

Dekohärenz

Die Dekohärenz der Zustandsfunktionen offener Quantensysteme ist zwar schon seit den zwanziger Jahren des vergangenen Jahrhunderts bekannt, findet aber erst seit den siebziger Jahren die angemessene Aufmerksamkeit in der Debatte über die Deutung der Quantentheorie. Wir entwickeln und vergleichen in diesem Aufsatz die grundlegenden Konzepte zur Beschreibung von Messungen an abgeschlossenen und an offenen Quantensystemen. Dabei wird der Dichteoperator eingeführt, und die Begriffe PVM und POVM werden erläutert. Auch das „Messproblem der Quantentheorie“ und das „Problem der bevorzugten Basis“ werden in diesem Zusammenhang diskutiert. Abschließend werden die wesentlichen Eigenschaften von Projektions- und Dichte-Operatoren untersucht.

Die große Bedeutung der Dekohärenz von Quantensystemen, die mit ihrer Umgebung verschränkt sind, wurde erstaunlich lange nicht wahrgenommen. Unser zentrales Ergebnis (35) findet sich bereits in §1, Gleichung (4) einer Veröffentlichung von Landau[1] aus dem Jahr 1927. Auch in den folgenden Jahrzehnten geriet dieser Sachverhalt nie in Vergessenheit. Ein typisches Beispiel dafür ist die ausführliche Diskussion des Zusammenhangs von Messung und Dekohärenz in den Kapiteln 19 und 20 des Lehrbuchs der Quantenmechanik von Gottfried [2]. Ein anderes Beispiel ist ein Zitat von Heisenberg aus dem Jahr 1955, das wir auf Seite 27 abdrucken werden. Aber erst in den siebziger und achtziger Jahren fand das Phänomen der Dekohärenz offener Quantensysteme seinen angemessenen Platz in der Debatte über die Deutung der Quantentheorie, beginnend mit einer Arbeit von Zeh [3] im Jahr 1970.

1 Abgeschlossene Quantensysteme

Der Zustand eines Quantensystems S wird durch die Zustandsfunktion $|\psi\rangle$ beschrieben. Die Zustandsfunktion ist ein Vektor im Hilbertraum \mathcal{H} . Zweckmäßigerweise wird sie auf Eins normiert: $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

Messbare Größen (Observable) werden durch hermitesche Operatoren repräsentiert. Wir betrachten den einfachen Fall einer Observablen Q , die nur diskrete Eigenwerte hat, und deren normierten Eigenvektoren $|q_j\rangle$ mit den Eigenwerten q_j ein Orthonormalsystem bilden, das den Hilbertraum \mathcal{H} aufspannt:

$$\text{Die } |q_j\rangle \text{ sind Eigenvektoren von } Q: \quad Q|q_j\rangle = q_j|q_j\rangle \quad (1a)$$

$$\text{Die } |q_j\rangle \text{ sind orthonormal:} \quad \langle q_k|q_j\rangle = \delta_{kj} \quad (1b)$$

$$\text{Die } |q_j\rangle \text{ sind vollständig:} \quad \sum_j |q_j\rangle\langle q_j| = 1 \quad (1c)$$

Wenn das System durch die Zustandsfunktion $|\psi\rangle$ beschrieben wird, und wenn diese Zustandsfunktion auf eins normiert ist, dann ist der Erwartungswert der Messgröße Q

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_\psi &= \langle \psi | Q | \psi \rangle = \sum_j \langle \psi | Q | q_j \rangle \langle q_j | \psi \rangle = \\ &= \sum_j q_j \underbrace{\langle \psi | q_j \rangle}_{a_j^*} \underbrace{\langle q_j | \psi \rangle}_{a_j} = \sum_j q_j |a_j|^2 = \sum_j q_j w_j. \end{aligned} \quad (2)$$

a_j ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude, und w_j ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass bei einer einzelnen Messung der Wert q_j beobachtet wird. Der Mittelwert $\langle Q \rangle_\psi$ wird bei den Messungen an einem großen Ensemble von Systemen erwartet, die alle im Zustand $|\psi\rangle$ präpariert wurden.

Die Messung produziert nicht nur einen Messwert, sondern sie präpariert zugleich einen neuen Zustand. Das System, das vor

der Messung der Observablen Q durch die Zustandsfunktion $|\psi\rangle$ beschrieben wurde, wird nach der Messung, falls der Eigenwert q_k gemessen wurde, durch die Zustandsfunktion $|q_k\rangle$ beschrieben. Man kann deutlicher schreiben:

$$\text{Dynamik I: } |\psi\rangle \xrightarrow{\text{Messung von } Q \text{ mit Ergebnis } q_k} |q_k\rangle \quad (3a)$$

w_k ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass bei einer bestimmten einzelnen Messung der Observablen Q der Wert q_k gemessen und das System im Zustand $|q_k\rangle$ präpariert wird, wenn es vor der Messung durch die Zustandsfunktion $|\psi\rangle$ beschrieben wurde. Die durch die Dynamik I beschriebene Messung ist ein nicht deterministisch erklärbarer, unstetiger, irreversibler Vorgang. Nur die Wahrscheinlichkeit w_k des Messergebnisses q_k ist berechenbar, aber man kann im allgemeinen nicht mit Sicherheit vorhersagen, welcher Messwert q_k bei einer bestimmten einzelnen Messung beobachtet werden wird.

Der Vorgang der Präparation von Zuständen hat seit der Entdeckung der Quantenmechanik für erhebliche Irritationen gesorgt. Denn Quantensysteme unterliegen dadurch zwei völlig unterschiedlichen Arten der Dynamik. Dynamik I: Eine Messung ändert den Zustand des Systems unstetig, irreversibel, indeterministisch, in unserem Beispiel von $|\psi\rangle$ nach $|q_k\rangle$. Dagegen beschreibt die

$$\text{Dynamik II: } \frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}H|\psi\rangle \quad (3b)$$

eine stetige, unitäre, reversible, deterministische Entwicklung des Zustands gemäß der Schrödinger-Gleichung. Die Irritation entsteht dadurch, dass es kein verbindliches Kriterium dafür gibt, ob ein Klumpen von Atomen als Messgerät zu betrachten ist, das eine unstetige Entwicklung gemäß Dynamik I = (3a) bewirkt, oder ob dieser Klumpen von Atomen als Quantensystem zu betrachten und seine Wechselwirkung mit dem untersuchten Objekt in den

Hamiltonoperator der stetigen Dynamik $\Pi = (3b)$ zu integrieren ist. Was qualifiziert einen Klumpen von Atomen dazu, als Messgerät anerkannt zu werden, dessen Wirkung durch Dynamik I beschrieben werden kann und muss?

2 Die Erfindung des „Messproblems“

Es war John v. Neumann, der nachdrücklich auf die beiden völlig unterschiedlichen Dynamiken (3) der Zustandsfunktionen von Quantensystemen hinwies, als er 1932 die erste mathematisch durchgearbeitete Darstellung [4] der jungen Quantenmechanik verfasste. Er schlug vor, sämtliche Objekte – auch makroskopische, einschließlich der Messgeräte – zumindest formal mit den Methoden der Quantentheorie zu beschreiben. Wenn das Messgerät den Wert q_k anzeigt, dann soll ihm nach v. Neumanns Messtheorie der Quantenzustand $|m_k\rangle$ zugeschrieben werden.

v. Neumann unterschied zwischen zwei Aspekten der Messung: Der eine Aspekt der Messung besteht darin, dass das untersuchte Quantensystem S , das sich im Zustand $|\psi\rangle = \sum_j a_j |q_j\rangle$ befindet, und das Messgerät M , das sich vor der Messung im Zustand $|m_0\rangle$ befindet, zusammengeführt werden, so dass sie aufeinander einwirken und einen gemeinsamen, kombinierten Quantenzustand bilden können:

$$\left. \begin{array}{l} |m_0\rangle \\ \sum_j a_j |q_j\rangle \end{array} \right\} \xrightarrow{\text{1. Aspekt}} \sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle \quad (4a)$$

Dieser Aspekt des Messprozesses erzeugt einen Zustand, in dem die Zustandsfunktionen des untersuchten Systems und des Messgeräts miteinander verschränkt sind. Wir werden weiter unten erklären, was mit diesem Begriff genau gemeint ist. Achtung: Mit (4a) wird keineswegs gesagt, dass die Zustandsfunktion $|\psi\rangle = \sum_j a_j |q_j\rangle$ des gemessenen Objekts unverändert bliebe. Im Gegenteil. Die

Zustandsfunktion $|\psi\rangle = \sum_j a_j |q_j\rangle$ ist vollständig aus der Welt verschwunden. Stattdessen gibt es jetzt eine Zustandsfunktion $\sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle$, die den gemeinsamen Zustand von Objekt und Messgerät darstellt.

Der Messprozess ist mit (4a) noch nicht vollständig beschrieben. Denn niemals zeigt ein Messgerät die Überlagerung unterschiedlicher, makroskopisch unterscheidbarer Messwerte q_j an. Es gibt noch den zweiten Aspekt der Messung: Die Zustandsfunktion wird auf den einfachen Zustand $|q_k\rangle |m_k\rangle$ reduziert, so dass der bestimmte Wert q_k vom Messgerät abgelesen werden kann:

$$\sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle \xrightarrow{\text{2. Aspekt}} |q_k\rangle |m_k\rangle \quad (4b)$$

Die als zweiter Aspekt beschriebene Änderung

$$a_j \xrightarrow{\text{2. Aspekt}} \begin{cases} 1 \text{ falls } j = k \\ 0 \text{ falls } j \neq k \end{cases}$$

wird als „Reduktion“ oder „Projektion“ oder „Kollaps“ auf den Zustand $|q_k\rangle |m_k\rangle$ bezeichnet. Die Reduktion ist der nicht deterministisch erklärbare, unstetige, irreversible Aspekt der Messung, der oben als Dynamik I bezeichnet wurde.

Warum tritt aber der Kollaps bei der Wechselwirkung mit einem Messgerät auf, jedoch nicht bei der Wechselwirkung mit einem anderen, beliebig komplexen Aggregat von Atomen? Wäre das komplexe Aggregat von Atomen kein Messgerät, dann würde der Vorgang bei (4a) stehenbleiben, und es fände kein Kollaps statt. Woran erkennt das untersuchte System, dass es sich jetzt um eine Messung handelt, und deshalb ein Kollaps fällig ist? Diese Frage wird als das „Messproblem der Quantentheorie“ bezeichnet.

v. Neumann wich mit seiner Darstellung des Messprozesses in entscheidender Weise von der „Kopenhagener Deutung“ [5] der Quantentheorie ab, die Bohr und Heisenberg 1927 erarbeitet hatten. In

der Sichtweise der Kopenhagener Deutung müssen der Aufbau und Ablauf eines Experiments zur Beobachtung eines Quantenphänomens, die dabei verwendeten Messgeräte, und die dabei gewonnenen Ergebnisse, allesamt in der Sprache und mit den Begriffen der klassischen Physik beschrieben werden. Und zwar von Anfang an, nicht erst nach einem „Kollaps“. Weil Messgeräte grundsätzlich klassisch beschrieben werden, kann nach Kopenhagener Auffassung niemals die Frage auftreten, welche der beiden Dynamiken (3) zu ihrer Beschreibung anzuwenden sei: Weder die eine, noch die andere, denn Messgeräte sind per Definition niemals als Quantensysteme zu betrachten. Das „Messproblem“ ist demnach ein hausgemachtes Problem, das v. Neumann selbst erzeugt hat, indem er den Anwendungsbereich der Quantentheorie – entgegen der aus Kopenhagen gelieferten Gebrauchsanleitung – auf die Messgeräte erweiterte.

v. Neumann war nicht der einzige, der sich mit den Postulaten der Kopenhagener Deutung nicht zufrieden geben wollte. Schließlich ist unbestritten, dass auch Messgeräte Systeme sind, die aus Atomen zusammengesetzt sind. Die Unterscheidung zwischen Messgeräten, die grundsätzlich klassisch zu beschreiben sind, und anderen, mehr oder weniger komplexen Aggregaten von Atomen und Molekülen, die quantentheoretisch beschrieben werden können (und zuweilen auch müssen), erscheint vielen Forschern als willkürlich und unbefriedigend. Wenn man aber beliebige makroskopische Gegenstände zunächst als – wenn auch möglicherweise ziemlich komplexe – Quantensysteme betrachten und beschreiben will, dann muss man eine Erklärung für die Reduktion (4b) ihres Zustandsvektors finden. Denn es lässt sich nicht bestreiten, dass Messgeräte und andere makroskopische Gegenstände niemals in Überlagerungszuständen der Art (4a) beobachtet werden.

Die Alternativ-Vorschläge zur Kopenhagener Deutung, die in den folgenden Jahrzehnten zur Erklärung der Zustands-Reduktion (4b) gemacht wurden, können im Wesentlichen in vier Gruppen

eingeteilt werden:

- * Es gibt von vornherein überhaupt keinen objektiven Unterschied zwischen Messgeräten und anderen Aggregaten von Atomen. Also gibt es von vornherein auch keinen Kollaps, sondern die Entwicklung bleibt bei (4a) stehen. Wenn allerdings ein Mensch seinen Blick auf den Zeiger des Messgeräts wirft, dann nimmt er einen ganz bestimmten Messwert wahr. Also ist das Hinzukommen des Menschen der entscheidende Faktor, der den Kollaps bewirkt. Weil aber auch die optische Wechselwirkung zwischen dem Messgerät und dem Auge des Menschen, sowie die Reizleitung von der Retina zu seinem Gehirn den Gesetzen der Quantentheorie unterliegen sollte, bleibt letztlich nur noch das Bewusstsein des Menschen als möglicher Faktor, der den Kollaps bewirken kann. Dies war die Erklärung, die v. Neumann in seinem Buch [4] vertrat. Demnach existiert ein Messergebnis zufolge v. Neumann nicht als eine objektive Tatsache in der „Außenwelt“, sondern nur im Bewusstsein eines Menschen. Er formulierte das folgendermaßen: „Die Erfahrung macht nur Aussagen von diesem Typus: ein Beobachter hat eine bestimmte (subjektive) Wahrnehmung gemacht, und nie eine solche: eine physikalische Größe hat einen bestimmten Wert“ [4].
- * Modifikationen der Quantentheorie, durch die der Kollaps von Zustandsfunktionen formal in die Theorie eingebaut wird: Es wurden zusätzliche Faktoren in die Quantentheorie eingebaut, die zu zufälligen Zeitpunkten den Kollaps von Zustandsfunktionen bewirken. Diese Faktoren sind so konstruiert, dass sie den Kollaps um so häufiger bewirken, je komplexer und/oder schwerer ein Quantensystem ist. Detailliert ausgearbeitet wurde dieser Ansatz von Ghirardi, Rimini, und Weber [6].
- * Modifikationen der Quantentheorie, die keinen Kollaps von Zustandsfunktionen benötigen, weil Quantensysteme sich niemals in einem Überlagerungs-Zustand der Art (4a) befinden. Die Fä-

higkeit zur Interferenz mit anderen Quantenobjekten und/oder mit sich selbst erhalten Quantenobjekte in diesen modifizierten Theorien durch zusätzliche, nicht-materielle Führungsfelder oder ähnliche „verborgene Variablen“: Prominentestes Beispiel ist de Broglie’s Konzept der Pilotwelle [7], das von Bohm [8] umformuliert und weiterentwickelt wurde.

- * Everett’s „viele Welten“-Interpretation [9]: In dieser Interpretation findet kein Kollaps statt, obwohl jede Messung (und jede andere Wechselwirkung) Überlagerungs-Zustände der Form (4a) erzeugt. Vielmehr folgt auf (4a) im nächsten Schritt die Ableitung des Messgeräts durch den Beobachter, die als „Messung des Messgeräts“ bezeichnet werden kann:

$$\left. \sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle \right\} \xrightarrow{\text{1. Aspekt}} \sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle |b_j\rangle \quad (5)$$

Auch der menschliche Beobachter ist nach Everett’s Interpretation als Quantensystem zu betrachten. Bevor er das Messgerät abliest, ist sein Zustand $|b_0\rangle$. Nachdem er das Messergebnis zur Kenntnis genommen hat, befindet er sich im verschränkten Zustand der rechten Seite von (5). Die j -Komponente seines Bewusstseins nimmt das Messergebnis q_j wahr, die k -Komponente seines Bewusstseins das Messergebnis q_k , und so weiter. Die genauere Untersuchung zeigt, dass keinerlei Kommunikation zwischen den verschiedenen Komponenten des Bewusstseins des Beobachters möglich ist. Mit jeder Komponente seines Bewusstseins nimmt der Beobachter ein eindeutiges Ergebnis wahr und weiß nicht, dass er mit den unendlich vielen anderen Komponenten seines Bewusstseins („in unendlich vielen anderen Welten“) unendlich viele andere Ergebnisse feststellt. So bizarr diese Deutung auch ist, scheint sie doch mit allen beobachtbaren Fakten in Einklang zu stehen.

Die zweite und dritte Alternative modifizieren den Formalismus der Theorie, während die erste und vierte Alternative lediglich die gleichen Formeln anders interpretieren als die Kopenhagener Deutung. Drei der vier Alternativen stimmen in allen experimentell überprüfbareren Vorhersagen mit der Kopenhagener Deutung überein. Nur im Fall des von Ghirardi, Rimini, und Weber eingeführten stochastisch getriggerten Kollaps könnten sich mithilfe verbesserter Experimentiertechnik in Zukunft bei mesoskopischen Systemen beobachtbare Abweichungen ergeben.

Heisenberg prägte den Begriff „Schnitt“, um den diskontinuierlichen Übergang zwischen dem quantentheoretisch beschriebenen Teil und dem klassisch beschriebenen Teil der Welt zu betonen. Nach der Kopenhagener Deutung ist der Schnitt in weiten Bereichen verschieblich, allerdings nicht unbegrenzt. Quantensysteme wie Atome oder Moleküle müssen auf jeden Fall quantentheoretisch beschrieben werden. Auf der anderen Seite müssen menschliche Beobachter (inklusive ihres Bewusstseins), sowie die zur Beobachtung von Quantenphänomenen verwendeten Messgeräte, soweit sie sich offensichtlich (dieser Begriff ist an dieser Stelle wörtlich zu verstehen!) klassisch verhalten, auf jeden Fall klassisch beschrieben werden. Tatsächlich schaltet man aber zur Beobachtung eines Quantenphänomens in der Regel mehrere Verstärker hintereinander. Dann ist es nach Kopenhagener Verständnis im Prinzip egal, an welcher Stelle der Kaskade von Geräten man den Schnitt zwischen quantentheoretischer und klassischer Beschreibung platziert.

v. Neumann verschob den Schnitt über die offensichtlich klassischen Messgeräte (z.B. das menschliche Auge) hinaus bis zur Grenzlinie(?) zwischen(?) Gehirn und Bewusstsein des Menschen, wo sie für die physikalische wie philosophische Analyse praktisch unfassbar wird. Everetts Sichtweise ist wesentlich einfacher als v. Neumanns, und sogar wesentlich einfacher als die Kopenhagener Sichtweise. Sie verzichtet auf einen Schnitt und beschreibt alles

und jedes im Universum in gleicher (quantentheoretischer) Weise. Sie macht sogar das menschlichen Bewusstsein zu einem gewöhnlichen Objekt der Physik, das den Gesetzen der Quantentheorie unterliegt.

3 Projektions-Operatoren und die Spur

Zur Vorbereitung der Definition und Diskussion der Dekohärenz offener Quantensysteme sind zunächst einige formale Klärungen erforderlich. Wir greifen nochmals (1) auf:

$$\text{Die } |q_j\rangle \text{ sind Eigenvektoren von } Q: \quad Q|q_j\rangle = q_j|q_j\rangle \quad (6a)$$

$$\text{Die } |q_j\rangle \text{ sind orthonormal:} \quad \langle q_k|q_j\rangle = \delta_{kj} \quad (6b)$$

$$\text{Die } |q_j\rangle \text{ sind vollständig:} \quad \sum_j |q_j\rangle\langle q_j| = 1 \quad (6c)$$

Auf der linken Seite von (6c) steht die Summe der Projektoren

$$P_j \equiv |q_j\rangle\langle q_j| \quad \sum_j P_j = 1 \quad (7)$$

auf die Zustände $|q_j\rangle$. Weil $\sum_j P_j$ ein Operator ist, ist auch die 1 auf der rechten Seite der Gleichung ein Operator. Es handelt sich um den „Identitäts-Operator“, der jede Zustandsfunktion, auf die er wirkt, unverändert lässt. Jede beliebige Zustandsfunktion ist eine Eigenfunktion des Operators 1 mit dem Eigenwert 1:

$$1|\phi\rangle = 1|\phi\rangle \quad (8)$$

Mit dem Projektor $P_j = |q_j\rangle\langle q_j|$ und einem beliebigen System $|s\rangle$ von orthonormalen Zustandsfunktionen, die den Hilbertraum aufspannen, lässt sich die in (2) definierte Wahrscheinlichkeit w_j umformulieren:

$$\begin{aligned}
 w_j &= \langle \psi | q_j \rangle \langle q_j | \psi \rangle = \sum_s \langle \psi | s \rangle \langle s | q_j \rangle \langle q_j | \psi \rangle = \\
 &= \sum_s \langle s | q_j \rangle \langle q_j | \psi \rangle \langle \psi | s \rangle = \text{Sp} \{ P_j | \psi \rangle \langle \psi | \} \quad (9)
 \end{aligned}$$

Weil die Skalarprodukte $\langle | \rangle \in \mathbb{C}$ kommutierende Zahlen sind, durfte das Produkt umgeordnet werden. Die Summe der Diagonalelemente einer Matrix wird als Spur bezeichnet. w_j ist die Spur des Produktes der beiden Projektoren $P_j = |q_j\rangle\langle q_j|$ und $|\psi\rangle\langle\psi|$.

Man kann den erwarteten mittleren Messwert einer Observablen Q auch mithilfe der Spur berechnen:

$$\begin{aligned}
 \langle Q \rangle_\psi &= \langle \psi | Q | \psi \rangle = \sum_s \langle \psi | Q | s \rangle \langle s | \psi \rangle = \sum_s \langle s | \psi \rangle \langle \psi | Q | s \rangle \\
 \boxed{\langle Q \rangle_\psi &= \text{Sp} \{ P_\psi Q \} \quad \text{mit} \quad P_\psi \equiv |\psi\rangle\langle\psi|} \quad (10)
 \end{aligned}$$

Diese Formulierung erscheint zwar zunächst unnötig umständlich (und ist es auch), sie wird aber eine sehr nützliche Verallgemeinerung zur Beschreibung offener Systeme erlauben.

Im jeweils letzten Term von (9) oder (10) ist nicht mehr erkennbar, dass die Spur mit den Basisvektoren $|s\rangle$ gebildet wurde. Das ist auch nicht erforderlich, weil sich mit jedem beliebigen System von Vektoren $|t\rangle$, die die Vollständigkeitsrelation $\sum_t |t\rangle\langle t| = 1$ erfüllen, für beliebige Operatoren A die gleiche Spur ergibt:

$$\begin{aligned}
 \text{Sp} \{ A \} &= \sum_t \langle t | A | t \rangle = \sum_{t,s} \langle t | s \rangle \langle s | A | t \rangle = \\
 &= \sum_{t,s} \langle s | A | t \rangle \langle t | s \rangle = \sum_s \langle s | A | s \rangle \quad (11)
 \end{aligned}$$

Wir nennen zwei weitere Eigenschaften der Spur, die oft nützlich sind. Erstens bleibt die Spur unverändert, wenn beliebige Operato-

ren A, B, C unter der Spur zyklisch vertauscht werden:

$$\begin{aligned} \text{Sp}\{ABC\} &= \sum_{s,t} \langle s|AB|t\rangle \langle t|C|s\rangle = \\ &= \sum_{s,t} \langle t|C|s\rangle \langle s|AB|t\rangle = \text{Sp}\{CAB\} \end{aligned} \quad (12)$$

Man beachte, dass der Trick nur bei zyklischer Vertauschung funktioniert,

$$\text{Sp}\{ABC\} \neq \text{Sp}\{BAC\} . \quad (13)$$

Zweitens ist

$$\text{Sp}\{|a\rangle\langle b|\} = \sum_s \langle s|a\rangle \langle b|s\rangle = \sum_s \langle b|s\rangle \langle s|a\rangle = \langle b|a\rangle . \quad (14)$$

Daraus folgt insbesondere, dass die Spur des Projektors $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ gleich der Norm $\langle\psi|\psi\rangle$ des Zustands ist, auf den er projiziert.

Ohne es ausdrücklich zu sagen haben wir bisher angenommen, dass es keine unkontrollierte Wechselwirkung zwischen dem System S und der Umgebung gibt. Systeme, für die diese Annahme zutrifft, werden als abgeschlossen bezeichnet. Umgekehrt sind offene Systeme dadurch charakterisiert, dass es zwischen ihnen und ihrer Umgebung Wechselwirkungen gibt, die allenfalls teilweise kontrolliert werden. Um das Konzept der Dekohärenz einführen zu können, müssen wir unsere Untersuchung auf offene Quantensysteme erweitern.

4 Offene Quantensysteme und Dichteoperatoren

Im Folgenden betrachten wir ein offenes Quantensystem S , das Teil eines abgeschlossenen Quantensystems S_W ist, siehe Abbildung 1 auf der nächsten Seite. S_W ist aus den beiden Teilsystemen S

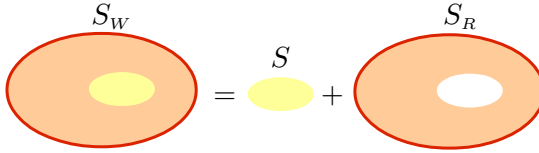


Abb. 1: Das System $S_W = S + S_R$

und S_R zusammengesetzt. W bedeutet „Welt“. Gemeint ist das aus dem gesamten Universum bestehende Quantensystem, das wir als abgeschlossen betrachten. Der physikalisch wie philosophisch gleichermaßen schwierigen Frage, ob das Universum wirklich ein abgeschlossenes System ist (besser gesagt: der Frage, ob überhaupt ein abgeschlossenes System existiert), gehen wir hier nicht nach. S ist das Quantensystem, das wir untersuchen und beschreiben wollen, S_R ist der „Rest der Welt“. Die Zustandsfunktionen $|\psi_W\rangle$ des abgeschlossenen Systems S_W sind Elemente des Hilbertraums

$$\mathcal{H}_W = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_R, \quad (15)$$

der das direkte Produkt der Hilberträume \mathcal{H} und \mathcal{H}_R ist. Es sei $|s\rangle$ eine Orthonormalbasis des Hilbertraums \mathcal{H} und $|r_R\rangle$ eine Orthonormalbasis des Hilbertraums \mathcal{H}_R , so dass jeder Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ in der Form

$$|\psi\rangle = \sum_s |s\rangle \langle s|\psi\rangle = \sum_s c_s |s\rangle \quad (16)$$

und jeder Vektor $|\psi_R\rangle \in \mathcal{H}_R$ in der Form

$$|\psi_R\rangle = \sum_r |r_R\rangle \langle r_R|\psi_R\rangle = \sum_r d_{Rr} |r_R\rangle \quad (17)$$

entwickelt werden kann. Das Tensorprodukt dieser beiden Vektoren ist

$$|\psi\rangle \otimes |\psi_R\rangle = \sum_s \sum_r c_s d_{Rr} |s\rangle \otimes |r_R\rangle \in \mathcal{H}_W. \quad (18)$$

Das Skalarprodukt dieses Produktvektors mit dem Produktvektor

$$|\phi\rangle \otimes |\phi_R\rangle = \sum_s \sum_r e_s f_{Rr} |s\rangle \otimes |r_R\rangle \in \mathcal{H}_W \quad (19)$$

ist definiert als

$$\begin{aligned} \langle\psi| \otimes \langle\psi_R|\phi\rangle \otimes |\phi_R\rangle &= \langle\psi|\phi\rangle \langle\psi_R|\phi_R\rangle = \\ &= \sum_{s,s'} \sum_{r,r'} c_s^* d_{Rr}^* e_{s'} f_{Rr'} \underbrace{\langle s|s'\rangle}_{\delta_{ss'}} \underbrace{\langle r|r'\rangle}_{\delta_{rr'}} = \sum_s \sum_r c_s^* d_{Rr}^* e_s f_{Rr} . \end{aligned} \quad (20)$$

Zur Berechnung des Tensorprodukts werden also zunächst jeweils systemweise die Teilprodukte in S und S_R berechnet.

Nicht jeder Zustandsvektor in \mathcal{H}_W kann als direktes Produkt eines Vektors in \mathcal{H} und eines Vektors in \mathcal{H}_R geschrieben werden. Wir vergleichen die beiden Vektoren

$$|\phi_W\rangle = |\phi\rangle \otimes |\phi_R\rangle = \sum_s \sum_r c_s d_{Rr} |s\rangle \otimes |r_R\rangle \in \mathcal{H}_W \quad (21a)$$

$$|\psi_W\rangle = \sum_s \sum_r c_{Wsr} |s\rangle \otimes |r_R\rangle \in \mathcal{H}_W . \quad (21b)$$

(21a) ist ein Produktvektor, der als direktes Produkt der Vektoren $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ und $|\phi_R\rangle \in \mathcal{H}_R$ geschrieben werden kann. Falls für irgendwelche der Koeffizienten von (21b)

$$c_{Wij} \neq c_{Wji} \quad \text{und/oder} \quad c_{Wii} c_{Wjj} \neq c_{Wij} c_{Wji} \quad (22)$$

gilt, dann existiert kein Vektor in \mathcal{H} und kein Vektor in \mathcal{H}_R , als deren direktes Produkt der Vektor $|\psi_W\rangle \in \mathcal{H}_W$ dargestellt werden könnte. Die Vektoren der Teilsysteme sind dann in der Zustandsfunktion des Gesamtsystems „verschränkt“, so der von Schrödinger geprägte Begriff für diesen Sachverhalt. Das Auftreten verschränkter Zustände in zusammengesetzten Systemen hielt Schrödinger für den wesentlichen Unterschied zwischen klassischer Theorie und Quantentheorie.

Wenn ein zusammengesetztes System durch einen verschränkten Zustandsvektor beschrieben wird, dann kann man den Teilsystemen keinen Zustandsvektor zuordnen. (23)

Ein einfaches Beispiel für einen verschränkten Vektor ist

$$|\psi_W\rangle = c_{W11} |1\rangle \otimes |1_R\rangle + c_{W22} |2\rangle \otimes |2_R\rangle . \quad (24)$$

Dieser Vektor kann nicht als direktes Produkt von Vektoren

$$\sum_{s=1}^2 c_s |s\rangle \quad \sum_{r=1}^2 d_{Rr} |r_R\rangle \quad (25)$$

der Teilsysteme S und S_R geschrieben werden, denn im direkten Produkt

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^2 \sum_{r=1}^2 c_s d_{Rr} |s\rangle \otimes |r_R\rangle &= c_1 d_{R1} |1\rangle \otimes |1_R\rangle + c_1 d_{R2} |1\rangle \otimes |2_R\rangle + \\ &+ c_2 d_{R1} |2\rangle \otimes |1_R\rangle + c_2 d_{R2} |2\rangle \otimes |2_R\rangle \end{aligned} \quad (26)$$

treten, weil c_1, d_{R1}, c_2, d_{R2} alle von Null verschieden sein müssen, unvermeidlich in den Indizes 1 und 2 gemischte Glieder auf, die in (24) nicht enthalten sind.

Offene Quantensysteme sind nahezu immer mit dem Rest der Welt verschränkt. Folglich können sie nicht durch Zustandsvektoren beschrieben werden, siehe (23). Genau dadurch unterscheiden sich offene von abgeschlossenen Systemen. Daraus ergibt sich ein praktisches Problem. Wenn wir in gewohnter Weise den Erwartungswert

$$\langle Q \rangle_\psi = \langle \psi | Q | \psi \rangle \stackrel{(10)}{=} \text{Sp}\{ |\psi\rangle \langle \psi| Q \} \quad (27a)$$

einer Observablen Q im Zustand $|\psi\rangle$ des Systems S bestimmen wollen, dann scheitert die Berechnung schon im Ansatz daran, dass

der Zustand $|\psi\rangle$ des Systems S überhaupt nicht definiert ist, wenn S und S_R durch einen verschränkten Gesamtzustand beschrieben werden. Definiert ist bei Verschränkung nur die kombinierte Zustandsfunktion $|\psi_W\rangle$ beider Systeme. Sie ist „im Prinzip“ definiert, aber niemals explizit bekannt, und kann deshalb auch nicht in Berechnungen verwendet werden.

Im folgenden werden wir eine „effektive“ Zustandsfunktion $|\chi\rangle$ des Systems S entwickeln, mit der sich der Erwartungswert

$$\langle Q \rangle_{\psi_W} = \text{Sp}\{|\chi\rangle\langle\chi|Q\} \quad (27b)$$

der Observablen Q auch dann berechnen lässt, wenn das System S mit der Umgebung verschränkt ist, und wenn man lediglich auf das System S messtechnischen Zugriff hat.

Dazu müssen wir vorab definieren, wie Skalarprodukte und Projektoren verschränkter Zustände gebildet werden. Der Projektor auf den verschränkten Zustand (21b) ist

$$\begin{aligned} |\psi_W\rangle\langle\psi_W| &= \sum_s \sum_r c_{Wsr}^* c_{Wsr} |s\rangle \otimes |r_R\rangle \langle s| \otimes \langle r_R| \\ &= \sum_s \sum_r c_{Wsr}^* c_{Wsr} |s\rangle \langle s| \otimes |r_R\rangle \langle r_R|. \end{aligned} \quad (28)$$

Das Skalarprodukt des Vektors (21b) mit dem Vektor

$$|\phi_W\rangle = \sum_s \sum_r d_{Wsr} |s\rangle \otimes |r_R\rangle \in \mathcal{H}_W \quad (29)$$

ist

$$\langle\psi_W|\phi_W\rangle = \sum_{s,s'} \sum_{r,r'} c_{Wsr}^* d_{Ws'r'} \underbrace{\langle s|s'\rangle}_{\delta_{ss'}} \underbrace{\langle r_R|r'_R\rangle}_{\delta_{rr'}} = \sum_s \sum_r c_{Wsr}^* d_{Wsr}. \quad (30)$$

Zur Berechnung des Gesamtprodukts werden also zunächst systemweise die Teilprodukte in S und in S_R berechnet.

Wir wollen den Erwartungswert $\langle Q \rangle_{\psi_W}$ einer Observablen Q berechnen, die eine Eigenschaft ausschließlich des Teilsystems S ist, weshalb der Operator Q nur im Hilbertraum \mathcal{H} wirkt. Der Zustand des Systems S sei mit dem Zustand des Rests der Welt S_R verschränkt zum Zustand

$$|\psi_W\rangle = \sum_s \sum_r c_{wsr} |s\rangle \otimes |r_R\rangle \in \mathcal{H}_W \quad (31)$$

des Universums S_W . Dieser Zustand kann nicht als direktes Produkt eines Zustandsvektors des Systems S mit einem Zustandsvektor des Systems S_R geschrieben werden. Also hat weder das System S noch das System S_R einen definierten Zustand. Zunächst wird der Operator für das Gesamtsystem als direktes Produkt

$$Q_W = Q \otimes 1_R \quad (32)$$

definiert. 1_R ist der nur im Hilbertraum \mathcal{H}_R wirkende „Identitäts-Operator“, der – siehe (8) – jede Zustandsfunktion, auf die er wirkt, unverändert lässt. Wir machen die plausible Annahme, dass der Erwartungswert der Observablen Q , die im System S gemessen wird, identisch ist mit dem Erwartungswert der Observablen Q_W , die im System S_W gemessen wird. Weil das System W abgeschlossen ist, kann man den Erwartungswert mithilfe des Projektors $|\psi_W\rangle\langle\psi_W|$ und der Spur berechnen:

$$\langle Q \rangle_{\psi_W} \stackrel{(10)}{=} \text{Sp}_W \{ |\psi_W\rangle\langle\psi_W| Q_W \} \quad (33)$$

Einsetzen des Operators (32), und Berechnung der Spur mit dem Orthonormalsystem $|s\rangle \otimes |r_R\rangle$ ergibt

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_{\psi_W} &= \sum_s \langle s| \sum_r \langle r_R | \psi_W \rangle \langle \psi_W | 1_R | r_R \rangle Q |s\rangle \\ &= \text{Sp} \{ \text{Sp}_R \{ |\psi_W\rangle\langle\psi_W| \} Q \} . \end{aligned}$$

Die im System R (dem Rest der Welt) zu berechnende Spur wird als Dichteoperator ρ bezeichnet und so umgeformt, dass nur Zustandsfunktionen des Systems S in ihr auftreten:

$$\begin{aligned} \rho &\equiv \text{Sp}_R\{|\psi_W\rangle\langle\psi_W|\} = \sum_r \langle r_R|\psi_W\rangle\langle\psi_W|r_R\rangle \\ &\stackrel{(28)}{=} \sum_{r',s,r} c_{Wsr}^* c_{Wsr} |s\rangle\langle s| \underbrace{\langle r'_R|r_R\rangle\langle r_R|r'_R\rangle}_{\delta_{rr'}} \\ &= \sum_s w_s |s\rangle\langle s| \quad \text{mit} \quad w_s \equiv \sum_r c_{Wsr}^* c_{Wsr} \geq 0 \in \mathbb{R} . \end{aligned} \quad (34)$$

Also ist der Erwartungswert der Messgröße Q im offenen System:

$$\langle Q \rangle_{\psi_W} = \text{Sp}\{\rho Q\} \quad \text{mit} \quad \begin{cases} \rho = \sum_s w_s |s\rangle\langle s| \\ w_s = \sum_r c_{Wsr}^* c_{Wsr} \geq 0 \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (35)$$

Man vergleiche dies Ergebnis für das offene System mit dem Ergebnis

$$\langle Q \rangle_{\psi} \stackrel{(10)}{=} \text{Sp}\{P_{\psi} Q\} \quad \text{mit} \quad P_{\psi} = |\psi\rangle\langle\psi|$$

für das abgeschlossene System! $|s\rangle\langle s|$ ist ein Projektor, der im System S wirkt. Also ist auch der Dichteoperator ρ als gewichtete Summe dieser Projektoren ein Operator, der im System S wirkt. Nur tief verborgen in den Gewichtsfaktoren w_s wird der Dichteoperator geprägt durch die Verschränkung der Systeme S und S_R .

Der Vergleich von (27b) mit (35) ergibt

$$|\chi\rangle\langle\chi| = \sum_s \sum_r c_{Wsr}^* c_{Wsr} |s\rangle\langle s| = \sum_s w_s |s\rangle\langle s| . \quad (36)$$

Folglich kann das offene Systems S durch die effektive Zustandsfunktion

$$|\chi\rangle = \sum_s \sqrt{w_s} |s\rangle e^{i\varphi_s} \quad \text{mit} \quad \begin{cases} \varphi_s \in \mathbb{R} \\ \varphi_s \text{ nicht definiert} \end{cases} \quad (37)$$

beschrieben werden. Weil $|\chi\rangle$ auf dem Umweg über die Projektoren (36) bestimmt wurde, sind die Phasenfaktoren wegen

$$|s\rangle\langle s| = |s\rangle e^{-i\varphi_s} \langle s| e^{i\varphi_s} \quad \text{für beliebige } \varphi_s \in \mathbb{R}$$

nicht definiert. Ein Zustand ohne definierte Phase wird als „Gemisch“ bezeichnet, im Gegensatz zu einem „reinen Zustand“

$$|\psi\rangle = \sum_s |s\rangle\langle s|\psi\rangle = \sum_s c_s |s\rangle, \quad (38)$$

dessen Phasen durch die komplexen Koeffizienten $c_s = \langle s|\psi\rangle \in \mathbb{C}$ wohldefiniert sind. Dies ist eine wesentliche Erkenntnis: Wenn die Zustandsfunktion des Universums nicht als direktes Produkt einer Zustandsfunktion des offenen Systems S und einer Zustandsfunktion des Rests der Welt geschrieben werden kann, dann ist der effektive Zustand des Systems S kein reiner Zustand, sondern ein Gemisch. Dies ist der Regelfall. Nur bei guter Isolation vom Rest der Welt kann der Zustand eines untersuchten Systems näherungsweise als reiner Zustand beschrieben werden, in Strenge niemals.

Abgesehen von den Gewichtungsfaktoren w_s enthält (35) ausschließlich Größen des Systems S . Alle Größen des Systems S sind messbar und berechenbar. Dagegen können die Gewichtungsfaktoren w_s nicht berechnet werden, weil die verschränkte Zustandsfunktion $|\psi_W\rangle = (31)$ der Welt nicht bekannt ist. Zwar ist die Definition $w_s = \sum_r c_{Wsr}^* c_{Wsr}$ in (35) in mathematischer Hinsicht völlig korrekt. Physikalisch ist sie aber inhaltsleer und nutzlos. Die einzige Möglichkeit uns die Koeffizienten w_s zu beschaffen besteht darin, sie zu *schätzen*, basierend auf unserer – mehr oder weniger unvollständigen – Kenntnis des Systems S . (Über S_R haben wir überhaupt keine Kenntnis!)

Da wir unsere *gesamte* Kenntnis des untersuchten Systems im Dichteoperator ρ kodieren, sollten wir in (35) besser $\langle Q\rangle_\rho$ statt

$\langle Q \rangle_{\psi_W}$ schreiben:

$$\langle Q \rangle_{\rho} = \text{Sp}\{\rho Q\} \quad \text{mit} \quad \left\{ \begin{array}{l} \rho = \sum_s w_s |s\rangle\langle s| \\ w_s \geq 0 \in \mathbb{R} \text{ bestimmt durch} \\ \text{beste Schätzung, basierend auf} \\ \text{unvollständiger Kenntnis von } S. \end{array} \right. \quad (39)$$

Wenn die (unkontrollierte) Kopplung zwischen dem offenen System S und dem Rest der Welt S_R nur schwach ist, dann können wir — mit unserer besten Annahme für ρ — eine Basis $|s\rangle$ finden, in der nur wenige Koeffizienten w_s nennenswert von Null verschieden sind. Im idealen Fall dass nur ein Koeffizient $w_k = 1$ Eins ist, und alle anderen Koeffizienten w_s nach unserer besten Schätzung von ρ Null sind, reduziert sich der Dichteoperator zum Projektor $|k\rangle\langle k|$ auf den reinen Zustand $|k\rangle$.

Falls jedoch die Kopplung zwischen S und S_R stark ist, ermöglicht unsere sehr unvollständige Kenntnis nur Schätzungen mit vielen von Null verschiedenen Koeffizienten w_s . Dann ist es ziemlich willkürlich, aus welcher Basis wir den Dichteoperator synthetisieren:

$$\rho = \sum_s w_s |s\rangle\langle s| = \sum_{s'} w_{s'} |s'\rangle\langle s'| = \sum_{s''} w_{s''} |s''\rangle\langle s''| = \dots \quad (40)$$

5 PVM und POVM

Das Akronym PVM steht für (englisch) Projection Valued Measure = projektions-wertiges Maß, und das Akronym POVM steht für (englisch) Positive Operator Valued Measure = positives operatorwertiges Maß. Weil diese Begriffe in der mehr mathematisch orientierten Literatur häufig auftauchen, sollen sie im Folgenden kurz erklärt werden.

Wenn der Zustand eines abgeschlossenen Systems durch die Funktion $|\psi\rangle$ beschrieben wird, dann ist der Erwartungswert des Operators Q gleich

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_\psi &\stackrel{(10)}{=} \text{Tr}\{P_\psi Q\} = \sum_k \langle q_k | \psi \rangle \underbrace{\langle \psi | Q | q_k \rangle}_{q_k \langle \psi | q_k \rangle} = \\ &= \sum_k w_k q_k \quad \text{mit } w_k \equiv |\langle q_k | \psi \rangle|^2 \geq 0 . \end{aligned} \quad (41a)$$

Wenn der Zustand eines offenen Systems durch den Dichteoperator

$$\rho = \sum_k w_k |q_k\rangle \langle q_k|$$

beschrieben wird, dann ist der Erwartungswert des Operators Q gleich

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_\rho &\stackrel{(39)}{=} \text{Tr}\{\rho Q\} = \sum_{k,k'} w_k \underbrace{\langle q_{k'} | q_k \rangle \langle q_k | Q | q_{k'} \rangle}_{q_{k'} \delta_{kk'}} = \\ &= \sum_k w_k q_k \quad \text{mit } w_k \stackrel{(35)}{=} \sum_r |c_{Wkr}|^2 \geq 0 . \end{aligned} \quad (41b)$$

Der einzige Unterschied von (41b) gegenüber (41a) besteht darin, dass der Projektionsoperator P_ψ durch den Dichteoperator ρ ersetzt wurde, während die Resultate identisch sind. In beiden Fällen geben die Koeffizienten w_k die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass eine einzelne Messung der Observablen Q das Resultat q_k haben wird. Wie alle vernünftigen Wahrscheinlichkeiten summieren sich die w_k zu Eins:

$$\sum_k w_k = 1 \quad (42)$$

Aber nur die Koeffizienten $w_k = |\langle q_k | \psi \rangle|^2$ des geschlossenen Systems (41a) können berechnet werden. Die Koeffizienten w_k des offenen Systems (41b) müssen erraten werden.

Bei der mathematischen Analyse des Systems sind die Werte der Wahrscheinlichkeiten w_k eventuell interessanter als die Messwerte q_k . Falls das System abgeschlossen ist und seine Zustandsfunktion $|\psi\rangle$ ist, sind die w_k einfach die Erwartungswerte der Projektoren $P_{q_k} = |q_k\rangle\langle q_k|$:

$$\langle P_{q_k} \rangle_\psi = \langle \psi | P_{q_k} | \psi \rangle = \langle \psi | q_k \rangle \langle q_k | \psi \rangle \stackrel{(41a)}{=} w_k \quad (43)$$

Dies ist eine Abbildung von der Menge der Zustandsfunktionen $|\psi\rangle$ auf die reellen Zahlen w_k . Als „Maß“ wird in der mathematischen Terminologie eine verallgemeinerte Form einer Abbildung von einer Menge auf die reellen Zahlen bezeichnet. In diesem Fall wird die Abbildung durch die Projektoren P_{q_k} spezifiziert. Deshalb wird (43) als (englisch) projection-valued measure = PVM bezeichnet.

Wie lässt sich das PVM auf offene Quantensysteme verallgemeinern? (41a) konnte dadurch zu (41b) verallgemeinert werden, dass der Projektor P_ψ durch den Dichteoperator ρ ersetzt wurde. Diese Methode der Verallgemeinerung kann nicht unmittelbar auf (43) übertragen werden, weil die Zustandsfunktion $|\psi\rangle$ des abgeschlossenen Systems ein unverzichtbarer Bestandteil von (43) ist, während für das offene System keine Zustandsfunktion definiert ist.

Jetzt ist es nützlich, sich an den in (7) eingeführten Identitäts- oder Einheits-Operator 1 zu erinnern. Er lässt jede Zustandsfunktion, auf die er wirkt, unverändert, und jede beliebige Zustandsfunktion $|\phi\rangle$ ist eine Eigenfunktion des Operators 1 mit dem Eigenwert 1:

$$1|\phi\rangle \stackrel{(8)}{=} 1|\phi\rangle \quad (44)$$

Dank dieser Eigenschaft (nämlich seiner Unabhängigkeit von den Zustandsfunktionen $|\phi\rangle$) ist der Identitäts-Operator geeignet für

die Definition des gesuchten Maßes:

$$\langle \phi | W_k | \phi \rangle = w_k \quad \forall |\phi\rangle \quad (45)$$

Diese Konstruktion funktioniert, wenn die Operatoren W_k (die wir mit Großbuchstaben schreiben, während die Wahrscheinlichkeiten w_k mit kleinen Buchstaben geschrieben werden) eine Zerlegung

$$\sum_k W_k = 1 \quad (46)$$

des Identitäts-Operators 1 sind. Denn dann ist

$$\sum_k W_k |\phi\rangle \stackrel{(46)}{=} 1 |\phi\rangle \stackrel{(44)}{=} 1 |\phi\rangle \stackrel{(42)}{=} \sum_k w_k |\phi\rangle .$$

Das Maß (d. h. die Abbildung) (45) von der Menge der beliebigen (und tatsächlich unbekannt) Zustandsfunktionen $|\phi\rangle$ des offenen Quantensystems auf die reellen Zahlen w_k ist positiv (weil alle $w_k \geq 0$ sind), und es ist operator-wertig (weil die Projektoren P_ψ von (43) zu den Operatoren W_k verallgemeinert wurden). Folglich wird (45) als (englisch) positive operator-valued measure = POVM bezeichnet. Es verallgemeinert das PVM (43), das nur im Fall geschlossener Systeme anwendbar ist, auf den Fall offener Systeme.

Die Definition des POVM (45) ist natürlich wichtig für die mathematische Analyse des Problems. Hinsichtlich der praktischen Aufgabe des Physikers, der das Problem nicht nur analysieren sondern tatsächlich lösen – d. h. die Werte w_k finden – will, ist die Definition der Operatoren W_k und des POVM (45) allerdings offensichtlich nutzlos.

Dennoch sagen viele Physiker, dass sie von einer PVM-Beschreibung der Messung zu einer POVM-Beschreibung wechseln, sobald sie es mit offenen Quantensystemen zu tun haben. Das ist allerdings nur eine ungenaue Sprechweise. Was sie eigentlich sagen wollen ist,

dass sie von (41a) zu (41b) wechseln, d. h. dass sie ihren Berechnungen von Erwartungswerten nicht Zustandsfunktionen sondern Dichteoperatoren zugrunde legen. Diese Änderung ist in der Tat notwendig, wenn offene Quantensysteme angemessen behandelt werden sollen.

6 Dekohärenz

Ein Gemisch ist wegen der undefinierten Phase nicht zur Interferenz fähig. Weder zur Interferenz mit sich selbst, noch zur Interferenz mit anderen Zustandsfunktionen. Der Verlust der Interferenzfähigkeit kommt auch im Verschwinden der Nicht-Diagonalelemente von Matrizen zum Ausdruck: Wir vergleichen die Matrixdarstellungen des Projektors P_ψ und des Dichteoperators ρ in der Basis $|s\rangle$, die auch bei der Definition von ρ in (35) verwendet wurde:

$$(P_\psi)_{ss'} = \langle s|\psi\rangle\langle\psi|s'\rangle \stackrel{(38)}{=} c_s c_{s'}^* \quad (47a)$$

$$(\rho)_{ss'} = \sum_{s''} w_{s''} \underbrace{\langle s|s''\rangle}_{\delta_{ss''}} \underbrace{\langle s''|s'\rangle}_{\delta_{s''s'}} = w_s \delta_{ss'} \quad (47b)$$

Die Dichtematrix (47b) hat Diagonalgestalt, alle Nicht-Diagonalelemente sind Null. Dagegen sind in der Projektor-Matrix auch die Nicht-Diagonalelemente in der Regel von Null verschieden.

Die Verschränkung des Systems S mit dem Rest der Welt bewirkt, dass die effektiven Zustandsfunktionen $|\chi\rangle$ eine wesentliche Eigenschaft der Zustandsfunktionen abgeschlossener Quantensysteme – nämlich die Interferenzfähigkeit – verlieren. Bei der experimentellen Beobachtung mesoskopischer Objekte (mittelgroßer Moleküle) ist es möglich, den durch allmählich zunehmende Kopplung an die Umgebung eintretenden allmählichen Verlust der Interferenzfähigkeit nachzuweisen, siehe z. B. [10].

Mit dem Stichwort „allmählich“ ist eine allzu weitgehende Vereinfachung unserer bisherigen Darstellung angesprochen: Wir haben am Anfang dieses Artikels ein abgeschlossenes System betrachtet, und jetzt ein System im Zustand vollständiger Verschränkung mit der Umgebung, in dem sämtliche Nicht-Diagonalelemente der Dichtematrix (47b) Null sind. Dazwischen gibt es aber noch den wichtigen Bereich des allmählichen Übergangs zwischen diesen Extremen im Fall mehr oder weniger starker Kopplung zwischen S und S_R .

Wie schnell stellt sich eigentlich der dekohärente Zustand ein, wenn ein anfangs abgeschlossenes System der Wechselwirkung mit der Umgebung ausgesetzt wird? In einer Arbeit [11] von Joos und Zeh wird versucht, die Geschwindigkeit der Dekohärenz abzuschätzen. Dazu betrachten die Autoren ein Quantensystem, das zur Zeit t_0 , zu der die Wechselwirkung mit der Umgebung eingeschaltet wird, mit endlicher Wahrscheinlichkeit an verschiedenen Stellen \mathbf{x}, \mathbf{x}' des dreidimensionalen Ortsraum aufgefunden werden kann. Wenn dies System der Streuung von elektromagnetischer Strahlung oder von Gasmolekülen aus der Umgebung ausgesetzt wird, dann bewirken diese Streuereignisse ein allmähliches Verschwinden der Nicht-Diagonalelemente in der Dichtematrix des Systems, d. h. sie zerstören die Phasenrelation zwischen den Komponenten der Zustandsfunktion des Systems, die an verschiedenen Orten lokalisiert sind.

An die Stelle der Dichtematrix (47b), deren Komponenten mit den Basiszuständen $|s\rangle$ berechnet wurden, tritt in diesem Fall eine Dichtematrix, deren Komponenten mit den Vektoren $|t\mathbf{x}\rangle$ der zeitabhängigen kontinuierlichen Ortsbasis berechnet werden. Wir versuchen nicht, die Berechnung von Joos und Zeh nachzuvollziehen,

Durchmesser des Systems S	10 000 nm	100 nm	10 nm
Kosm. Hintergrundstr.	10^{-8}	10^{-20}	10^{-26}
Raumtemperatur	10^{-5}	10^{-2}	10^{-8}
Sonnenlicht (auf Erde)	10^7	10^3	10^{-1}
Luft	10^{22}	10^{18}	10^{16}
Labor-Vakuum	10^9	10^5	10^3

Tabelle 1: Dekohärenzrate Λ / $(\text{nm}^{-2}\text{s}^{-1})$

sondern geben nur ihr Resultat an:

$$\begin{aligned}
 (\rho)_{xx'}(t) &= \int d\mathbf{x}'' \langle t\mathbf{x}|t\mathbf{x}''\rangle \langle t\mathbf{x}''|t\mathbf{x}'\rangle \\
 &= (\rho)_{xx'}(t_0) \exp\{-(t-t_0)(\mathbf{x}-\mathbf{x}')^2\Lambda\} \quad (48) \\
 0 < \Lambda &\sim \frac{N}{V} k^2 v
 \end{aligned}$$

Es ist plausibel, dass die Dekohärenzrate Λ proportional zur Geschwindigkeit v der streuenden Teilchen, proportional zum Quadrat k^2 ihrer Wellenzahl, und proportional zu ihrer Anzahl N pro Volumen V ist. Es ist bemerkenswert, dass die Dekohärenz der delokalisierten Quantenobjekte sehr schnell, nämlich exponentiell mit $(t-t_0)(\mathbf{x}-\mathbf{x}')^2\Lambda$ geschieht. Die Dekohärenz-Raten, die Joos und Zeh [11] für verschieden große Quantensysteme S bei unterschiedlichen Arten und Stärken der Kopplung an die Umgebung fanden, sind in Tabelle 1 eingetragen. Man erkennt, dass die Dekohärenz durch Streuung von Gasmolekülen wesentlich effizienter ist, als die Dekohärenz durch Streuung von Photonen. Aber selbst wenn die Verschränkung mit der Umgebung lediglich durch die kosmische Hintergrundstrahlung bewirkt wird, ist der Effekt für makroskopische Objekte signifikant.

Wir betonen, dass durch (48) die Dekohärenz des Quanten-

objekts S beschrieben wird, nicht etwa seine Lokalisierung. Die verschiedenen Diagonalelemente der Dichtematrix beschreiben unterschiedliche Orte \mathbf{x} als Positionen des Objekts. Die Werte der verschiedenen Diagonalelemente werden nicht verändert, d. h. für alle Diagonalelemente gilt $(\rho)_{xx}(t) \stackrel{(48)}{=} (\rho)_{xx}(t_0)$. Nur die Nicht-Diagonalelemente gehen gegen Null. Die Dekohärenz bewirkt keinen Kollaps des Quantenobjekts S auf einen bestimmten Ort, sondern zerstört nur die Interferenzfähigkeit von Komponenten seiner Zustandsfunktion mit unterschiedlicher Ortskoordinate. Wenn in einem Doppelspalt-Experiment ein Molekül, das die Interferenzapparatur durchläuft, durch Kopplung an die Umgebung seine Interferenzfähigkeit verliert, dann wird hinter dem Doppelspalt keine Interferenzfigur beobachtet. Das bedeutet aber keineswegs, dass das Molekül lokalisiert wäre und nur durch einen der beiden Spalte tritt. Es ist weiterhin, genau so wie im Fall ohne Dekohärenz, über die Fläche der beiden Spalte delokalisiert (die Diagonalelemente seiner Dichtematrix wurden durch Dekohärenz nicht verändert), nur sind die beiden Komponenten seiner Zustandsfunktion, die an verschiedenen Spalten lokalisiert sind, anschließend nicht mehr zur Interferenz fähig (die Nicht-Diagonalelemente seiner Dichtematrix verschwinden aufgrund der Dekohärenz).

Wir beenden diesen Abschnitt mit einem Zitat von Heisenberg. Im WS 1955/56 hielt Heisenberg die Gifford-Lectures an der Universität St. Andrews in Schottland. In der zehnten Vorlesung, die unter dem Titel „Sprache und Wirklichkeit in der modernen Physik“ stand, bemerkte er [12, Kap. X, S. 171-172]:

„[Im Fall der Quantentheorie] gibt es zunächst keinen einfachen Leitfaden, der uns erlaubte, die mathematischen Symbole mit den Begriffen der gewöhnlichen Sprache zu verknüpfen. Das einzige, was man zunächst weiß, ist die Tatsache, daß unsere gewöhnlichen Begriffe auf die Struktur des Atoms nicht angewendet werden können. Wieder würde man als den naturgegebenen Ausgangspunkt

für die physikalische Deutung des Formalismus die Tatsache ansehen können, daß das mathematische Schema der Quantenmechanik dem der klassischen Mechanik sich in Dimensionen annähert, die groß sind verglichen mit der Ausdehnung der Atome. Aber selbst diese Behauptung kann nur mit einigen Vorbehalten ausgesprochen werden. Auch in großen Dimensionen gibt es viele Lösungen der quantentheoretischen Gleichungen, zu denen analoge Lösungen im Gebiet der klassischen Physik nicht gefunden werden können. In solchen quantentheoretischen Lösungen würde die [...] Interferenz der Wahrscheinlichkeiten in Erscheinung treten, die es in der klassischen Physik gar nicht gibt. Deshalb ist selbst im Grenzfall sehr großer Dimensionen die Beziehung zwischen den mathematischen Symbolen auf der einen, den Messungen und den gewöhnlichen Begriffen auf der anderen Seite keineswegs trivial. Um zu einer solchen eindeutigen Beziehung zu gelangen, muß man noch einen zweiten Zug des Problems in Betracht ziehen. Man muß berücksichtigen, daß das System, das nach den Methoden der Quantenmechanik behandelt werden soll, in Wirklichkeit Teil eines sehr viel größeren Systems (evtl. der ganzen Welt) ist. Es steht in Wechselwirkung mit diesem größeren System, und wir müssen hinzufügen, daß die mikroskopischen Eigenschaften des größeren Systems wenigstens in einem erheblichen Umfang unbekannt sind. Diese Formulierung beschreibt zweifellos die praktisch vorliegende Situation richtig; denn das System könnte gar nicht der Gegenstand von Messungen und theoretischen Untersuchungen sein, es würde tatsächlich überhaupt nicht zur Welt der Erscheinungen gehören, wenn keine Wechselwirkung es mit einem größeren System verbände, von dem der Beobachter ein Teil ist. Die Wechselwirkung mit diesem größeren System mit seinen weitgehend unbekanntem mikroskopischen Eigenschaften führt dann ein neues statistisches Element in die Beschreibung ein – und zwar sowohl in die quantentheoretische als auch in die klassische Beschreibung –, das bei dem betrachteten

System berücksichtigt werden muß. Im Grenzfall großer Dimensionen zerstört dieses statistische Element die Wirkung der Interferenz der Wahrscheinlichkeit in einem solchen Maße, daß jetzt das quantenmechanische Schema sich wirklich dem der klassische Physik annähert. An dieser Stelle kann man daher eine eindeutige Verbindung zwischen den mathematischen Symbolen der Quantentheorie und den Begriffen der gewöhnlichen Sprache herstellen ...“

Das Zitat beweist, dass Heisenberg 1955 eine klare Vorstellung von Ursache und Auswirkung der Dekohärenz hatte. Die Verschränkung des Zustands des untersuchten Quantensystems mit seiner Umgebung bewirkt den Verlust der Interferenzfähigkeit (das Verschwinden der nicht-Diagonalelemente der Dichtematrix). Aber es führt nicht zu einem eindeutigen klassischen Zustand, sondern „führt ein neues statistisches Element sowohl in die quantentheoretische als auch in die klassische Beschreibung ein“: Nicht nur eines, sondern viele Diagonalelemente der Dichtematrix sind von Null verschieden, d. h. das Objekt kann im Beispiel (48) an vielen verschiedenen Stellen im Ortsraum mit endlicher Wahrscheinlichkeit aufgefunden werden, wenn man eine Ortsmessung durchführt. Es handelt sich um eine klassische Wahrscheinlichkeit. Weil die Interferenzfähigkeit verschwunden ist darf man annehmen, dass das Objekt irgend einen klassischen, wohlbestimmten Ort hat, man weiß nur nicht welchen. Für so eine klassische Wahrscheinlichkeit hat die menschliche Sprache Begriffe, anders als für die interferenzfähige Wahrscheinlichkeitsamplitude der Quantentheorie.

7 Dekohärenz und das „Messproblem“

Zuweilen wird behauptet, die Dekohärenz löse das „Messproblem der Quantentheorie“. Diese Aussage ist nicht korrekt. Um sich das klarzumachen, kann man den Vorgang einer Messung in v. Neumann's Modell folgendermaßen symbolisieren, siehe Abbildung 2:

Zunächst werden das zu untersuchende System S und das Messgerät S_M in Kontakt gebracht:

$$\left. \sum_j a_j |q_j\rangle \right\} \xrightarrow{\text{1. Aspekt}} \sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle \quad (49a)$$

Natürlich muss S offen gegenüber S_M sein, denn sonst könnte man nichts messen. Aber auch S_M (bei dem es sich gegebenenfalls z. B. auch um ein menschliches Auge handeln könnte) wird als makroskopisches System unvermeidlicherweise offen gegen S_R (den Rest der Welt) sein, denn es ist unmöglich, beispielsweise die Streuung von Gasmolekülen oder elektromagnetischer Strahlung zwischen einem makroskopischen Gegenstand und dem Rest der Welt vollständig oder auch nur näherungsweise vollständig zu unterdrücken. Also wird es auch eine Verschränkung zwischen dem Zustand des Messgeräts und dem Zustand von S_R geben, der vor der Verschränkung $|r_0\rangle$ sei:

$$\left. \sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle \right\} \xrightarrow{\text{1. Aspekt}} \sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle |r_j\rangle \quad (49b)$$

Diese Gesamt-Zustandsfunktion von $S_W = S + S_M + S_R$ ist verschränkt, kann also nicht als direktes Produkt von Zustandsfunktionen der Teilsysteme dargestellt werden. Und die effektive Zustandsfunktion des Teilsystems $S + S_M$ ist durch Dekohärenz nicht mehr

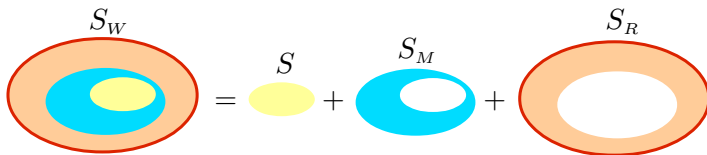


Abb. 2: Das System $S_W = S + S_M + S_R$

interferenzfähig. Die Dekohärenz kann aber nicht den Kollaps ersetzen, der in (49b) noch nicht stattgefunden hat! Der menschliche Beobachter liest vom Messgerät einen ganz bestimmten Messwert q_k ab, nicht etwa eine Überlagerung verschiedener Messwerte q_j . Also kann (49b) nur mit der Everett-Interpretation als angemessen gelten. Ohne die Everett-Interpretation muss noch die Zustandsreduktion

$$\sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle |r_j\rangle \xrightarrow{\text{2. Aspekt}} |q_k\rangle |m_k\rangle |r_k\rangle \quad (49c)$$

hinzukommen.

Wenn man die Everett-Interpretation akzeptiert, dann gibt es kein „Messproblem“, das gelöst werden müsste. Denn der Beobachter nimmt mit jeder Komponente seines Bewusstseins nur ein einziges, eindeutiges Messergebnis wahr. Auch wenn man die Kopenhagener Deutung verwendet gibt es kein Messproblem, für das eine Lösung erforderlich wäre, denn dann werden alle Messinstruments von Anfang an klassisch beschrieben. Dekohärenz ist dann genau das, was ihr Name besagt: Die interessante Tatsache, dass es sich bei der aus (49b) = $\sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle |r_j\rangle$ durch Spurbildung über S_M und S_R berechneten effektiven Zustandsfunktion von S um ein nicht zur Interferenz fähiges Gemisch handelt. Aber diese interessante Tatsache löst nicht das Messproblem der anderen Interpretationen der Quantentheorie, denn sie bewirkt keinen „Kollaps“ der Zustandsfunktion, d. h. sie erklärt nicht den Schritt von (49b) nach (49c).

8 Die bevorzugte Basis

Während also die Tatsache der Dekohärenz offener Quantensysteme zur Lösung des „Messproblems“ (das nur bei einem Teil der Interpretationen der Quantentheorie existiert) nichts beiträgt, konnte

mit ihrer Hilfe ein anderer, ebenso lange bekannter rätselhafter Sachverhalt geklärt werden: Das Problem der „bevorzugten Basis“. Damit ist folgendes gemeint.

Es ist von vornherein überhaupt nicht klar, warum ein Messgerät S_M , mit dem die Observable Q eines Systems S gemessen wird, gemäß v. Neumann's Theorie der Messung mit dem System S zum Überlagerungs-Zustand

$$\psi = \sum_j a_j |q_j\rangle \left. \begin{array}{l} |m_0\rangle \\ |q_j\rangle \end{array} \right\} \xrightarrow{\text{1. Aspekt}} \sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle \quad (50a)$$

kombiniert, und dann mit

$$\sum_j a_j |q_j\rangle |m_j\rangle \xrightarrow{\text{2. Aspekt}} |q_k\rangle |m_k\rangle \quad (50b)$$

auf einen bestimmten Messwert q_k kollabiert. Könnte nicht genau so gut mit $|q'_j\rangle \neq |q_j\rangle$ und mit $|m'_j\rangle \neq |m_j\rangle$ eine Verschränkung

$$\psi = \sum_j a'_j |q'_j\rangle \left. \begin{array}{l} |m_0\rangle \\ |q'_j\rangle \end{array} \right\} \xrightarrow{\text{1. Aspekt}} \sum_j a'_j |q'_j\rangle |m'_j\rangle \quad (51a)$$

eintreten, und dann per

$$\sum_j a'_j |q'_j\rangle |m'_j\rangle \xrightarrow{\text{2. Aspekt}} |q'_k\rangle |m'_k\rangle \quad (51b)$$

auf den Eigenwert $q'_k \neq q_k$ einer ganz anderen Observablen $Q' \neq Q$ kollabieren? Gewiss, das Messgerät wurde so konstruiert, dass es die Größe Q misst, und nicht eine andere Größe Q' . Aber das ist eine Aussage im Rahmen der klassischen Physik. Wenn man jedoch mit v. Neumann das Messgerät als Quantensystem betrachtet, dann kann man seinen Zustand

$$|m\rangle = \sum_j b_j |m_j\rangle = \sum_j b'_j |m'_j\rangle \quad (52)$$

mit gleichem Recht nach den Basisfunktionen $|m_j\rangle$ (die mit den Eigenfunktionen $|q_j\rangle$ der Observablen Q korrelieren) entwickeln, wie nach den Basisfunktionen $|m'_j\rangle$ (die mit den Eigenfunktionen $|q'_j\rangle$ der Observablen Q' korrelieren). Es ist eine *klassische* Eigenschaft des Messgeräts, nicht irgend eine der quantentheoretisch möglichen Größen Q', Q'', \dots zu messen, sondern stabil die bestimmte Größe Q . Wie bekommt das Gerät diese klassische Eigenschaft?

Um deutlich zu machen, dass dieses Problem auch im Rahmen der Kopenhagener Interpretation der Quantentheorie relevant ist, lösen wir uns vom Begriff Messgerät, und formulieren die Frage noch etwas allgemeiner: Wie kommt es, dass manche Quantensysteme stabil und zuverlässig bestimmte klassische Eigenschaften zeigen? Ein besonders eindrucksvolles Beispiel sind chirale Moleküle. Das können zum Beispiel organische Moleküle sein, die Tetraeder mit einem Kohlenstoff-Atom im Zentrum und vier unterschiedlichen Liganden enthalten. Wir nennen den Zustand, in dem ein bestimmtes chirales und deshalb optisch aktives Molekül die Polarisationssebene von Licht im Uhrzeigersinn dreht, $|R\rangle$. Entsprechend bezeichnen wir den linksdrehenden Zustand als $|L\rangle$. Das rechtsdrehende Molekül ist das Spiegelbild des linksdrehenden Moleküls. Deshalb ist in der vereinfachten Prinzipskizze von Abbildung 3 auf der nächsten Seite die potentielle Energie des linksdrehenden Moleküls, aufgetragen als Funktion einer Achse im Ortsraum, das Spiegelbild der potentiellen Energie des rechtsdrehenden Moleküls.

Wäre unendlich viel Energie erforderlich, um rechts- bzw. linksdrehende Moleküle ineinander umzuwandeln (linke Skizze in Abbildung 3), dann wären die beiden Potentialmulden vollständig voneinander entkoppelt. Die Schrödingergleichungen des rechts- bzw. linksdrehenden Moleküls wären dann

$$H_0 |R\rangle = E_0 |R\rangle \quad \text{bzw.} \quad H_0 |L\rangle = E_0 |L\rangle . \quad (53)$$

Weil H_0 die Potentialmulden des links- und rechtsdrehenden Mole-

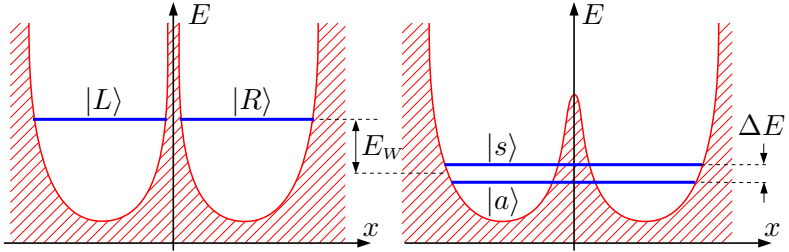


Abb. 3: Energie-Eigenwerte eines chiralen Moleküls

küls nicht verknüpft, gilt

$$\begin{aligned} \langle L | H_0 | R \rangle &= E_0 \langle L | R \rangle = 0 \\ \langle R | H_0 | L \rangle &= E_0 \langle R | L \rangle = 0 . \end{aligned} \quad (54)$$

Tatsächlich ist aber nur eine endliche Energie erforderlich, um ein chirales Molekül in sein Enantiomer zu überführen. Also hat die Potentialbarriere zwischen den beiden Energiemulden nur endliche Höhe, wie in Abbildung 3 rechts skizziert. Deshalb muss H_0 durch einen Wechselwirkungsterm H_w ergänzt werden, und die Schrödingergleichung des chiralen Moleküls lautet

$$(H_0 + H_w) |\psi\rangle = E |\psi\rangle . \quad (55)$$

$|R\rangle$ und $|L\rangle$ sind keine Eigenzustände des Paritätsoperators P (der Paritätsoperator invertiert die drei Koordinatenachsen des Ortsraums). Vielmehr werden $|R\rangle$ und $|L\rangle$ unter der Paritätstransformation ineinander überführt. Die Eigenfunktionen des Paritätsoperators sind dagegen die symmetrischen und antisymmetrischen

Kombinationen von $|R\rangle$ und $|L\rangle$:

$$\begin{aligned} P |R\rangle &= |L\rangle & P |L\rangle &= |R\rangle \\ P |s\rangle &= +1 |s\rangle & \text{mit } |s\rangle &\equiv \sqrt{\frac{1}{2}}(|R\rangle + |L\rangle) \end{aligned} \quad (56a)$$

$$P |a\rangle = -1 |a\rangle \quad \text{mit } |a\rangle \equiv \sqrt{\frac{1}{2}}(|R\rangle - |L\rangle) \quad (56b)$$

Hier wurde die Normierung

$$\langle s|s\rangle = \langle a|a\rangle = \frac{1}{2} \left(\underbrace{\langle R|R\rangle}_1 \pm \underbrace{\langle R|L\rangle}_0 \pm \underbrace{\langle L|R\rangle}_0 + \underbrace{\langle L|L\rangle}_1 \right) = 1 \quad (57)$$

gewählt. Aufgrund der Spiegelsymmetrie des Potentials in Abbildung 3 rechts kommutieren der Paritätsoperator und der Hamiltonoperator des chiralen Moleküls.

$$[P, H] = [P, (H_0 + H_W)] = 0 \quad (58)$$

Deshalb sind die Eigenfunktionen (56) des Paritätsoperators auch die Eigenfunktionen von H :

$$H |s\rangle = E_s |s\rangle \quad H |a\rangle = E_a |a\rangle \quad (59)$$

Die Energie im antisymmetrischen Zustand ist

$$\begin{aligned} \langle a|H|a\rangle &= \langle a|(H_0 + H_W)|a\rangle = \\ &= \frac{1}{2} \left(\underbrace{\langle R|H_0|R\rangle}_{E_0} + \underbrace{\langle L|H_0|L\rangle}_{E_0} - \underbrace{\langle R|H_0|L\rangle}_0 - \underbrace{\langle L|H_0|R\rangle}_0 + \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{\langle R|H_W|R\rangle}_{E_W} + \underbrace{\langle L|H_W|L\rangle}_{E_W} - \underbrace{\langle R|H_W|L\rangle}_{\Delta E/2} - \underbrace{\langle L|H_W|R\rangle}_{\Delta E/2} \right) = \\ &= E_0 + E_W - \frac{1}{2}\Delta E. \end{aligned} \quad (60a)$$

Für den symmetrischen Zustand findet man auf gleiche Weise die Energie

$$\langle s|H|s\rangle = E_0 + E_W + \frac{1}{2}\Delta E . \quad (60b)$$

Typischerweise ist E_W negativ und ΔE positiv, so dass sich die in Abbildung 3 blau eingetragenen Energieniveaus ergeben.

Chirale organische Moleküle werden in der Regel in biologischen Systemen mithilfe von chiralen Enzymen synthetisiert. Sie entstehen deshalb nicht im symmetrischen oder antisymmetrischen Zustand $|s\rangle$ oder $|a\rangle$, sondern im chiralen Zustand $|L\rangle$ oder $|R\rangle$. Wir untersuchen mithilfe der Schrödinger-Gleichung die zeitliche Entwicklung eines chiralen Moleküls, das sich zur Zeit $t = 0$ im Zustand $|L\rangle$ befindet:

$$\psi(t) = l(t) |L\rangle + r(t) |R\rangle , \quad |l|^2(t=0) = 1 , \quad |r|^2(t=0) = 0 \quad (61)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} H\psi \\ |L\rangle \frac{\partial l}{\partial t} + |R\rangle \frac{\partial r}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} (H_0 + H_I) (l |L\rangle + r |R\rangle) \end{aligned}$$

Indem man diese Gleichung von links mit $\langle L|$ bzw. mit $\langle R|$ multipliziert, erhält man die gekoppelten Gleichungen

$$\frac{\partial l}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} (l E_0 + l E_I + r \Delta E/2) \quad (62a)$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} (r E_0 + r E_I + l \Delta E/2) . \quad (62b)$$

Durch Einsetzen überzeugt man sich davon, dass

$$l(t) = C_l \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(E_0 + E_I)t\right\} \cos\left(\frac{t\Delta E}{2\hbar}\right) \quad (63a)$$

$$r(t) = C_r \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(E_0 + E_I)t\right\} \sin\left(\frac{t\Delta E}{2\hbar}\right) \quad (63b)$$

$$C_r = iC_l \quad , \quad |C_l|^2 = |C_r|^2 = 1$$

die Lösungen dieser Gleichungen sind, welche mit den Randbedingungen (61) übereinstimmen. $|l|^2$ bzw. $|r|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Molekül in der linksdrehenden bzw. rechtsdrehenden Konfiguration zu beobachten. Diese Wahrscheinlichkeit oszilliert mit der Frequenz

$$\frac{\Delta E}{\hbar} = 2 \frac{\langle R | H_w | L \rangle}{\hbar} \approx \frac{1 \mu\text{eV}}{\hbar} \approx 1 \text{ GHz} = \frac{1}{1 \text{ ns}} . \quad (64)$$

Weil ΔE typischerweise von der Größenordnung $1 \mu\text{eV}$ ist, sollten die rechts- bzw. linksdrehenden Formen chiraler Moleküle typischerweise für nicht viel länger als etwa 1 ns stabil sein. Wenn es so wäre, dann wäre es eine experimentell überaus anspruchsvolle Aufgabe, die optische Aktivität überhaupt nachzuweisen. Bekanntlich ist es aber nicht so. Tatsächlich befinden sich chirale Moleküle, abgesehen von den aller kleinsten, stabil in der rechts- oder linksdrehenden Form, und wechseln diese Form über Monate und Jahre hinweg nicht. Warum nicht? Was ist falsch an unserer Berechnung?

Der Fehler besteht darin, dass wir das chirale Molekül als abgeschlossenes System betrachtet und sämtliche Wechselwirkungen mit der Umgebung ignoriert haben. Wenn man aber im Anfängerpraktikum die optische Aktivität von Zuckermolekülen in wässriger Lösung untersucht, dann wechselwirken die Zuckermoleküle ständig mit den Wassermolekülen ihrer Umgebung. Die reine Zustandsfunktion $\psi(t) = (61)$ des chiralen Moleküls wird aufgrund der Verschränkung mit der Umgebung durch ein Gemisch ersetzt. Der Erwartungswert des Hamilton-Operators kann für dieses Gemisch leicht berechnet werden, weil der Hilbertraum des Moleküls (soweit es seine optische Aktivität betrifft) von nur zwei Vektoren, nämlich

$|L\rangle$ und $|R\rangle$, aufgespannt wird:

$$\begin{aligned}
\langle H \rangle_\rho &\stackrel{(39)}{=} \text{Sp}\{\rho H\} = \langle L|\rho H|L\rangle + \langle R|\rho H|R\rangle \\
&= \langle L|\rho|L\rangle\langle L|H|L\rangle + \langle L|\rho|R\rangle\langle R|H|L\rangle + \\
&\quad + \langle R|\rho|L\rangle\langle L|H|R\rangle + \langle R|\rho|R\rangle\langle R|H|R\rangle \\
&= \rho_{ll}H_{ll} + \rho_{lr}H_{rl} + \rho_{rl}H_{lr} + \rho_{rr}H_{rr} \\
&\stackrel{(60)}{=} (\underbrace{\rho_{ll} + \rho_{rr}}_{\approx 0})(E_0 + E_W) + (\underbrace{\rho_{lr} + \rho_{rl}}_{\approx 0}) \frac{\Delta E}{2} \\
&= \text{Sp}\{\rho\} = 1
\end{aligned} \tag{65}$$

Wir werden in (74) beweisen, dass die Spur eines Dichteoperators stets 1 ist. Und wir wissen, dass die Nicht-Diagonalelemente der Dichtematrix dekohärieren, d. h. gegen Null tendieren. Also ist die Energie des Moleküls, wenn sein Zustand mit der Umgebung verschränkt ist:

$$\langle H \rangle_\rho \approx E_0 + E_W \tag{66a}$$

Das ist zu vergleichen mit der Energie des abgeschlossenen Systems:

$$\langle H \rangle_\psi \stackrel{(60)}{=} E_0 + E_W \pm \frac{1}{2}\Delta E \quad \text{falls } \psi = |s\rangle \text{ oder } \psi = |a\rangle \tag{66b}$$

Offensichtlich bewirkt die Verschränkung mit der Umgebung

$$\Delta E \xrightarrow{\text{Verschränkung mit Umgebung}} 0 . \tag{67}$$

$\Delta E \approx 0$ bedeutet nach (63), dass das Molekül, wenn es anfangs die links- bzw. rechtsdrehende Konfiguration hat, für immer – oder zumindest sehr lange – in diesem Zustand bleibt. Das liegt daran, dass die Dekohärenz in *viel kürzerer Zeit* eintritt als der 1 ns, in der nach der Abschätzung (64) das isolierte Molekül in die enantiomere Konfiguration wechseln würde. In Tabelle 1 auf

Seite 26 wird die Dekohärenzrate eines 10 nm großen Objekts durch Streuung von Molekülen der Raumluft mit $10^{16}\text{nm}^{-2}\text{s}^{-1}$ angegeben. Während man zur Fixierung der Struktur eines chiralen Moleküls typischerweise etwa $10\times$ kleinere Objekte als die hier angenommene Größe von 10 nm zugrunde legen muss, dürfte dies durch die weitaus größere Moleküldichte einer wässrigen Lösung gegenüber Luft mehr als ausgeglichen werden.

Auch die Struktur anderer, nicht chiraler Moleküle wird durch Dekohärenz stabilisiert. Und auch mehr oder weniger große Aggregate von Molekülen (sprich Festkörper) verdanken ihre geometrische Stabilität der Verschränkung mit der Umgebung. Die Verschränkung bewirkt, dass ein Messgerät, wenn es einmal in geeigneter Weise zur Messung der Observablen Q gebaut wurde, diese Struktur dauerhaft beibehält, und nicht unversehens zu einem Messgerät anderer Observabler Q' , Q'' , ... mutiert.

Dieser Effekt läuft der Intuition völlig zuwider! Anschaulich hätte man vermutet, dass ein Molekül oder ein Festkörper, dessen genaue Form dauerhaft unverändert erhalten werden soll, gegen „Störungen“ aus der Umgebung möglichst perfekt abgeschirmt werden sollte. Aber das genaue Gegenteil ist der Fall: Es sind gerade die ständigen, unkontrollierbaren Wechselwirkungen mit der Umgebung, welche die Unveränderlichkeit der geometrischen Form des Objekts garantieren. Große Moleküle, und erst recht makroskopische Festkörper, werden in Eigenzuständen des Ortsoperators stabilisiert, weil diese Zustände *weniger robust* gegen Verschränkung mit der Umgebung sind als die Eigenzustände des Paritätsoperators und des Hamiltonoperators.

In diesem Sinn wird zu Recht manchmal gesagt, dass die Dekohärenz das „Erscheinen der klassischen Welt aus der Quantenwelt“ erklären kann. Die Verschränkung mit der Umgebung macht aus diffus wabernden quantentheoretischen Nebelschwaden auf verblüffende, und doch verstehbare Weise formstabile klassische

Körper.

9 Weitere Eigenschaften des Dichteoperators

Der Dichteoperator teilt viele Eigenschaften mit Projektoren. Wegen

$$(|a\rangle\langle b|)^+ = (\langle b|)^+ (|a\rangle)^+ = |b\rangle\langle a| \quad (68)$$

ist der Dichteoperator genauso wie jeder Projektor hermitesch, denn er ist gleich seinem transponierten konjugiert-komplexen. Also sind alle Eigenwerte von Projektoren und Dichteoperatoren reell. Ein Projektor hat nur eine Eigenfunktion, nämlich den Zustandsvektor, auf den er projiziert. Der Eigenwert zu dieser Eigenfunktion ist 1:

$$P_\psi|\psi\rangle = |\psi\rangle \underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_1 = 1|\psi\rangle \quad (69)$$

Sämtliche Vektoren $|s\rangle$ jeder beliebigen Basis¹ sind Eigenfunktionen des Dichteoperators mit Eigenwert w_s :

$$\rho|s\rangle = \sum_{s'} w_{s'}|s'\rangle \underbrace{\langle s'|s\rangle}_{\delta_{ss'}} = w_s|s\rangle \quad (70)$$

Der Erwartungswert eines Projektors ist in jedem beliebigen Zustand ≥ 0 , was als „nicht-negativ definit“ bezeichnet wird:

$$\langle\phi|P_\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = |\langle\psi|\phi\rangle|^2 \geq 0 \quad (71)$$

Für den Dichteoperator gilt das gleiche:

$$\langle\phi|\rho|\phi\rangle = \sum_s w_s \langle\phi|s\rangle\langle s|\phi\rangle = \sum_s w_s |\langle s|\phi\rangle|^2 \geq 0 \quad (72)$$

¹ Wir erinnern an (40): Der Dichteoperator ρ kann nach jeder beliebigen Basis des Hilbertraums entwickelt werden.

Die Spur eines Projektors ist

$$\text{Sp}\{P_\psi\} = \text{Sp}\{|\psi\rangle\langle\psi|\} \stackrel{(14)}{=} \langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (73)$$

Dass für den Dichteoperator das gleiche gilt, zeigen wir in zwei Schritten.

$$\text{Sp}\{\rho\} = \sum_s w_s \text{Sp}\{|s\rangle\langle s|\} \stackrel{(14)}{=} \sum_s w_s \langle s|s\rangle = \sum_s w_s \quad (74a)$$

Jetzt setzen wir voraus, dass der Vektor $|\psi_W\rangle$ auf 1 normiert ist, so dass

$$1 = \langle\psi_W|\psi_W\rangle \stackrel{(30)}{=} \sum_s \sum_r c_{Wrs}^* c_{Wrs} \stackrel{(35)}{=} \sum_s w_s \quad (74b)$$

gilt. Wenn einer der Koeffizienten w_s gleich Eins ist, dann entartet ρ zu einem Projektor:

$$w_k = 1 \stackrel{(74b)}{\iff} w_s = 0 \quad \forall s \neq k \quad (75)$$

Denn dann ist ρ idempotent, was die definierende Eigenschaft eines Projektors ist:

$$\rho \rho = |k\rangle \underbrace{\langle k|k\rangle}_{1} \langle k| = |k\rangle \langle k| = \rho \quad (76)$$

Falls jedoch mindestens zwei Koeffizienten w_s von Null verschieden sind, dann sind alle $w_s < 1$. In diesem Fall ist der Dichteoperator kein Projektor, weil er nicht idempotent ist:

$$\rho \rho = \sum_s \sum_{s'} w_s w_{s'} |s\rangle \underbrace{\langle s|s'\rangle}_{\delta_{ss'}} \langle s'| = \sum_s \underbrace{w_s^2}_{< w_s} |s\rangle \langle s| \neq \rho \quad (77)$$

Wenn die Eigenfunktionen $|s\rangle$ des Dichteoperators zeitabhängig sind, dann ist seine partielle Ableitung nach der Zeit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_s w_s \left(\frac{\partial |s\rangle}{\partial t} \langle s| + |s\rangle \frac{\partial \langle s|}{\partial t} \right). \quad (78)$$

Die Schrödingergleichung und ihre adjungierte Gleichung lauten

$$i\hbar \frac{\partial |s\rangle}{\partial t} = H|s\rangle \quad -i\hbar \frac{\partial \langle s|}{\partial t} = \langle s|H. \quad (79)$$

Damit erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \sum_s w_s \frac{i}{\hbar} \left(- (H|s\rangle) \langle s| + |s\rangle \langle \langle s|H \right) \\ &= \sum_s w_s \frac{i}{\hbar} \left(- H|s\rangle \langle s| + |s\rangle H \langle s| + \right. \\ &\quad \left. + |s\rangle \langle s|H - |s\rangle H \langle s| \right) = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho], \end{aligned} \quad (80)$$

bzw. im Fall eines Projektors

$$\frac{\partial P_\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [H, P_\psi]. \quad (81)$$

Man vergleiche das mit der Zeitableitung eines Operators Q im Heisenberg-Bild:

$$\frac{dQ(t)}{dt} = +\frac{i}{\hbar} [H, Q] + \frac{\partial Q(t)}{\partial t}. \quad (82)$$

Der letzte Summand ist Null, wenn die Observable $Q(t)$ nur kanonisch, aber nicht explizit zeitabhängig ist. Offenbar gilt für Dichteoperatoren und Projektoren

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{dP_\psi}{dt} = 0, \quad (83)$$

da sich die kanonische und die explizite Zeitabhängigkeit dieser Operatoren genau kompensieren.

Obwohl sie hermitesche Operatoren sind, sind Projektoren und Dichteoperatoren keine Observablen. Denn es gibt kein Messgerät, das als Resultat einer Messung den Eigenwert 1 eines Projektors oder den Eigenwert w_k eines Dichteoperators anzeigt, und zugleich das System S im Eigenzustand $|\psi\rangle$ des Projektors bzw. $|k\rangle$ des Dichteoperators präpariert.

Literatur

- [1] L. D. Landau: *Das Dämpfungsproblem in der Wellenmechanik*, Zeits. f. Phys. **44**, 430-441 (1927)
- [2] Kurt Gottfried: *Quantum Mechanics, Vol. I* (W.A.Benjamin Inc., New York, USA, 1966)
- [3] H. D. Zeh: *On the interpretation of measurement in quantum theory*, Found. Phys. **1**, 69-76 (1970)
- [4] John v. Neumann: *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* (Springer, Berlin, 1932)
- [5] W. Heisenberg: *Physik und Philosophie*
Gifford Lectures, Univ. St. Andrews, Schottland, 1955/56
(Hirzel Verlag, Stuttgart, 1959)
Kap. III: *Die Kopenhagener Deutung der Quantentheorie*,
http://www.astrophys-neunhof.de/serv/Heisenberg_1955.pdf
- [6] G. C. Ghirardi, A. Rimini, T. Weber: *Unified dynamics for microscopic and macroscopic systems*,
Phys. Rev. **D34**, 470-491 (1986), ([weblink](#))

-
- [7] L. de Broglie: *La Mécanique ondulatoire et la structure atomique de la matière et du rayonnement*
Journal de Physique (VI) **8**, 225–241 (1927)
- [8] David Bohm: *A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of Hidden Variables*
Phys. Rev. **85**, 166–193 (1952)
<http://www.psiquadrat.de/downloads/bohm52a.pdf>
<http://www.psiquadrat.de/downloads/bohm52b.pdf>
- [9] Hugh Everett: *Relative State Formulation of Quantum Mechanics*, Rev. Mod. Phys. **29**, 454–462 (1957)
<http://www.psiquadrat.de/downloads/everett57.pdf>
- [10] L. Hackermüller, K. Hornberger, B. Brezger, A. Zeilinger, M. Arndt: *Decoherence of matter waves by thermal emission of radiation*, Nature **427**, 711–714 (2004),
http://vcq.quantum.at/fileadmin/Publications/Arndt_Decoherence_of_matter_waves_by_thermal.pdf
- [11] E. Joos, H. D. Zeh: *The Emergence of Classical Properties Through Interaction with the Environment*
Z. Phy. B **59**, 223–243 (1985)
<http://www.decoherence.de/J+Z.pdf>
- [12] W. Heisenberg: *Physik und Philosophie*
Gifford Lectures, Univ. St. Andrews, Schottland, 1955/56
(Hirzel Verlag, Stuttgart, 1959)