Dichte matrix / Dichteoperator

Quantenmechanische Systeme können meist in verschiedenen Zuständen sein
Das bedeutet, dass der Hamiltonian in der Regel mehr als nur eine Eigenfunktion besitzt.
Ist dies der Fall, stellt sich die Frage, in welchem Zustand sich das System denn nun tatsächlich befindet, (das kann sogar durch Messung der Energie herausgefunden werden.)
Eigentlich stellt sich sogar noch die interessantere Frage, welcher Wahrscheinlichkeitsverteilung die Einzelzustände folgen, also mit welcher Wsk. sich das System im n-ten Zustand befindet.

Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung ist durch den Dichteoperator gegeben.
Die Wahrscheinlichkeiten der Einzelzustände (bsp n-te Zustand) sind <u>nicht</u> (nur) durch „klassische" QM bedingt (also nicht $|\psi_n|^2$!).

Angenommen man kennt die Wahrscheinlichkeit des n-ten Zustands $\forall n$, dann erhält man

die Wsk. des n-ten Zustands

$$\rho = \sum_n w_n \underbrace{|n\rangle\langle n|}$$

Projektionsoperator auf den n-ten Zustand

Es ergibt sich:

$$\mathrm{Tr}\,\rho = \sum_n \langle n|\rho|n\rangle = \sum_n \langle n|\Big(\sum_m |m\rangle w_m \underbrace{\langle m|\Big)|n\rangle}_{=\delta_{mn}} \overset{\langle n|n\rangle=1}{=} \sum_n w_n = 1$$

Für den Erwartungswert eines bel. Operators muss zusätzlich noch die durch ρ geg. Wsk-dichteverteilung berücksichtigt werden

$$\langle O\rangle = \mathrm{Tr}(\rho O) = \sum_n \langle n|\rho O|n\rangle = \sum_n w_n \langle n|O|n\rangle = \sum_n w_n \underbrace{O_n}$$

Erwartungswert von O im n-ten Zust.