# 10. System, Umgebung, Zustandsbegriff.

## 10.1 Dichtematrix

Def. $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$ $\rho \in M_N(\mathbb{C})$ heißt Dichtematrix, wenn

(i) $\rho = \rho^*$

(ii) $\rho \geq 0$ (d.h. $\forall v \in \mathcal{H}: \langle v | \rho v \rangle \geq 0$)

(iii) $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$.

Aus dem Spektralsatz folgt: $\rho$ hat EW $p_1, \dots, p_N$ mit zugehöriger ONB aus EV $\psi_1, \dots, \psi_N$, und

$$\rho = \sum_{k=1}^{N} p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \qquad \|\psi_k\| = 1 \quad \forall k$$

(ii) $\Longrightarrow$ $\forall k: \ p_k \geq 0$, denn $0 \leq \langle \psi_k | \rho \psi_k \rangle = \langle \psi_k | p_k \psi_k \rangle = p_k \langle \psi_k | \psi_k \rangle = p_k$.

(iii) $\Longrightarrow$ $\displaystyle\sum_{k=1}^{N} p_k = 1$, denn $\mathrm{Tr}\,\rho \stackrel{\wedge}{=} \displaystyle\sum_{k=1}^{N} \langle \psi_k | \rho \psi_k \rangle = \sum_{k=1}^{N} p_k$

die Spur kann in beliebiger ONB ausgewertet werden

## 10.2 System und Umgebung.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_U$$

(*) $|\Psi\rangle = |\Psi_S\rangle \otimes |\Psi_U\rangle$ gilt nur im einfachsten Fall, nämlich wenn keine Verschränkung besteht. Ansonsten:

Zustand des gesamten Systems $S \cup U$

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{ij} \, |i\rangle_S \otimes |j\rangle_U$$

wobei $\psi_{ij} \in \mathbb{C}$, $\{|i\rangle_S\}$ ONB von $\mathcal{H}_S$, $\{|j\rangle_U\}$ ONB von $\mathcal{H}_U$

und $\sum_{i,j} |\psi_{ij}|^2 = 1$ $\quad \begin{bmatrix} i \in \{1, \ldots, M\} \\ j \in \{1, \ldots, N\} \end{bmatrix}$

Typischerweise gilt:

- die Umgebung ist zu groß und zu kompliziert, um sie genau zu kennen.
- die Annahme, dass man S völlig von U isolieren kann (entsprechend (*)), ist oft eine unzureichende Idealisierung

10.3 Allgemeiner Zustandsbegriff

(10.3)

Was ist die effektive Beschreibung des Zustands, wenn man sich trotzdem nur für Messungen am System S interessiert (bzw. nur solche durchführen kann)?

auf S beschränkte Observable: $A \otimes \mathbb{1}$

wobei $A \in M_M(\mathbb{C})$, $\mathbb{1} \in M_N(\mathbb{C})$ [i.a. ist übrigens $\mathcal{H}_U$ nicht endlich dimensional...]

$$\langle \Psi | (A \otimes \mathbb{1}) \Psi \rangle = \sum_{i,j,k,l} \overline{\psi_{kl}} \psi_{ij} (\langle k| \otimes \langle l|)(A \otimes \mathbb{1}) |i\rangle \otimes |j\rangle$$

$$= \sum_{i,j,k,l} \overline{\psi_{kl}} \psi_{ij} \underbrace{\langle k|A|i\rangle}_{A_{ki}} \underbrace{\langle l|j\rangle}_{\delta_{lj}}$$

$$= \sum_{i,k=1}^{M} A_{ki} \underbrace{\sum_{l=1}^{N} \psi_{il} \overline{\psi_{kl}}}_{=: \rho_{ik}} \qquad \rho \in M_M(\mathbb{C})$$

$$= \mathrm{Tr}(\rho A) \quad (= \mathrm{Tr}(A\rho))$$

$\rho$ ist eine Dichtematrix.

Denn

(i) $$\overline{\rho_{ki}} = \overline{\sum_l \psi_{kl} \overline{\psi_{il}}} = \sum_l \psi_{il} \overline{\psi_{kl}} = \rho_{ik} \quad \text{also } \rho = \rho^*$$

(ii) $$\langle v | \rho v \rangle = \sum_{i,k} \overline{v_i} \rho_{ik} v_k = \sum_l \sum_{i,k} \overline{v_i} \overline{\psi_{il}} \psi_{kl} v_k$$

$$= \sum_l \underbrace{\overline{\sum_i \psi_{il} v_i}}_{\overline{w_l}} \underbrace{\sum_k \psi_{kl} v_k}_{w_l} = \sum_l |w_l|^2 \geq 0.$$

(iii) $$\mathrm{Tr}\,\rho = \sum_k \rho_{kk} = \sum_l \sum_k \psi_{kl} \overline{\psi_{kl}}$$

$$= \sum_{l,k} |\psi_{kl}|^2 = 1$$ wegen der Normierung von $|\Psi\rangle$.

Erinnerung: hatten bei der Konstruktion von Quantennetzwerken mit Hilfs-Qbits immer darauf geachtet, dass die Hilfs-Qbits am Ende nicht mit Ein- und Ausgaberegister verschränkt sind. Nur in diesem Fall hat man einen reinen Zustand, der durch ein $|\psi\rangle$ beschrieben wird, wie wir es in unseren Algorithmen verwendet haben.

Bem: Zustände bilden konvexe Menge.

Es ist überhaupt kein Problem, alles mit Dichtematrizen zu formulieren. Die Verschränkung, die beim Rechnen mit Qbits den entscheidenden Vorteil bringt, kann aber beim Messen am Ende sehr störend sein bzw. alles zunichte machen (Beispiele folgen).

## Fazit

Abgesehen von idealisierten isolierten Systemen beschreibt man Zustände besser durch Dichtematrizen.

Redefinition: Ein Zustand des quantenmechanischen Systems ist durch eine Dichtematrix (allg. Dichteoperator, bzw. allgemein ein positives normiertes lineares Funktional) $\rho$ gegeben.

Nach dem Spektralsatz entspricht so ein $\rho$ einer Folge von orthonormierten Vektoren: $\rho = \sum p_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$ , $\underbrace{p_k \geq 0, \sum p_k = 1}_{p_k \text{ sind Wahrscheinlichkeiten.}}$

Wenn eines der $p_k = 1$, alle anderen Null:

$\rho = |\psi_{k_0}\rangle\langle\psi_{k_0}|$ Projektor auf $|\psi_{k_0}\rangle$ "reiner Zustand"

Zustand im früheren Sinn.

ansonsten "gemischter Zustand".

<u>Bemerkung:</u> Der Begriff der Dichtematrix ist "robust" unter Einschränkung der Messungen auf Teilsysteme: wenn $\rho$ eine Dichtematrix auf $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ist, dann folgt

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2}\left(\rho\,(\underbrace{A_1}_{\text{Observable auf } \mathcal{H}_1} \otimes \mathbb{1})\right) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_1}(\rho_1 A_1)$$

wobei $\rho_1$ wieder eine Dichtematrix ist.

## 10.4 Von-Neumann-Entropie und Information

Def. Die von Neumann'sche Entropie eines Zustands $\rho$ ist

$$S(\rho) = -\operatorname{Tr}(\rho \log \rho)$$

Mit der Spektraldarstellung folgt

$$S(\rho) = -\sum_{k=1}^{N} p_k \cdot \log p_k$$

$\rightarrow$ $S(\rho)$ ist identisch zur Shannon'schen Informationsentropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung $p_1, \dots, p_N$.

$$S(\rho) \geq 0. \quad S(\rho) = 0 \iff \exists k_0 : p_{k_0} = 1,\ p_k = 0 \quad \forall k \neq k_0.$$

(reiner Zustand)

$$S(\rho) \text{ maximal} \iff \forall k \in \{1, \dots, N\}: p_k = \frac{1}{N}$$

(Gleichverteilung, also max. Ungewissheit über Ausgang)

## 10.5 Bellzustände

benannt nach John S. Bell; Basiszustände für den 2-Qbit-Raum.
Diese Zustände sind, im Gegensatz zu den gewöhnlichen Basiszuständen

$|xy\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \quad (x, y \in \{0,1\})$

"maximal" verschränkt.

$$|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle + |11\rangle\right)$$

$$|\phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle - |11\rangle\right)$$

$$|\psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|01\rangle + |10\rangle\right)$$

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|01\rangle - |10\rangle\right)$$ ("singlet-Zustand")

Die Zustände sind orthonormal. (nachrechnen!)

Die zugehörige Dichtematrix für das Subsystem bestehend aus Qbit 1 ist für alle diese Zustände

$$\rho = \frac{1}{2} \cdot \mathbb{1}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

d.h. maximale Entropie (deshalb "maximale Verschränkung").

z.B. $|\psi^-\rangle$: sei $A = A^* \in M_2(\mathbb{C})$:

$$\langle \psi^- | A \otimes \mathbb{1} | \psi^- \rangle = \frac{1}{2} \Big[ \langle 01 | A \otimes \mathbb{1} | 01 \rangle - \langle 01 | A \otimes \mathbb{1} | 10 \rangle - \langle 10 | A \otimes \mathbb{1} | 01 \rangle + \langle 10 | A \otimes \mathbb{1} | 10 \rangle \Big]$$

$$= \frac{1}{2} (A_{00} + A_{11}) = \frac{1}{2} \mathrm{Tr}(A)$$

$$\stackrel{!}{=} \mathrm{Tr}(\rho A) \quad \text{für jedes } A \implies \rho = \frac{1}{2} \mathbb{1}_2 .$$

Der Singletzustand $|\psi^-\rangle$ hat eine besondere Bedeutung, weil er experimentell gut realisierbar ist und man erstaunliche Folgerungen ziehen kann (EPR, ...)

Dies basiert auf den folgenden Eigenschaften

$$(\vec{\sigma} \otimes 1)|\psi^-\rangle = -(\mathbb{1} \otimes \vec{\sigma})|\psi^-\rangle \qquad \text{(nachrechnen!)}$$

wobei $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ der Vektor der Paulimatrizen ist,

und (als Folgerung daraus)

$$\langle \psi^- | (\vec{a}\cdot\vec{\sigma} \otimes \vec{b}\cdot\vec{\sigma})\, \psi^- \rangle = -\vec{a}\cdot\vec{b}$$

für beliebige $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}^3$.