damit können wir schreiben:

- $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_a \langle \psi | \hat{A} | a \rangle \langle a | \psi \rangle$

  $= \sum_a \langle a | \psi \rangle \langle \psi | \hat{A} | a \rangle = Sp(\hat{\varrho}(\psi) \hat{A})$

- $P_\psi(a) = \langle \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle = \sum_{a'} \langle \psi | a \rangle \langle a | a' \rangle \langle a' | \psi \rangle = Sp(\hat{\varrho}(\psi) \hat{\varrho}(a))$

→ es können also alle physikalischen Eigenschaften mit $\hat{\varrho}(\psi)$ ausgedrückt werden!

$\hat{\varrho}(\psi)$ – Eigenschaften: ((vgl. Ü21)) →
- $\hat{\varrho}^+ = \varrho$ ((folgt aus Spektraldarstellung))
- $Sp(\hat{\varrho}) = 1$ (($Sp(\hat{\varrho}) = \sum_a \langle a|\psi\rangle\langle\psi|a\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$))

((s.o.)) →
- $\hat{\varrho}^2 = \hat{\varrho}$ ((also ist $\hat{\varrho}$ "Projektionsoperator"))

Man kann allerdings nicht alle Systeme als reine Zustände beschreiben.

"Reibung" → ((z.B. Vielteilchensysteme bei denen Teilchen auch mit der Umgebung wechselwirken.))

→ solche Zustände werden gemischte Zustände genannt.

def.: wir finden einen reinen Zustand $|\psi_n\rangle$ nur mit der Wahrscheinlichkeit p_n, wobei $0 \le p_n \le 1$ und $\sum_n p_n = 1$.

$$\Rightarrow \hat{\varrho} \equiv \sum_n |\psi_n\rangle p_n \langle \psi_n|$$

$$\langle \hat{A} \rangle = Sp(\hat{\varrho}\hat{A}) = \sum_n \sum_a \langle a|\psi_n\rangle p_n \langle\psi_n|\hat{A}|a\rangle$$

$$= \sum_n p_n \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle \qquad (*)$$

→ wenn man $\hat{A}$-Eigenzustände für die Konstruktion von $\hat{\varrho}$ benutzt, d.h. $\hat{\varrho} = \sum_{a'} |a'\rangle p_{a'} \langle a'|$, gilt weiterhin:

$$(P_\psi(a) =) \; Sp(\hat{\varrho}\hat{\varrho}(a)) = Sp(\hat{\varrho}|a\rangle\langle a|) \overset{(*)}{=} \sum_{a'} p_{a'} \langle a'|a\rangle \underbrace{\langle a|a'\rangle}_{=\delta_{aa'}} = p_a \quad \checkmark \text{ def. OK}$$

$\hat{\varrho}$ – Eigenschaften:
- $\hat{\varrho}^+ = \hat{\varrho}$ ((Spektraldarst.))
- $Sp[\hat{\varrho}] = 1$ ((wg. $\sum_n p_n = 1$))

} Beweis in Ü21

- $\hat{\varrho}^2 = \sum_{n,m} |\psi_n\rangle p_n \underbrace{\langle\psi_n|\psi_m\rangle}_{=\delta_{nm}} p_m \langle\psi_m|$

  $= \sum_n |\psi_n\rangle p_n^2 \langle\psi_n|$

aus der letzten Eigenschaft folgt also

$$\Rightarrow \quad Sp(\hat{\varrho}^2) = \sum_{n,a} \langle a|\psi_n\rangle p_n^2 \langle\psi_n|a\rangle = \sum_n p_n^2 \leq \sum_n p_n = 1$$

also: $Sp(\hat{\varrho}^2) = 1 \Leftrightarrow$ es gibt nur eine einzige nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit, z.B. $p_j = 1$, $p_{n\neq j} = 0$, d.h. nur für einen reinen Zustand!

falls $Sp(\hat{\varrho}^2) < 1$, ist der Zustand also tatsächlich gemischt.

Bewegungsgleichung:

$$i\hbar\partial_t \hat{\varrho} = i\hbar\partial_t \sum_n |\psi_n\rangle p_n \langle\psi_n|$$
$$= \hat{H}\sum_n |\psi_n\rangle p_n \langle\psi_n| - \sum_n |\psi_n\rangle p_n \langle\psi_n|\hat{H}$$
$$= [\hat{H}, \hat{\varrho}]$$

Bem.:
- wird auch Von-Neumann-Gleichung genannt; Lsg: s. Ü20a
- gilt auch wenn $\hat{H} = \hat{H}(t)$ zeitabhängig
- beschreibt Zeitentwicklung des statist. Op.'s im Schrödinger-Bild

es folgt damit auch

$$i\hbar\partial_t \langle\hat{A}\rangle = i\hbar\partial_t \, Sp(\hat{\varrho}\hat{A}) = Sp([\hat{H},\hat{\varrho}]\hat{A})$$
$$= Sp(\hat{H}\hat{\varrho}\hat{A} - \hat{\varrho}\hat{H}\hat{A}) = Sp(\hat{\varrho}\hat{A}\hat{H} - \hat{\varrho}\hat{H}\hat{A})$$
$$= Sp(\hat{\varrho}[\hat{A},\hat{H}]) = \langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle$$

Sp zyklisch (s. Ü21a)

genau wie für reine Zustände: vgl. 5.34, Ehrenfest-Theorem

wesentlicher Unterschied zwischen reinen und gemischten Zuständen:

sei $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$ ein reiner Zustand

$$\Rightarrow \langle\psi| = \sum_m c_m^* \langle\psi_m|$$

$$\Rightarrow \hat{\varrho}(\psi) = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{n,m} c_m^* c_n |\psi_n\rangle\langle\psi_m|$$
$$= \sum_n |c_n|^2 |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$
$$+ \sum_{n\neq m} c_m^* c_n |\psi_n\rangle\langle\psi_m|$$

reelle Koeffizienten, wie die p_n "Diagonalterme"

komplexe Koeffizienten "Interferenzterme" sei $c_m^* c_n = |c_m^* c_n| \, e^{i\varphi}$

falls jetzt über den Phasenfaktor gemittelt wird, verschwinden die Interferenzterme: $e^{i\varphi} \to \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \; e^{i\varphi} = 0$

→ Dieses Phänomen nennt man Dekohärenz ("Information geht verloren").

Bem.: • Dekohärenz bringt uns von der QM zu einer "klassischen" statistischen Beschreibung, bei der komplexe Phasenfaktoren keine Rolle mehr spielen.

• man erhält am Ende einen gemischten Zustand, mit $p_n \equiv |c_n|^2$ und $\hat{\varsigma} = \sum_n |\psi_n\rangle p_n \langle \psi_n|$

3.5. Messprozess in der QM

vgl. z.B. [Münster §21] [Schwabl §20]

Messungen spielen eine spezielle Rolle in der QM; führen zu vielen "philosophischen" Problemen

Postulate der QM (V) (vgl. S. 29, 35)

(V) Wird an einem System im Zustand $|\psi\rangle$ die Observable $\hat{A}$ gemessen, und wird der Messwert a gefunden, so geht das System bei der Messung in den zugehörigen Eigenzustand $|a\rangle$ über (Zustandsreduktion).

warum ist dies problematisch?

• der Beobachter beeinflusst das System!
(was ist das? Mensch? Messgerät? einzelnes Atom? Strahlung?

• man benötigt zwei verschiedene Arten von Zeitentwicklungen: meistens die (deterministische!) Schrödinger-Glg., manchmal aber den (nicht-deterministischen!) Messprozess.