

Kap. 4: Einige Grundtatsachen der Quantenmechanik

Quantenmechanik = lineare Algebra + eine Differentialgleichung 1. Ordnung

- ★ Wie alles begann
- ★ Vektoren \rightarrow Hilbertraum
- ★ Operatoren im Hilbertraum
- ★ Dynamik: die Schrödingergleichung
- ★ Der zweidimensionale Hilbertraum: Einzelne Qubits und Spins
- ★ Zwei Qubits und die Dichtematrix
- ★ Verschränkung
- ★ Die Blochkugel
- ★ EPR-Korrelationen und Bellsche Ungleichung
- ★ Das No-Cloning-Theorem
- ★ Der Messprozess

Wie alles begann

- Wollaston 1802, Fraunhofer 1814, Bunsen und Kirchhoff 1859: Atome emittieren und absorbieren Licht mit charakteristischen Wellenlängen bzw. Frequenzen ν .

- Planck, Bohr, Einstein ca. 1900:

– Licht kommt in Quanten (*Photonen*), deren Energie proportional zur Frequenz ist:

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi}(2\pi\nu) = \hbar\omega$$

– Atome existieren nur in bestimmten *stationären* Zuständen mit bestimmten Energien. Die Differenzen dieser Energien sind die Energien der bei Übergängen absorbierten oder emittierten Lichtquanten.

- Schrödinger 1926:

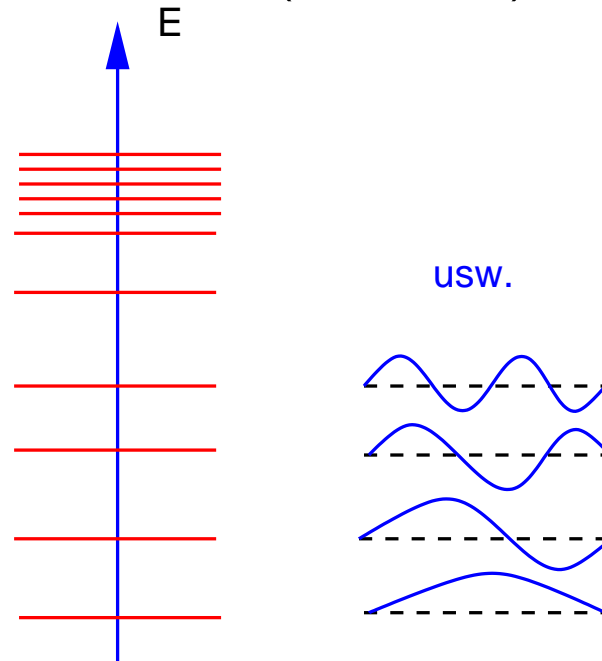
Zustände werden beschrieben durch *Wellenfunktionen*, deren zeitliche Entwicklung durch die *Schrödingergleichung* beschrieben wird. Die möglichen Energiewerte ergeben sich als Eigenwerte eines mit der Schrödingergleichung verknüpften Eigenwertproblems.

- Landau, Bloch 1927: *Dichtematrix* zur Beschreibung nicht abgeschlossener Systeme

Vektoren \rightarrow Hilbertraum

Systeme mit einer endlichen Anzahl von Teilchen in einem endlichen Raumbereich (z.B. intakte Atome) haben ein *diskretes Spektrum* von Energiewerten.

Analogie: Obertonspektrum einer gespannten (endlichen) Saite.



Es gibt auch ein kontinuierliches Spektrum. Wird ab sofort **vernachlässigt**.
(NB: Es wird sich noch früh genug lästig bemerkbar machen \rightarrow Dissipation, Dekohärenz.)

Annahme: Anzahl d der möglichen Zustände ist *endlich* \rightarrow mathematisch einfacher.
($d = 2$: Qubits.)

POSTULAT: Die Menge der möglichen Zustände bildet einen d -dimensionalen komplexen Vektorraum, den *Hilbertraum*.

- Stationäre Zustände eines Atoms kann man als Basisvektoren des Hilbertraums auffassen.
- Jede Linearkombination möglicher Zustände ist wieder ein möglicher Zustand. (Analogie: Überlagerung zweier möglicher Schwingungsformen)

In einem Vektorraum gibt es Skalarprodukte, eine Norm, etc.:

d -dimensionaler (Spalten-)Vektor: $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_d \end{pmatrix}$

entsprechender (Zeilen-)Vektor $(a_1^*, a_2^*, \dots, a_d^*)$ (*: komplexe Konjugation)

Physiker-Notation à la Dirac:

Spaltenvektor: $|a\rangle$ („Ket-Vektor“) Zeilenvektor: $\langle a|$ („Bra-Vektor“)

Skalarprodukt: $\langle a|b\rangle = \sum_{i=1}^d a_i^* b_i$

Norm: $\| |a\rangle \|^2 = \langle a|a\rangle > 0$

Es genügt, normierte Zustände $|\psi\rangle$ zu betrachten, also $\langle \psi|\psi\rangle = 1$. Außerdem sind die Zustände $|\psi\rangle$ und $e^{i\alpha}|\psi\rangle$ (α reell) physikalisch äquivalent: ein Phasenfaktor vor dem gesamten Zustand ist unwichtig. Hingegen sind *relative* Phasen zwischen Komponenten einer Zustands-Superposition *eminent* wichtig: $|\phi\rangle + |\psi\rangle$ und $|\phi\rangle + e^{i\alpha}|\psi\rangle$ können sehr verschiedene Eigenschaften haben.

Operatoren im Hilbertraum

Operatoren bilden einen Zustand (*linear*) auf einen anderen ab:

$d \times d$ -Matrizen mit komplexen Elementen, die auf dem d -dimensionalen Hilbertraum operieren.

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle$$

Besondere Klasse von Operatoren: *Observablen*, d.h. messbare Größen. Diesen entsprechen *selbstadjungierte* (oder auch *Hermitesche*) Matrizen, d.h. solche mit

$$\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}; \quad (\mathbf{A}^\dagger)_{ij} := (\mathbf{A})_{ji}^*$$

Ein *Eigenzustand* $|\phi_q\rangle$ (Eigenvektor) eines Operators \mathbf{Q} hat die Eigenschaft:

$$\mathbf{Q}|\phi_q\rangle = q|\phi_q\rangle$$

Die komplexe Zahl q heißt *Eigenwert*. Eigenwerte verschiedener Eigenzustände können gleich sein (Trivialbeispiel: $\mathbf{1}$); *Entartung*.

Selbstadjungierte Operatoren haben reelle Eigenwerte (Messgrößen!); ihre Eigenzustände sind paarweise orthogonal (cave Entartung), bilden also eine *Basis* im Hilbertraum.

$$\mathbf{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \quad (i = 1, \dots, d)$$

$$\langle a_i | a_j \rangle = 0 \text{ für } i \neq j$$

... und mit Normierung gilt

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij} \quad (\text{Kronecker-}\delta)$$

Eigenzustände und Eigenwerte beschreiben die Wirkung eines Operators vollständig, da ein beliebiger Zustand aus Eigenzuständen von \mathbf{A} linearkombiniert werden kann \rightarrow *Spektraldarstellung*.

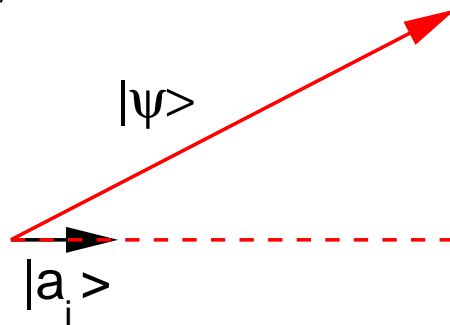
Weitere besondere Klasse von Operatoren: *Projekt(ionsoperat)oren*:

$$\mathbf{P}_i := |a_i\rangle\langle a_i|$$

Wirkung auf einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$

$$\mathbf{P}_i |\psi\rangle = |a_i\rangle \langle a_i | \psi \rangle = \underbrace{\langle a_i | \psi \rangle}_{\text{Zahl}} |a_i\rangle$$

$|\langle a_i | \psi \rangle|$: Länge der Projektion von $|\psi\rangle$ auf den Einheitsvektor $|a_i\rangle$:



Für orthonormierte $|a_i\rangle$ (d.h. $\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$) gilt

$$\mathbf{P}_i\mathbf{P}_j = \delta_{ij}\mathbf{P}_j; \text{ insbesondere } \mathbf{P}_i^2 = \mathbf{P}_i$$

(„Zweimal projizieren ist nicht besser als einmal.“)

Und da die \mathbf{P}_i „alle Richtungen“ des Hilbertraums erfassen:

$$\sum_{i=1}^d \mathbf{P}_i = \sum_{i=1}^d |a_i\rangle\langle a_i| = \mathbf{1}$$

(Vollständigkeitsrelation).

Das war Vorarbeit für *Spektraldarstellung* von \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^d a_i\mathbf{P}_i = \sum_{i=1}^d a_i|a_i\rangle\langle a_i|$$

Beliebiger Zustand wird nach Komponenten in Eigenrichtungen zerlegt, jede Komponente wird entsprechend behandelt.

Wunsch: Operator, der die stationären Zustände als Eigenzustände und die möglichen Energie-
werte als Eigenwerte besitzt.

Erfüllung: der **Hamiltonoperator** (Hamiltonian) \mathbf{H} .

POSTULAT: Eine **einzelne** *Messung* der Observablen \mathbf{A} im (normierten) Zustand $|\psi\rangle$ liefert einen der Eigenwerte a_i von \mathbf{A} , jeweils mit der Wahrscheinlichkeit $|\langle a_i|\psi\rangle|^2$ ($\sum_i |\langle a_i|\psi\rangle|^2 = 1$ wg. Normierung). Unmittelbar nach der Messung ist das System dann im (normierten) Zustand

$$\frac{\mathbf{P}_i|\psi\rangle}{\|\mathbf{P}_i|\psi\rangle\|}$$

Man spricht von der **Reduktion** oder dem **Kollaps** der Wellenfunktion.

Eine genaue Vorhersage des Ergebnisses einer Einzelmessung ist in der Regel nicht möglich. Eine **häufig wiederholte** bzw. an einem **Ensemble** von gleichartig präparierten Systemen durchgeführte Messung von \mathbf{A} ergibt den *Mittelwert* (Erwartungswert)

$$\langle \mathbf{A} \rangle := \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle$$

mit Schwankungen beschrieben durch die *Varianz*

$$\langle (\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle)^2 \rangle \geq 0 \quad („ = “ \text{ für Eigenzustand })$$

Beachte: Zwei verschiedene Arten von Messungen !

Dynamik: die Schrödingergleichung

POSTULAT: Die Zeitentwicklung eines Zustands $|\psi(t)\rangle$ genügt der („zeitabhängigen“) *Schrödingergleichung*

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}|\psi(t)\rangle$$

Mit dem Hamiltonoperator \mathbf{H} . Sei nun $|\phi_i\rangle$ dessen Eigenzustand mit Energieeigenwert ε_i :

$$\mathbf{H}|\phi_i\rangle = \varepsilon_i|\phi_i\rangle$$

(„zeitunabhängige Schrödingergleichung“). Dann ist

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\varepsilon_i t}{\hbar}\right)|\phi_i\rangle$$

eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung zur Anfangsbedingung

$$|\psi(t=0)\rangle = |\phi_i\rangle.$$

Offenbar tatsächlich ein *stationärer* Zustand: globaler Phasenfaktor hat keine Bedeutung. Da man einen beliebigen Anfangszustand $|\psi(t=0)\rangle$ aus den Eigenzuständen $|\phi_i\rangle$ von \mathbf{H}

linearkombinieren kann, ist das Anfangswertproblem (im Prinzip) gelöst.

Formale Schreibweise für diese Lösung des AWP (für **zeitunabhängiges H**):

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\mathbf{H}t}{\hbar}\right) |\psi(t=0)\rangle.$$

Dabei ist der *Zeitentwicklungsoperator* $\mathbf{U}(t) := \exp\left(-i\frac{\mathbf{H}t}{\hbar}\right)$ auf zwei Arten interpretierbar:

i) Potenzreihe

$$\exp\left(-i\frac{\mathbf{H}t}{\hbar}\right) = \mathbf{1} + \left(-i\frac{\mathbf{H}t}{\hbar}\right) + \frac{1}{2}\left(-i\frac{\mathbf{H}t}{\hbar}\right)^2 + \frac{1}{6}\left(-i\frac{\mathbf{H}t}{\hbar}\right)^3 + \dots$$

ii) Spektraldarstellung

$$\exp\left(-i\frac{\mathbf{H}t}{\hbar}\right) = \sum_{i=1}^d \exp\left(-i\frac{\varepsilon_i t}{\hbar}\right) |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$$

(NB: Für *zeitabhängige* $\mathbf{H}(t)$ ist $\mathbf{U}(t)$ als Lösung einer Operator-DGL zu berechnen; für ganz allgemeine Zeitabhängigkeit ist die Lösung nicht einmal für $d = 2$ bekannt.)

Die Eigenwerte $\exp\left(-i\frac{\varepsilon_i t}{\hbar}\right)$ von $\mathbf{U}(t)$ sind alle vom Betrag 1; solche Operatoren nennt man **unitär**. Unter der Wirkung eines unitären Operators \mathbf{U} bleiben alle Skalarprodukte erhalten, d.h. das Skalarprodukt von $|\psi\rangle$ und $|\chi\rangle$ ist gleich dem von $\mathbf{U}|\psi\rangle$ und $\mathbf{U}|\chi\rangle$; insbesondere bleiben

Normen erhalten. Unitäre Operatoren sind also „Drehungen“ im Hilbertraum.
Allgemeine Definition von Unitarität:

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{1} \Leftrightarrow \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}.$$

Für zeitunabhängiges \mathbf{H} gilt plausiblerweise:

$$(\mathbf{U}(t))^{-1} = \mathbf{U}(-t)$$

Unitäre Zeitentwicklung ist reversibel.

Zwei Arten von Zustandsänderungen:

- i) unitäre Zeitentwicklung: deterministisch und reversibel
- ii) Messung: probabilistisch und irreversibel.

Warum ist eine Messung etwas Anderes als ein beliebiger anderer physikalischer Prozess?

→ Messprozess.

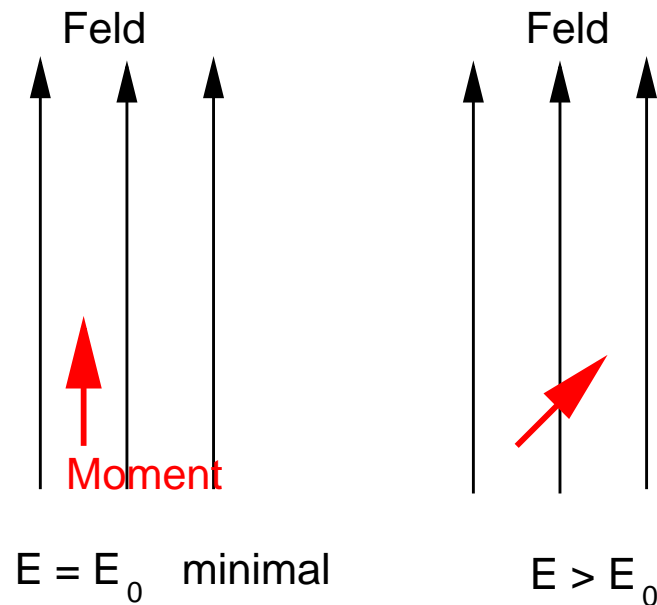
Der zweidimensionale Hilbertraum: Einzelne Qubits und Spins

Oft kann man ein System so kontrollieren, dass nur zwei Zustände eine Rolle spielen; z.B. Grundzustand (Zustand niedrigster Energie) und erster angeregter Zustand; manche Systeme (Spins $1/2$) können überhaupt nur zwei Zustände einnehmen. Aus Gründen der Analogie zu klassischen Bits ebenso wie aus solchen der Schreibökonomie (2×2 -Matrizen...) bieten sich solche Systeme für das Quantencomputing an.

Viele subatomare Teilchen besitzen einen **Spin** (Eigendrehimpuls), verknüpft mit einem *magnetischen Moment* (Elementardipol), das in einem äußeren Magnetfeld \vec{B} Zustände unterschiedlicher Energie einnehmen kann.

Im Gegensatz zu einem klassischen magnetischen Moment kann ein quantenmechanisches nur endlich viele Energiewerte in einem äußeren Feld annehmen, und damit nur endlich viele mögliche Richtungen zu \vec{B} .

(Klassisches) magnetisches Moment im Feld



Extremfall: „Spin- $1/2$ “-Teilchen (e^- , p^+ , n^0): nur zwei Einstellmöglichkeiten \Rightarrow zweidimensionaler Hilbertraum, mit Basisvektoren $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$; synonym $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$.

Nur vier Grundoperatoren in diesem Hilbert-
raum:

$$\mathbf{P}_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$$

$$\mathbf{P}_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$$

$$\mathbf{S}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle\langle\downarrow|$$

$$\mathbf{S}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle\langle\uparrow|$$

Physikalisch zweckmäßigere Kombinationen
dieser Operatoren sind die Folgenden:

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_{\uparrow} + \mathbf{P}_{\downarrow}$$

$$\mathbf{S}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\mathbf{P}_{\uparrow} - \mathbf{P}_{\downarrow})$$

$$\mathbf{S}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^+ + \mathbf{S}^-)$$

$$\mathbf{S}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{i}{2}(\mathbf{S}^- - \mathbf{S}^+)$$

$$\mathbf{S}_x^2 = \mathbf{S}_y^2 = \mathbf{S}_z^2 = \frac{1}{4}\mathbf{1}.$$

Mithilfe dieser „Spinmatrizen“ läßt sich der Hamiltonoperator eines (ortsfesten) Teilchens mit Spin 1/2 in einem äußeren Feld mit Komponenten B_x, B_y, B_z angeben:

$$\mathbf{H} = -\vec{B} \cdot \vec{S} = -(B_x \mathbf{S}_x + B_y \mathbf{S}_y + B_z \mathbf{S}_z).$$

\vec{B} hier in extrem unüblichen (teilchenspezifischen) Einheiten.

Ein paar kleine Fingerübungen: Der Anfangszustand sei $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Bestimme den Zeitentwicklungsoperator $\mathbf{U}(t)$ für den Fall eines \vec{B} -Feldes entlang einer der Koordinatenrichtungen $\alpha = x, y, z$.

$$\mathbf{U}(t) = \exp\left(-\frac{i\mathbf{H}t}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{iB_\alpha t}{2\hbar} \underbrace{2\mathbf{S}_\alpha}_{\text{Quadrat}=1}\right) = \cos\left(\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) \mathbf{1} + i \sin\left(\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) 2\mathbf{S}_\alpha.$$

Für $\alpha = z$ ist

$$\mathbf{U}(t) = \begin{pmatrix} \exp\left(i\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-i\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) \end{pmatrix} \Rightarrow |\psi(t)\rangle = \exp\left(i\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) |\psi(0)\rangle$$

also stationär; kein Wunder: Anfangszustand = Eigenzustand von \mathbf{S}_z (und damit von \mathbf{H}).

Anders $\alpha = x$:

$$\mathbf{U}(t) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) & i \sin\left(\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) \\ i \sin\left(\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) & \cos\left(\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) \end{pmatrix},$$

also

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) \\ i \sin\left(\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) \end{pmatrix} = \cos\left(\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) |\uparrow\rangle + i \sin\left(\frac{B_\alpha t}{2\hbar}\right) |\downarrow\rangle.$$

Durchläuft also periodisch ein Kontinuum von Zuständen : „Rotation im Hilbertraum“. ($\alpha = y$: ähnlich.)

Der allgemeinste Zustand eines **Qubits** ist eine beliebige normierte Linearkombination von $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$, z.B. parametrisiert durch zwei Winkel:

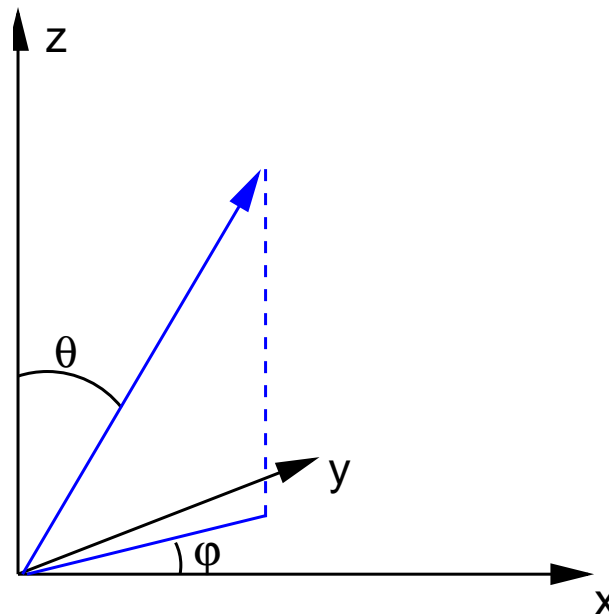
$$|\theta, \varphi\rangle = \exp\left(-i\frac{\varphi}{2}\right) \cos\frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + \exp\left(i\frac{\varphi}{2}\right) \sin\frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle \quad (0 \leq \theta \leq \pi; 0 \leq \varphi \leq 2\pi).$$

Das Qubit kann also zwei (beschränkte) reelle Zahlen speichern. Die Frage ist, wie man diese Information lesen / schreiben / manipulieren kann (\rightarrow Rest der Vorlesung).

Man rechnet leicht nach, dass obiges Qubit ein Eigenzustand zum Operator

$$\cos\theta \mathbf{S}_z + \sin\theta \cos\varphi \mathbf{S}_x + \sin\theta \sin\varphi \mathbf{S}_y$$

zum Eigenwert $+1/2$ ist. Man muss also „nur“ mit einem hinreichend starken Magnetfeld in der (θ, φ) -Richtung den Spin ausrichten, um das Qubit zu präparieren.



Zwei Qubits und die Dichtematrix

„Much that is weird and wonderful about quantum mechanics can be appreciated by considering the properties of the quantum states of two qubits.“ (John Preskill, Physics 229, Caltech 97/98)

Zwei Qubits und die Dichtematrix

„Much that is weird and wonderful about quantum mechanics can be appreciated by considering the properties of the quantum states of two qubits.“ (John Preskill, Physics 229, Caltech 97/98)

Quantensysteme der realen Welt koppeln immer an die „Umgebung“, die wir in aller Regel **nicht** in die quantenmechanische Betrachtung aufnehmen können / wollen: Wenn wir aber ein Quantensystem betrachten, welches in Wirklichkeit nur Teil eines größeren Systems ist, dann sind, im Gegensatz zu unseren bisherigen Glaubenssätzen

- Zustände **nicht** mehr Vektoren im Hilbertraum
- Messungen **nicht** mehr orthogonale Projektionen auf den Endzustand
- Zeitentwicklungen **nicht** mehr unitär.

Zwei Qubits und die Dichtematrix

„Much that is weird and wonderful about quantum mechanics can be appreciated by considering the properties of the quantum states of two qubits.“ (John Preskill, Physics 229, Caltech 97/98)

Quantensysteme der realen Welt koppeln immer an die „Umgebung“, die wir in aller Regel **nicht** in die quantenmechanische Betrachtung aufnehmen können / wollen: Wenn wir aber ein Quantensystem betrachten, welches in Wirklichkeit nur Teil eines größeren Systems ist, dann sind, im Gegensatz zu unseren bisherigen Glaubenssätzen

- Zustände **nicht** mehr Vektoren im Hilbertraum
- Messungen **nicht** mehr orthogonale Projektionen auf den Endzustand
- Zeitentwicklungen **nicht** mehr unitär.

Einfachstes Beispiel zur Veranschaulichung : ein Qubit A = „System“, zugänglich; ein Qubit B = „Umgebung“, unzugänglich.

$\{|\uparrow\rangle_A, |\downarrow\rangle_A\}$ und $\{|\uparrow\rangle_B, |\downarrow\rangle_B\}$ sind orthonormale Basen für die beiden Teilsysteme.

Ein **korrelierter** (verschränkter, entangled) Zustand von 2 Qubits:

$$|\psi\rangle = a|\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B + b|\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B.$$

Messung des Zustands (Projektion auf die A -Basis) an Qubit A liefert

$|\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B$ mit Wahrscheinlichkeit $|a|^2$

$|\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B$ mit Wahrscheinlichkeit $|b|^2$.

In beiden Fällen liegt nach der Messung an A der Zustand von B fest: **Verschränkung**.

Messe nun eine Observable, die *nur* auf A wirkt:

$$\mathbf{M}_A \otimes \mathbf{1}_B.$$

Erwartungswert davon im Zustand $|\psi\rangle$:

$$\langle \mathbf{M}_A \rangle = \langle \psi | \mathbf{M}_A \otimes \mathbf{1}_B | \psi \rangle =$$

$$\left[a_A^* \langle \uparrow | \otimes_B \langle \uparrow | + b_A^* \langle \downarrow | \otimes_B \langle \downarrow | \right] \mathbf{M}_A \otimes \mathbf{1}_B \left[a |\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B + b |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B \right] = \dots$$

$\mathbf{1}_B$ tut *nichts* an $|\dots\rangle_B$ -Zuständen; ${}_B\langle \uparrow | \downarrow \rangle_B = 0 \Rightarrow$ nur zwei Terme überleben.

$$\dots = |a|_A^2 \langle \uparrow | \mathbf{M}_A | \uparrow \rangle_A + |b|_A^2 \langle \downarrow | \mathbf{M}_A | \downarrow \rangle_A = \text{Tr} (|a|^2 \mathbf{P}_{\uparrow A} \mathbf{M}_A + |b|^2 \mathbf{P}_{\downarrow A} \mathbf{M}_A) =$$

$$= \text{Tr} ([|a|^2 \mathbf{P}_{\uparrow A} + |b|^2 \mathbf{P}_{\downarrow A}] \mathbf{M}_A) = \text{Tr} (\boldsymbol{\rho}_A \mathbf{M}_A)$$

Dabei sind

$$\mathbf{P}_{\uparrow A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{P}_{\downarrow A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Projektoren auf die \uparrow, \downarrow -Unterräume von A ; Tr : *Spur* (trace) = Summe der Diagonalelemente einer Matrix, also hier

$$\text{Tr } \mathbf{X} =_A \langle \uparrow | \mathbf{X} | \uparrow \rangle_A +_A \langle \downarrow | \mathbf{X} | \downarrow \rangle_A.$$

$$\boldsymbol{\rho}_A = |a|^2 \mathbf{P}_{\uparrow A} + |b|^2 \mathbf{P}_{\downarrow A} = \begin{pmatrix} |a|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{pmatrix}$$

ist der **Dichteoperator** (Dichtematrix); ist **hermitesch**, **positiv** und hat **Spur 1**.

Jeder Operator mit diesen Eigenschaften ist ein denkbarer Dichteoperator; ob er nun bezgl. der gerade gewählten Basis diagonal sei oder nicht !

Jeder Dichteoperator ist eine **Konvexkombination** von **eindimensionalen orthogonalen** Projektoren:

$$\boldsymbol{\rho} = \sum_i p_i \mathbf{P}_i, \quad p_i \geq 0, \quad \sum_i p_i = 1; \quad \text{Tr } \mathbf{P}_i = 1 \quad \mathbf{P}_i \mathbf{P}_j = \delta_{ij} \mathbf{P}_i$$

$$\Rightarrow \text{Tr } \boldsymbol{\rho}^2 = \sum_{i,j} p_i p_j \mathbf{P}_i \mathbf{P}_j = \sum_i p_i^2 \leq \sum_i p_i = 1$$

Gleichheit nur, wenn alle $p_i = 0$ oder 1 ($\Rightarrow p_i^2 = p_i$).

Dann ist $\boldsymbol{\rho}$ gleich *einem* eindimensionalen Projektor und es gilt $\boldsymbol{\rho}^2 = \boldsymbol{\rho}$.

Ist $\rho_A^2 = \rho_A$ (z.B. für $|a| = 1$ und $b = 0$ in unserem Beispiel, also einen **unverschränkten** Zustand), so ist ρ_A ein Projektor auf einen Hilbertraumvektor: *reiner* Zustand (sonst: *gemischter* Zustand, „inkohärente Superposition“).

Dann ist also $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ und damit

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \text{Tr } \rho \mathbf{A} = \text{Tr } |\psi\rangle\langle\psi| \mathbf{A} = \sum_i \langle i|\psi\rangle\langle\psi|\mathbf{A}|i\rangle = \sum_i \langle\psi|\mathbf{A}|i\rangle\langle i|\psi\rangle = \langle\psi|\mathbf{A}|\psi\rangle,$$

also das, was wir aus der „elementaren“ QM gewohnt sind.

Rückblick: $|\psi\rangle = a|\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B + b|\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B$ war ein Vektor im „großen“ Hilbertraum; beide Untersysteme korreliert (verschränkt, entangled). Bei Messung nur an A ist über alle Möglichkeiten für B zu summieren („partielle Spurbildung über Hilbertraum von B “).

Hier gehen die Phasen von a, b verloren und es bleiben die Wahrscheinlichkeiten $|a|^2, |b|^2$.

Der *allgemeinste unverschränkte* Zustand hat die Gestalt

$$|\phi\rangle = \left(a|\uparrow\rangle_A + b|\downarrow\rangle_A \right) \otimes \left(c|\uparrow\rangle_B + d|\downarrow\rangle_B \right), \quad |a|^2 + |b|^2 = |c|^2 + |d|^2 = 1.$$

Hier liefert Spurbildung über B (Übung!)

$$\rho_A = \begin{pmatrix} |a|^2 & b^*a \\ a^*b & |b|^2 \end{pmatrix} = \rho_A^2$$

also einen **reinen Zustand** (Übung: verifizieren!)

Die Phasen von a und b bleiben in den Nichtdiagonalelementen erhalten; deshalb heißen diese z.B. in der NMR auch **Kohärenzen**, während die Diagonalelemente aus naheliegenden Gründen **Populationen** heißen.

NB: Diese Unterscheidung hängt ab von der benutzten **Basis** im Hilbertraum; im Experiment gibt es aber oft eine „natürliche“ Basis.

Verlust der in den Phasen gespeicherten Information (welche die QM gegenüber einer „probabilistischen klassischen Mechanik“ auszeichnet) : Dekohärenz.

Typischer Verlauf:

Am Anfang sind System A und Umwelt B nicht verschränkt $\Rightarrow A$ („allein betrachtet“) ist in einem reinen Zustand.

Wechselwirkungen führen zu Verschränkung zwischen System und Umwelt $\Rightarrow A$ ist in einem gemischten Zustand.

Genauere Quantifizierung von Verschränkung bzw. Reinheit als ja/nein ist möglich; später.

Verschränkung

Verschränkung



Verschränkter Apfelkuchen:

Verschränkung



Verschränkter Apfelkuchen:



Verschränkung im Schrank:

Ein Zustand eines aus zwei Teilsystemen A und B bestehenden Systems heißt **verschränkt** (entangled), wenn er **nicht** als Produktzustand $|\psi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B$ dargestellt werden kann.

Es gibt **viele** Maße für die Verschränkung von Zuständen: für zwei oder mehr Untersysteme, reine und gemischte Zustände....

Zwei Qubits, reine Zustände:

$$|\chi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B + \beta |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B + \gamma |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B + \delta |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B$$

($|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$, Normierung). Definiere die **Concurrence** (Mitwirkung, Übereinstimmung, Zusammentreffen)

$$C := 2|\alpha\delta - \beta\gamma| \geq 0$$

Übungsaufgabe: Ist diese Größe abhängig von der Ein-Qubit-Basis? Schreibe den Zustand $|\chi\rangle$ um unter Benutzung der Basiszustände $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \pm |\downarrow\rangle)$ und drücke C aus durch die entsprechenden Entwicklungskoeffizienten.

Übungsaufgabe: $C \leq 1$; $C = 0 \Leftrightarrow |\chi\rangle$ ist ein Produktzustand.

Beispiel: $|\psi\rangle = a |\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B + b |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B$

Für diesen Zustand ist $C = 2|ab| = 2|a|\sqrt{1 - |a|^2} \leq 1$;
für $a = \pm b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ist $|\psi\rangle$ **maximal verschränkt**.

Die vier maximal verschränkten Zustände

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \pm |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B \right] \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B \pm |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \right]$$

heißen **Bell-Zustände**; sie bilden die **Bell-Basis** im Hilbertraum zweier Qubits. In **jedem** Bell-Zustand ergibt eine Messung eines einzelnen Qubits völlig zufällige Ergebnisse; die vier Zustände können durch Messungen an Einzel-Qubits **nicht** unterschieden werden.

Concurrence kann auf gemischte Zustände verallgemeinert werden.

***N* Qubits, reine Zustände:**

Definition für **globale Verschränkung** (Wei et al. ArXiv quant-ph/0405162) eines Zustands Ψ : durch den maximalen Überlapp mit einem Produktzustand

$$\Lambda_{max}(\Psi) = \max_{\Phi} |\langle \Phi | \Psi \rangle|$$

wobei Φ ein beliebiger (reiner) N -Qubit-Zustand sein kann. Die Verschränkung (E für entanglement) wird dann definiert durch entanglement as

$$E_{\log_2}(\Psi) = -\log_2 \Lambda_{max}^2(\Psi).$$

Diese Größe wird 0 für Produktzustände und 1 für $N = 2$ und Bell-Zustände; ebenso für die so genannten GHZ-Zustände.