Karlsruher Institut für Technologie — Institut für Theoretische Festkörperphysik

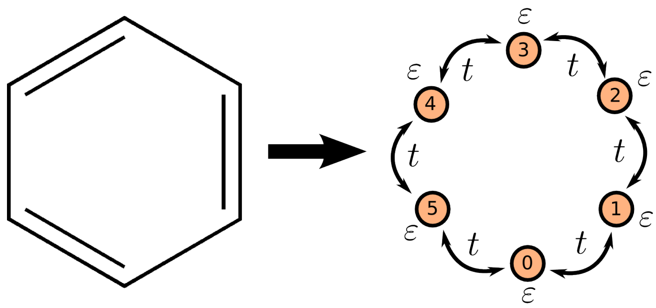
Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I   SS 14

Prof. Dr. Gerd Schön
Andreas Heimes, Dr. Andreas Poenicke

Blatt 6
Besprechung 11.06.2014

---

1. Benzol (3 Punkte)



Wir starten mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = t\sum_{n=0}^{5}\big(\,|n+1\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n+1|\,\big) + \varepsilon\sum_{n=0}^{5}|n\rangle\langle n| \qquad |0\rangle = |6\rangle$$

Wir nutzen den Hinweis und wechseln in die Fourierdarstellung, d.h. $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\sum_k e^{-ikn}|k\rangle$. Aufgrund der periodischen Randbedingungen $|0\rangle = |6\rangle$ gilt

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\sum_k |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\sum_k e^{-i6k}|k\rangle = |6\rangle\,. \tag{1}$$

$\{|n\rangle\}$ ist eine vollständige Basis, damit muss $\{|k\rangle\}$ auch eine vollsändige Basis sein. Ein Koeffizientenvergleich liefert $e^{-ik6} = 1$ und liefert damit die Bedingung

$$k_m = \frac{2\pi}{6}m = \frac{\pi}{3}m, \qquad m = 0,\,1,\,2,\,...,\,5. \tag{2}$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}\hat{H} &= t\sum_{n=0}^{5}\frac{1}{6}\sum_{kp} e^{-ik}e^{-i(k-p)n}|k\rangle\langle p| + h.c.\\ &+ \varepsilon\sum_{n=0}^{5}\frac{1}{6}\sum_{kp} e^{-i(k-p)n}|k\rangle\langle p|\,.\end{aligned} \tag{3}$$

Mit $\frac{1}{6}\sum_{n=0}^{5} e^{-i(k-p)n} = \delta_{kp}$ erhalten wir

$$\hat{H} = \sum_k 2t\cos(k)\,|k\rangle\langle k| + \varepsilon\sum_k |k\rangle\langle k|\,. \tag{4}$$

Damit erhalten wir die Eigenenergien $E_k = 2t\cos(k) + \varepsilon$ und die zugehörigen Eigenzustände

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\sum_{n=0}^{5} e^{ikn}|n\rangle \to \begin{pmatrix}\langle 0|k\rangle\\ \langle 1|k\rangle\\ \langle 2|k\rangle\\ \langle 3|k\rangle\\ \langle 4|k\rangle\\ \langle 5|k\rangle\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1\\ e^{ik}\\ e^{i2k}\\ e^{i3k}\\ e^{i4k}\\ e^{i5k}\end{pmatrix} \tag{5}$$

Anders ausgedrückt, sind die Eigenzustände in der Basis $\{|n\rangle\}$ gegeben durch $\langle n|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}e^{ikn}$.

2. Baker-Hausdorff-Theorem (2 Punkte)

Zunächst betrachten wir den Operator

$$\hat{T}(\lambda) = e^{\hat{A}\lambda}e^{\hat{B}\lambda} \tag{6}$$

und differenzieren diesen nach λ

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\hat{T}(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda} &= \hat{A}e^{\hat{A}\lambda}e^{\hat{B}\lambda} + e^{\hat{A}\lambda}\hat{B}e^{\hat{B}\lambda} = \big(\hat{A} + e^{\hat{A}\lambda}\hat{B}e^{-\hat{A}\lambda}\big)e^{\hat{A}\lambda}e^{\hat{B}\lambda} \\ &= \big(\hat{A} + e^{\hat{A}\lambda}\hat{B}e^{-\hat{A}\lambda}\big)\,\hat{T}(\lambda)\end{aligned} \tag{7}$$

Nun soll gelten

$$\big[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{A}]\big] = 0$$

damit kann die Beziehung (Aufg.3c, Blatt5)

$$[\hat{B}, \hat{A}^n] = n\hat{A}^{n-1}[B, A] \tag{8}$$

genutzt werden um $[\hat{B}, e^{-\hat{A}\lambda}]$ zu berechnen:

$$\begin{aligned}\big[\hat{B}, e^{-\hat{A}\lambda}\big] &= \sum_n (-1)^n \frac{\lambda^n}{n!}[\hat{B}, \hat{A}^n] = \sum_n (-1)^n \frac{\lambda^n}{(n-1)!}\hat{A}^{n-1}[\hat{B}, \hat{A}] \\ &= -\lambda \sum_n (-1)^{n-1}\frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!}\hat{A}^{n-1}[\hat{B}, \hat{A}] = -\lambda e^{-\hat{A}\lambda}[\hat{B}, \hat{A}].\end{aligned} \tag{9}$$

Somit kann hier der zweite Term in (7) zu

$$\begin{aligned}e^{\hat{A}\lambda}\hat{B}e^{-\hat{A}\lambda} = e^{\hat{A}\lambda}\big(e^{-\hat{A}\lambda}\hat{B} + [\hat{B}, e^{-\hat{A}\lambda}]\big) &= e^{\hat{A}\lambda}\big(e^{-\hat{A}\lambda}\hat{B} - \lambda e^{-\hat{A}\lambda}[B, A]\big) \\ &= \hat{B} - \lambda[\hat{B}, \hat{A}]\end{aligned} \tag{10}$$

umgeformt werden.

Damit folgt nun

$$\frac{\mathrm{d}\hat{T}(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda} = (\hat{A} + \hat{B} + \lambda[\hat{A}, \hat{B}])\,\hat{T}(\lambda). \tag{11}$$

$\hat{T}(\lambda)$ ist die Lösung dieser Differentialgleichung mit der Anfangsbedingung $T(0) = 1$.
Die Operatoren $\hat{A} + \hat{B}$ und $[\hat{A}, \hat{B}]$ kommutieren, damit kann (11) einfach reintegriert werden (als ob die Operatoren nur Zahlen wären), und man erhält

$$\log\hat{T}(\lambda) - \log\hat{T}(0) = (\hat{A} + \hat{B})\lambda + [\hat{A}, \hat{B}]\frac{\lambda^2}{2} \tag{12}$$

$$\hat{T}(\lambda) = e^{(\hat{A}+\hat{B})\lambda}e^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]\lambda^2}. \tag{13}$$

Vergleicht man dies mit dem ursprünglichen Ansatz (6) und setzt $\lambda = 1$

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} \quad \Rightarrow \quad e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}. \tag{14}$$

3. Messprozess (4 Punkte)

Der Hamilton-Operator des Zwei-Zustands-Systems (Qubit) ist gegeben durch

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} = \frac{E_1 + E_2}{2}\mathbb{1} + \frac{E_1 - E_2}{2}\hat{\sigma}_z = \varepsilon\mathbb{1} - \frac{\delta\varepsilon}{2}\hat{\sigma}_z, \tag{15}$$

mit $\varepsilon = \frac{E_1+E_2}{2}$ und $\delta\varepsilon = E_2 - E_1$. Das Qubit sei zunächst in einem beliebigen Zustand $|\psi\rangle = \alpha\,|1\rangle + \beta\,|2\rangle$ präpariert.

(a) [1 Punkt] $|1\rangle$ und $|2\rangle$ sind Eigzustände von $\hat{H}$ und damit

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \left(\varepsilon - \frac{\delta\varepsilon}{2}\right)|\alpha|^2 + \left(\varepsilon + \frac{\delta\varepsilon}{2}\right)|\beta|^2 = E_1|\alpha|^2 + E_2|\beta|^2 \tag{16}$$

Desweiteren gilt

$$\langle\psi|\hat{H}^2|\psi\rangle = \left(\varepsilon - \frac{\delta\varepsilon}{2}\right)^2|\alpha|^2 + \left(\varepsilon + \frac{\delta\varepsilon}{2}\right)^2|\beta|^2 = E_1^2|\alpha|^2 + E_2^2.|\beta|^2 \tag{17}$$

Die Standartabweichung $\Delta E = \sqrt{\langle\hat{H}^2\rangle - \langle\hat{H}\rangle^2}$ ist somit gegeben durch

$$\Delta E^2 = \langle\hat{H}^2\rangle - \langle\hat{H}\rangle^2 = E_1^2(|\alpha|^2 - |\alpha|^4) + E_2^2(|\beta|^2 - |\beta|^4) - 2E_1E_2|\alpha|^2|\beta|^2. \tag{18}$$

(b) [1 Punkt] Nun messen wir die Observable $\hat{A} = \hat{\sigma}_x$. Die Eigenwerte von $\hat{A}$ sind $a_{1,2} = \pm 1$, die zugehörigen Eigenzustände

$$|a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1\rangle + |2\rangle\big), \qquad |a_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1\rangle - |2\rangle\big) \tag{19}$$

Wir erkennen, dass

$$\langle a_1|\psi\rangle = \frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}} \text{ und } \langle a_2|\psi\rangle = \frac{\alpha-\beta}{\sqrt{2}} \tag{20}$$

Damit messen wir den Eigenwert $a_1 = 1$ mit der Wahrscheinlichkeit $P(a_1) = |\langle a_1|\psi\rangle|^2 = \frac{|\alpha+\beta|^2}{2}$ und den Eigenwert $a_2 = -1$ mit der Wahrscheinlichkeit $P(a_2) = |\langle a_2|\psi\rangle|^2 = \frac{|\alpha-\beta|^2}{2}$.

(c) [1 Punkt] Unmittelbar nach der Messung in (b) messen wir die Energie $\hat{H}$. Die Eigenzustände von $\hat{H}$ sind gerade $|1\rangle$ und $|2\rangle$. Nach der Messung in (b) ist der Zustand gegeben durch $|a_1\rangle$ oder $|a_2\rangle$. Sei $P(a_1)$ die Wahrscheinlichkeit a_1 zu messen und $P(E_1|a_1)$ die bedingte Wahrscheinlichkeit E_1 zu messen, wenn unmittelbar zuvor a_1 gemessen wurde, so bezeichnen wir

$$P(E_1, a_1) = P(E_1|a_1)P(a_1) \tag{21}$$

als gemeinsame Wahrscheinlichkeit zuerst a_1 und dann E_1 zu messen. Wir erhalten also

$$P(E_1|a_1) = |\langle 1|a_1\rangle|^2 = \frac{1}{2} \tag{22}$$

$$P(E_2|a_1) = |\langle 2|a_1\rangle|^2 = \frac{1}{2} \tag{23}$$

$$P(E_1|a_2) = |\langle 1|a_2\rangle|^2 = \frac{1}{2} \tag{24}$$

$$P(E_2|a_2) = |\langle 2|a_2\rangle|^2 = \frac{1}{2} \tag{25}$$

Die gemeinsamen Wahrscheinlichkeiten sind also gegeben durch

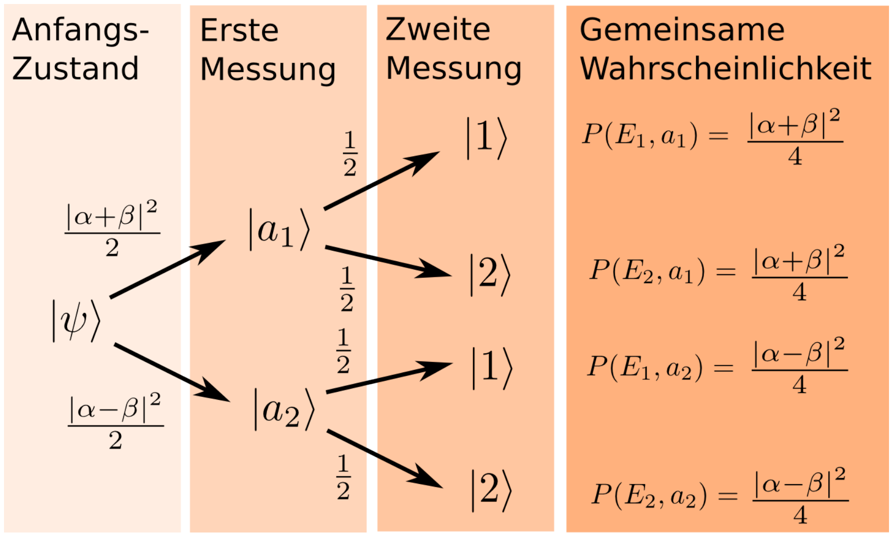
$$P(E_1, a_1) = \frac{|\alpha+\beta|^2}{4} \tag{26}$$

$$P(E_2, a_1) = \frac{|\alpha+\beta|^2}{4} \tag{27}$$

$$P(E_1, a_2) = \frac{|\alpha-\beta|^2}{4} \tag{28}$$

$$P(E_2, a_2) = \frac{|\alpha-\beta|^2}{4} \tag{29}$$

Bemerkung: Die Gesamtwahrscheinlichkeit, E_1 zu messen, ist gegeben durch $P_{\hat{H}\hat{A}}(E_1) = P(E_1, a_1) + P(E_1, a_2) = \frac{|\alpha+\beta|^2}{4} + \frac{|\alpha-\beta|^2}{4}$. Hätten wir nur die Energie gemessen, so hätten wir für die Wahrscheinlichkeit, E_1 zu messen, $P_{\hat{H}}(E_1) = |\langle 1|\psi\rangle|^2 = |\alpha|^2$ erhalten, d.h. $P_{\hat{A}\hat{H}}(E_1) \neq P_{\hat{H}}(E_1)$.



(d) [1 Punkt] Nun werde das Qubit im Grundzustand $|1\rangle$ präpariert. Die Eigenwerte und Eigenzustände der Observablen $\hat{B} = \hat{\sigma}_y$ sind gegeben durch

$$b_1 = 1, \qquad |b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\,|1\rangle + i\,|2\rangle\,\big) \tag{30}$$

$$b_2 = -1, \qquad |b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\,|1\rangle - i\,|2\rangle\,\big) \tag{31}$$

$$\tag{32}$$

Für die erste Messung von $\hat{B}$ erhalten wir also

$$P(b_1) = |\langle b_1|1\rangle|^2 = \frac{1}{2}, \qquad P(b_2) = |\langle b_2|1\rangle|^2 = \frac{1}{2} \tag{33}$$

Unmittelbar danach messen wir $\hat{A} = \hat{\sigma}_x$ und erhalten mit $|a_{1,2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\,|1\rangle \pm |2\rangle\,\big)$

$$P(a_{1,2}|b_1) = |\langle a_{1,2}|b_1\rangle|^2 = \frac{1}{2}, \qquad P(a_{1,2}|b_2) = |\langle a_{1,2}|b_2\rangle|^2 = \frac{1}{2} \tag{34}$$

und damit für die gemeinsamen Wahrscheinlichkeiten

$$P(a_1, b_1) = \frac{1}{4}, \tag{35}$$

$$P(a_2, b_1) = \frac{1}{4}, \tag{36}$$

$$P(a_1, b_2) = \frac{1}{4}, \tag{37}$$

$$P(a_2, b_2) = \frac{1}{4}. \tag{38}$$