Zusammenfassung der 3. Vorlesung (05.11.07)

1.2 *Klassische Wahrscheinlichkeit, Quantentheorie, Blochsphäre und Blochkugel* (Fortsetzung): Bei der Darstellung statistischer Mischungen von Zuständen in der Quantentheorie muss man zunächst bedenken, dass die reinen Zustände eindeutig durch die Klassen von Wellenfunktionen $[\psi] := \{\chi \in \mathcal{H} | \chi = e^{i\epsilon}\psi, \|\psi\| = 1\}$ dargestellt werden. Mit der Bezeichnung von Aufgabe 1 gilt dann mit $\lambda \in (0,1)$ für den Erwartungswert eines beschränkten selbstadjungierten Operators A auf $\mathcal{H}$ für das Gemisch $< \lambda, (1-\lambda); [\psi], [\varphi] >$

$$\begin{aligned} E_{<\lambda,(1-\lambda);[\psi],[\varphi]>}(A) &= \lambda E_{[\psi]}(A) + (1-\lambda) E_{[\varphi]}(A) \\ &= \lambda < \psi, A\psi > + (1-\lambda) < \varphi, A\varphi > . \end{aligned}$$

Bequemer ist es, die Erwartungswerte mit dem Spurfunktional auszudrücken. Ein linearer beschränkter Operator $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ gehört der Spurklasse an, falls für eine Orthonormalbasis $\{f_i\}$ von $\mathcal{H}$ gilt: $\sum < f_i, |T| f_i >< \infty$, wobei $|T| = \sqrt{T^+T}$ ist. Diese Sunmme ist von der gewählten Orthonormalbasis unabhägig, denn ist $\{g_i\}$ eine andere Orthonormalbasis, dann ist die aus $< f_i, g_k >$ gebildete Matrix unitär und $\sum < g_i, |T| g_i >= \sum_{i,j,k,} < g_i, f_j >< f_j, |T| f_k >< f_k, g_i >$
$= \sum_{j,k} < f_j, |T| f_k > \delta_{j,k}$. Hier genügt es, die selbstadjungierten Spurklasseoperatoren zu betrachten. Für diese gilt, dass $T = T_+ - T_-$, wobei $T_+ := (1/2)(|T| + T) \geq 0$ und $T_- := (1/2)(|T| - T) \geq 0$ ist und aus $|T| = T_+ + T_-$ folgt unmittelbar, dass die Summen $\sum < f_i, T_+ f_i >$, $\sum < f_i, T_- f_i >$ und $\sum < f_i, T f_i >$ endlich sind. Damit gehören auch T_+, T_- der Spurklasse an. Für einen (nicht notwendig selbstadjungierten) Spurklasseoperator R schreibt man $\mathrm{tr} R := \sum < f_i, R f_i >$ und nennt dies die Spur von R. Die Spur ist offenbar ein lineares Funktional. Ebenso zeigt man leicht, dass für drei Operatoren A, B und C gilt $\mathrm{tr}(ABC) = \mathrm{tr}(BCA) = \mathrm{tr}(CAB)$. Die

selbstadjungierten Spurklasseoperatoren bilden offenbar einen reellen Vektorraum, den man in Analogie zu den $\mathcal{L}^1$ Räumen mit $\mathcal{T}^1(\mathcal{H})$ bezeichnet.
Mit $\psi \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$ ist der Operator $|\psi><\psi| \in \mathcal{T}^1(\mathcal{H})$ und es gilt $<\psi, A\psi> = \mathrm{tr}(A|\psi><\psi|)$. In dieser Notation steht $|\psi><\psi|$ für die ganze Klasse $[\psi]$ und überdies steht mit $\lambda \in [0,1]$ der Operator $\lambda|\psi><\psi| +$
$(1-\lambda)|\varphi><\varphi|$ für $<\lambda, (1-\lambda); [\psi], [\varphi]>$, denn

$$\mathrm{tr}(A(\lambda|\psi><\psi|+(1-\lambda)|\varphi><\varphi|)) = \lambda\mathrm{tr}(A|\psi><\psi|)+(1-\lambda)\mathrm{tr}(A|\varphi><\varphi|).$$

Offenbar sind die Operatoren $|\psi><\psi|$ und mithin die Operatoren, die statistische Mischungen der $[\psi]$ darstellen, positive Spurklasseoperatoren deren Spur gleich eins ist. Wie man zeigen kann, sind die Elemente von $\mathcal{T}^1(\mathcal{H})$ kompakte Operatoren. Ihr Spekrum ist deshalb diskret und hat höchstens einen Häufungspunkt bei 0. Ist nun ρ ein positiver Spurklasseoperator und $\mathrm{tr}\rho = 1$, dann gilt $\rho = \sum \lambda_i |\chi_i><\chi_i|$, $<\chi_i, \chi_k> = \delta_{ik}$, $\lambda_i \geq 0$ und $\sum \lambda_i = 1$. ρ ist also ein statistisches Gemisch der $|\chi_i><\chi_i|$, wobei die Anzahl der Komponenten nicht endlich sein muss. Im letzteren Fall ist ρ Grenzwert der Partialsummen in Bezug auf die Norm $\|T\| = \sum <f_i, |T| f_i>$. $\mathcal{T}^1(\mathcal{H})$ ist mit dieser Norm vollständig, also ein Banachraum. Ferner kann man zeigen, dass für jeden beschränkten linearen Operator B auf $\mathcal{H}$ der Operator TB der Spurklasse angehört, wenn nur T diese Eigenschaft hat. Für jeden beschränkten Operator $B = B^+$ ist deshalb durch $\mathrm{tr}(B\cdot)$ ein reelles beschränktes lineares Funktional auf $\mathcal{T}^1(\mathcal{H})$ gegeben. Man kann zeigen, dass alle reellen beschränkten linearen Funktionale so darstellbar sind.
Wir fassen zusammen: Der Zustandsraum $\mathcal{X}$ der Quantentheorie ist $\mathcal{T}^1(\mathcal{H})$, er ist teilweise geordnet und der Kegel der positiven Spurklasseoperatoren ist erzeugend, d.h. $T = T_+ - T_-$. Die konvexe Zustandsmenge $\mathcal{D}$ ist die Menge der positiven Elemente ρ mit $\mathrm{tr}\rho = 1$, deren Elemente Dichteoperatoren heißen. Die reinen Zustände $|\psi><\psi|$ sind die Extremalpunkte von $\mathcal{D}$. Die Einheitskugel ist die konvexe Hülle von $\mathcal{D} \cup -\mathcal{D}$. $\mathcal{T}^1(\mathcal{H})$ ist mit der Spurnorm $\|T\| = \mathrm{tr}(|T|)$ vollständig (Banachraum). Der Dualraum der stetigen (beschränkten) linearen Funktionale $\mathcal{X}'$ besteht aus den Funktionalen $\mathrm{tr}(B\cdot)$,

wobei $B = B^+$ ein beschränkter Operator aus $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ ist (Observable). $\mathcal{X}'$ ist mit $\mathrm{tr}(A\cdot) \leq \mathrm{tr}(B\cdot) :\Leftrightarrow (\forall\rho \in \mathcal{D})\mathrm{tr}(A\rho) \leq \mathrm{tr}(B\rho)$ teilweise geordnet und mit der Supremuumsnorm $\|B\| = sup\{\mathrm{tr}(B\rho)|\rho \in \mathcal{D}\}$ ein Banachraum. Die Einheitskugel ist durch $-\mathrm{tr}(\mathbf{1}\cdot) \leq \mathrm{tr}(B\cdot) \leq \mathrm{tr}(\mathbf{1}\cdot)$ (bzw. $-\mathbf{1} \leq B \leq \mathbf{1}$) gegeben. Die Menge $0 \leq \mathrm{tr}(B\cdot) \leq \mathrm{tr}(\mathbf{1}\cdot)$ (bzw. $0 \leq B \leq \mathbf{1}$) hat eine besondere Bedeutung, auf die wir an späterer Stelle noch eingehen werden.

Für ein Qubit ist $\mathcal{D}$ mit einer Parametrisierung durch Kugelkoordinaten unter dem Namen Blochkugel bekannt. Diese erhält man auf folgende Weise: Schreibt man eine $\mathbf{C}^2$ Wellenfunktion in der Basis $|0>$, $|1>$, wobei $\sigma_z|0>=|0>$ und $\sigma_z|1>=-|1>$ ist, in der Form

$$\psi(\Theta,\Phi) = \cos(\frac{\Theta}{2})|0> + e^{i\Phi}\sin(\frac{\Theta}{2})|1>,$$

dann überzeugt man sich davon, dass durch

$$\begin{aligned} (0,\pi)\times[0,2\pi) &\ni (\Theta,\Phi) &&\longmapsto [\psi(\Theta,\Phi)] \\ (\Theta,\Phi) &= (0.0) &&\longmapsto [|0>] \\ (\Theta,\Phi) &= (\pi.0) &&\longmapsto [|1>] \end{aligned}$$

$(0,\pi)\times[0,2\pi)\cup\{(0,0)\}\cup\{(\pi,0)\}$ bijektiv auf die reinen Qubitzustände abgebildet wird. Ist $\mathbf{e}_i$, $i = x, y, z$ ein orthonormales Rechtssystem im euklidischen dreidimensionalen Raum und

$$\mathbf{e}(\Theta,\Phi) = \sin\theta\cos\Phi\mathbf{e}_x + \sin\theta\sin\Phi\mathbf{e}_y + \cos\Theta\mathbf{e}_z,$$

dann ist auch

$$\begin{aligned} (0,\pi)\times[0,2\pi) &\ni (\Theta,\Phi) &&\longmapsto \mathbf{e}(\Theta,\Phi) \\ (\Theta,\Phi) &= (0.0) &&\longmapsto \mathbf{e}_z \\ (\Theta,\Phi) &= (\pi.0) &&\longmapsto -\mathbf{e}_z \end{aligned}$$

eine Bijektion, und zwar von $(0,\pi)\times[0,2\pi)\cup\{(0,0)\}\cup\{(\pi,0)\}$ auf die Einheitsvektoren des euklidischen Raumes (bzw. auf die Einheitssphäre $\mathbf{S}^2$, gegeben. Durch Komposition erhält man eine Bijektion von $\mathbf{S}^2$ auf die Extremalpunmkte von $\mathcal{D}$ mit folgender physikalischer Bedeutung:

$$\begin{aligned}\mathbf{e}(\Theta,\Phi)\cdot\sigma &= \sin\theta\cos\Phi\sigma_x + \sin\theta\sin\Phi\sigma_y + \cos\Theta\sigma_z \\ &= \begin{pmatrix} \cos\Theta & e^{-i\Phi}\sin\Theta \\ e^{i\Phi}\sin\Theta & -\cos\Theta \end{pmatrix}\end{aligned}$$

ist der Operator der Spinprojektion auf $\mathbf{e}(\Theta,\Phi)$ und es gilt

$$\begin{aligned}\mathbf{e}(\Theta,\Phi)\cdot\sigma\psi(\Theta,\Phi) &= \psi(\Theta,\Phi) \\ \mathbf{e}(\Theta,\Phi)\cdot\sigma\psi(\pi-\Theta,\pi+\Phi) &= -\psi(\pi-\Theta,\pi+\Phi),\end{aligned}$$

wie man leicht nachrechnet. Die $\mathbf{S}^2$ mit dieser Korrespondenz, dass die Antipoden auf der durch θ und Φ bestimmten Achse den Eigenfunktionen des Operators der Spinprojektion auf $\mathbf{e}(\Theta,\Phi)$ entsprechen, heißt *Blochsphäre*. Sie verdeutlicht, wieviel reichhaltiger die Qubit Zustände als die Zustände des klassischen Bit sind, wenn man nur die reinen Zustände betrachtet.
In der nächsten Vorlesung werden wir die reinen Zustände als Dichteoperatoren schreiben und folgern, dass $\mathcal{D}$ affin und bijektiv auf die Blochkugel abgebildet wird.