Moderne Theoretische Physik I

Grundlagen der Quantenmechanik

Blatt 6

Prof. A. Metelmann
S. Böhling, L. Orr, V. Stangier
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Abgabe bis: 09.06.2023, 14:00 Uhr

Das Übungsblatt wird in Gruppen von maximal 3 Personen bearbeitet. Die Abgabe erfolgt digital über ILIAS.

Aufgabe 1. Eigenschaften des adjungierten Operators (5 Punkte)

Das Adjungierte eines Operators $\hat{A}$, der auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ wirkt, wird mit $\hat{A}^\dagger$ bezeichnet und kann folgendermaßen definiert werden:

$$\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \theta \rangle = \left(\langle \theta | \hat{A} | \psi \rangle \right)^* \quad \text{oder auch} \quad \langle \psi | \hat{A} | \theta \rangle = \left(\langle \theta | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle \right)^*$$

für beliebige Vektoren $|\psi\rangle$ und $|\theta\rangle$ in $\mathcal{H}$. Hier bezeichnet z^* das komplex Konjugierte einer komplexen Zahl z . Benutzen Sie diese Definition und zeigen Sie für die Operatoren $\hat{A}, \hat{B}$, die auf $\mathcal{H}$ wirken, dass folgende Eigenschaften gelten:

1. (1 Punkt) $(\hat{A}|\psi\rangle)^\dagger = \langle \psi | \hat{A}^\dagger$
2. (1 Punkt) $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$
3. (1 Punkt) $(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger$
4. (1 Punkt) $(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$
5. (1 Punkt) $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$.

Nehmen Sie an, dass die üblichen Eigenschaften eines inneren Produkts erfüllt sind.

Aufgabe 2. Eigenschaften der Spur (6 Punkte)

Gegeben sei ein Hilbertraum $\mathcal{H}$ mit endlicher Dimension d , ein linearer Operator $\hat{A}$, der auf $\mathcal{H}$ wirkt, und eine orthonormale Basis $\{|\psi_n\rangle\} \in \mathcal{H}$ mit $n = 1, \dots, d$. Wir können die Spur von $\hat{A}$ in dieser orthogonalen Basis definieren als

$$\text{tr}_\psi[\hat{A}] = \sum_{n=1}^d \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle.$$

1. (2 Punkte) Zeigen Sie für beliebige Operatoren $\hat{A}, \hat{B}$, dass

$$\text{tr}_\psi[\hat{A}\hat{B}] = \text{tr}_\psi[\hat{B}\hat{A}].$$

Verwenden Sie dieses Ergebnis, um zu zeigen, dass

$$\text{tr}_\psi[\hat{A}\hat{B}\hat{C}] = \text{tr}_\psi[\hat{C}\hat{A}\hat{B}] = \text{tr}_\psi[\hat{B}\hat{C}\hat{A}].$$

Diese Eigenschaft ist die Invarianz der Spur unter zyklischen Vertauschungen. Wir können die Produkte in der Spur nicht beliebig permutieren, aber wir können sie vom Ende and das Anfang der Spur verschieben.

2. (2 Punkte) Definieren Sie den Basiswechseloperator $\hat{E}_\psi^\theta = \sum_{n=1}^d |\psi_n\rangle \langle \theta_n|$ wobei $\{|\psi_n\rangle\}$ und $\{|\theta_n\rangle\}$ zwei orthonormale Basen von $\mathcal{H}$ sind. Berechnen Sie dann das Inverse von $\hat{E}_\psi^\theta$ und zeigen Sie, dass $(\hat{E}_\psi^\theta)^{-1} = \hat{E}_\theta^\psi$, d.h., dass $\hat{E}_\psi^\theta \hat{E}_\theta^\psi = \mathbb{1}$. Welche Art Operator ist $\hat{E}_\psi^\theta$? Zeigen Sie schließlich, dass dieser Operator tatsächlich eine Basisänderung bewirkt, d.h. zeigen Sie, dass $\langle \psi_j | \hat{A} | \psi_k \rangle = \langle \theta_j | \hat{E}_\theta^\psi \hat{A} \hat{E}_\psi^\theta | \theta_k \rangle$.
3. (1 Punkt) Gegeben seien wieder $\{|\psi_n\rangle\}$ und $\{|\theta_n\rangle\}$ als orthonormale Basen von $\mathcal{H}$. Definieren Sie die Spur über die $\{|\psi_n\rangle\}$ -Basis wie in der Einleitung und definieren sie die Spur über die $\{|\theta_n\rangle\}$ -Basis als $\text{tr}_\theta[\hat{A}] = \sum_{n=1}^d \langle \theta_n | \hat{A} | \theta_n \rangle$. Zeigen Sie für einen beliebigen Operator $\hat{A}$, dass

$$\text{tr}_\psi[\hat{A}] = \text{tr}_\theta[\hat{A}].$$

Die Spur ist also unabhängig von der gewählten Orthonormalbasis. Wir verwenden die basisunabhängige Notation $\text{tr}[\hat{A}]$.

4. (1 Punkt) In der Vorlesung wurde die kanonische Kommutatorrelation $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbb{1}$ für Orts- und Impulsoperator eingeführt. Benutzen Sie die Kommutatorrelation und die Eigenschaften der Spur, um zu zeigen, dass es nicht möglich ist, Orts- und Impulsoperatoren zu definieren als Operatoren, die auf einen endlichdimensionalen Hilbertraum wirken.

Aufgabe 3. Dichtematrix (9 Punkte)

Dichtematrizen sind wichtige Objekte um Quantensysteme zu beschreiben. Während ein Zustandsvektor $|\psi\rangle$ nur bei Quantensystemen in einem reinen Zustand Anwendung finden kann, lässt sich durch eine Dichtematrix $\hat{\rho}$ auch ein Quantensystem in einem gemischten Zustand beschreiben.

1. (2 Punkte) Beweisen Sie, dass der Erwartungswert einer Observablen $\hat{A}$ die Ungleichung $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \geq 0$ für ein beliebiges $|\psi\rangle$ erfüllt, wenn $\hat{A}$ keine negativen Eigenwerte hat.
Tipp: Sie können benutzen, dass die Eigenbasis $\{|a_n\rangle\}$ vollständig ist, d.h. $\sum_n |a_n\rangle \langle a_n| = \mathbb{1}$.
2. (2 Punkte) Beweisen Sie, dass der Ausdruck

$$\hat{\rho} = \sum_{j=1}^n p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \quad (1)$$

tatsächlich eine Dichtematrix beschreibt. Hier bezeichnet $p_j \in [0, 1]$ die Wahrscheinlichkeit das System in Zustand $|\psi_j\rangle$ zu finden. D.h. zeigen Sie, dass $\hat{\rho}$ positiv semi-definit ist ($\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \geq 0$ für jedes beliebige $|\psi\rangle$), und dass $\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$.

3. (1 Punkt) Betrachten Sie einen Hermiteschen Operator $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, d.h. $\hat{A}$ ist eine Observable. Beweisen Sie für die Dichtematrix in Gl. 1, dass gilt:

$$\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \sum_{j=1}^n p_j \langle \psi_j | \hat{A} | \psi_j \rangle \quad , \quad (2)$$

d.h., dass der Erwartungswert von $\hat{A}$ in Zustand $\hat{\rho}$ das Gleiche ergibt wie der Erwartungswert in Bezug auf p_j bei einem "Erwartungswert eines reinen Zustands".

4. (3 Punkte) Betrachten Sie den speziellen Fall $n = 2$ in Gl. 1. Zeigen Sie, dass diese Darstellung nicht einzigartig ist, d.h. finden Sie paarweise verschiedene und normierte $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ und Wahrscheinlichkeiten $p_j, q_j \in [0, 1]$, sodass

$$\sum_{j=1}^2 p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| = \sum_{j=1}^2 q_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \quad . \quad (3)$$

5. (1 Punkt) Ein Zustand $\hat{\rho}$ heißt *rein*, wenn es einen Vektor $|\psi\rangle$ gibt, sodass $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|$. Falls ein solcher Vektor nicht existiert, dann heißt der Zustand *gemischt* und kann geschrieben werden als $\hat{\rho} = \sum_{j=1}^n p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|$. Beweisen Sie, dass $\hat{\rho}$ ein reiner Zustand ist, wenn $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$.