrm{Tr}\, \sigma_x}_{=0} + \ldots + \rho_z \mathrm{Tr}\, \sigma_z}_{=0}$$

$$= 2 \rho_0$$

Verbleiben drei freie Parameter. Mit $\rho_i \equiv \frac{n_i}{2}$ folgt:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left(\sigma_0 + n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z \right)$$

Weiterhin muss $\hat{\rho}$ positiv semidefinit sein.
Dafür berechnen wir die Eigenwerte von $\hat{\rho}$.

Wir beobachten: Ist $|\lambda\rangle$ ein Eigenzustand von

$$\hat{r} := n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z \equiv \vec{n} \cdot \vec{\sigma}$$

zum EW λ, ist $|\lambda\rangle$ Eigenzustand von

$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \hat{r})$ zum Eigenwert $P_\lambda = \frac{1}{2}(1+\lambda)$.

Bestimme also EW von $\hat{r}$. Dafür betrachten wir:

$$\begin{aligned}\hat{r}^2 = \; & n_x^2 \sigma_x^2 + n_y^2 \sigma_y^2 + n_z^2 \sigma_z^2 \\ & + n_x n_y (\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x) \\ & + n_x n_z (\sigma_x \sigma_z + \sigma_z \sigma_x) \\ & + n_y n_z (\sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y)\end{aligned}$$

$$\underset{\substack{\{\sigma_i,\sigma_j\}=0 \\ i\neq j}}{\overset{\sigma_i^2=\mathbb{1}}{=}} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\mathbb{1} \equiv |\vec{n}|^2 \mathbb{1}$$

$\Rightarrow$ Eigenwertgleichung: $\hat{r}^2 |\lambda\rangle = \lambda^2 |\lambda\rangle \overset{!}{=} |\vec{n}|^2 |\lambda\rangle$

$$\Rightarrow \lambda_\pm = \pm |\vec{n}|$$

Eigenwerte von $\hat{\rho}$:

$$P_\pm = \frac{1}{2}\left(1 \pm |\vec{n}|\right)$$

Damit $0 \geq P_-$ muss $|\vec{n}| \leq 1$.

Falls $|\vec{n}| = 1$, ist $P_- = 0$ und

$$1 = \mathrm{Sp}\,\hat{\rho} = P_+ + P_- = P_+$$

$\Rightarrow$ $\hat{\rho} = |+\rangle\langle+|$ ist ein reiner Zustand

Polarisation:

$$\Pi \equiv \frac{P_+ - P_-}{P_+ + P_-} = |\vec{n}|$$

ist Länge von $|\vec{n}|$.

c) $\langle \hat{\sigma}_i \rangle = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\, \sigma_i)$

$$= \frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}\left(\mathbb{1}\,\sigma_i + \underbrace{(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})}_{=\sum_j n_j \sigma_j}\sigma_i \right)$$

$$= \frac{1}{2}\underbrace{\mathrm{Sp}(\sigma_i)}_{=0} + \frac{1}{2}\sum_j n_j\, \mathrm{Sp}(\sigma_j \sigma_i)$$

Die Summe im letzten Term liefert für $j = i$:

$$n_i \, Sp(\sigma_i \sigma_i) = n_i \, Sp(\mathbb{1}) = 2 n_i$$

und für $j \neq i$:

$$n_i \, Sp(\sigma_j \sigma_i) \underset{\{\sigma_i, \sigma_j\} = 0}{=} n_i \, Sp(-\sigma_i \sigma_j)$$

$$= -n_i \, Sp(\sigma_i \sigma_j)$$

$$\overset{1)d)}{=} -n_i \, Sp(\sigma_j \sigma_i) = 0$$

$$\Rightarrow \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{2} 2 n_i = n_i \quad //$$