Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2021

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann
Obertutor: Dr. Carsten Littek

Übungsblatt 8

Besprechung in den virtuellen Übungsgruppen in der Woche 07. - 11. Juni 2021
Bitte geben Sie maximal 2 Aufgaben per Übungsgruppensystem zur Korrektur an Ihre Tutorin / Ihren Tutor!
Nutzen Sie dazu den Link `https://uebungen.physik.uni-heidelberg.de/h/1291`

1. *Verständnisfragen*

a) Was ist ein quantenmechanischer Drehimpuls? Diskutieren Sie den Unterschied zur korrespondenzmäßigen Definition.

b) Welche besonderen Eigenschaften zeichnen die Kugelflächenfunktionen aus? Vergleichen Sie die Kugelflächenfunktionen mit den Basisfunktionen der Fouriertransformation.

c) Erklären Sie die Notwendigkeit und die Bedeutung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten.

2. *Exponentialdarstellung von Drehmatrizen*

Wir betrachten die Matrizen $(T^a)_{bc} = -\mathrm{i}\epsilon_{abc}$,

$$T^1 = -\mathrm{i}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T^2 = -\mathrm{i}\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T^3 = -\mathrm{i}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Eine beliebige reell-asymmetrische 3×3-Matrix lässt sich als Linearkombination $\mathrm{i}\varphi_a T^a$ der sogenannten Generatoren T^a schreiben. Hier haben wir die Einstein'sche Summenkonvention benutzt und summieren über gleiche Indices.

a) Zeigen Sie, dass für beliebiges reell antisymmetrisches X die Matrix $T = \mathrm{e}^X$ orthogonal ist.

b) Zeigen Sie, dass
$$\mathrm{tr}(T^a T^b) = 2\delta^{ab} \quad \text{und} \quad [T^a, T^b] = \mathrm{i}\epsilon_{abc}T^c.$$

c) Überzeugen Sie sich, dass $(\mathrm{i}T^1)^2 = -\,\mathrm{diag}(0, 1, 1), (\mathrm{i}T^1)^3 = -\mathrm{i}T^1, (\mathrm{i}T^1)^4 = \mathrm{diag}(0, 1, 1)$, etc., und analog für T^2 und T^3.

d) Berechnen Sie $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi T^1}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi T^2}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi T^3}$. Die resultierenden Matrizen sollten Drehungen mit dem Winkel φ um die x_1, x_2 bzw. x_3-Achse beschreiben.

3. *Parität*

Der Paritätsoperator $\hat{P}$ ist definiert als ein Operator, der wie folgt auf die Ortswellenfunktion $\psi(\vec{x})$ wirkt,
$$\hat{P}\,\psi(\vec{x}) \equiv \psi(-\vec{x}).$$

a) Zeigen Sie die folgenden Eigenschaften des Paritätsoperators,
$$\hat{P}^2 = \hat{I},$$
$$\hat{P}^\dagger = \hat{P},$$
wobei $\hat{I}$ der Einsoperator ist. Zeigen Sie außerdem, dass $\hat{P}$ unitär ist und die Eigenwerte ± 1 hat.

b) Berechnen Sie die Kommutatoren $[\hat{\vec{x}}, \hat{P}]$ und $[\hat{\vec{p}}, \hat{P}]$.

c) Berechnen Sie $[\hat{H}, \hat{P}]$ für einen eindimensionalen harmonischen Oszillator. Was impliziert das Ergebnis für die Energieeigenzustände? Welche Parität hat der n-te Zustand? Stellen Sie einen Zusammenhang zwischen der Parität und der (Anti-)Symmetrie der Wellenfunktion her.
Hinweis: Betrachten Sie zunächst den Grundzustand. Für die angeregten Zustände ist es hilfreich, zunächst $\hat{P}\,\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{P}$ zu berechnen und das Ergebnis dann zu verwenden.

4. *Datenbanksuche mit Quantencomputern*

Die Suche nach einem bestimmten Datensatz in einer unsortierten Datenbank mit N Einträgen erfordert durchschnittlich $N/2$ Vergleichsoperationen. Liegen die Daten in einem Quantencomputer als quantenmechanischer Überlagerungszustand $|D\rangle$ vor, reichen im Prinzip $\sim N$ Quantenoperationen und eine einzige Messung. Der folgende berühmte Algorithmus stammt von K.L. Grover*. Er wurde vor kurzem zu Testzwecken in einem einfachen Quantencomputer realisiert†. Die Strategie besteht darin, den Ausgangszustand $|D\rangle$ durch geschickte Wahl des Hamiltonoperators in solcher Weise unitär zu transformieren, dass im Anschluss die Messung einer Observable $\hat{K}$ mit beliebig hoher Wahrscheinlichkeit die gesuchte Antwort liefert.
Unsere Datenbank soll N unterschiedliche Einträge $d_1, \ldots, d_N$ haben, die der Einfachheit halber ganze Zahlen $d_k \in 1, \ldots, n$ sind. Die Problemstellung lautet: Ermittle die Position $\tilde{k}$ eines bestimmten Eintrags $\tilde{d} = d_{\tilde{k}}$ in der Datenbank. Wir benötigen hier einen $N \times n$-dimensionalen Zustandsraum. Eine Orthonormalbasis sei gegeben durch die Zustände

$$|k; d\rangle \quad \text{mit} \quad k = 1, \ldots, N \text{ und } d = 1, \ldots, n.$$

Sie erfüllen $\langle k; d\,|\,l; e\rangle = \delta_{kl}\delta_{de}$. Für die Observable $\hat{K}$ gelte

$$\hat{K}\,|k; d\rangle = k\,|k; d\rangle\,.$$

Wir können nun jeden *möglichen* Datenbankeintrag durch einen dieser Basisvektoren darstellen. Steht z.B. an 5. Stelle in der Datenbank die Zahl 100, ordnen wir den Basisvektor $|5; 100\rangle$ zu. Man kann nach diesem Schema den *gesamten* Datenbankinhalt als *einen* Überlagerungszustand

$$|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^{N} |k; d\rangle$$

schreiben.

a) Zeigen Sie, dass $|D\rangle$ normiert ist und berechnen Sie $\langle \tilde{k}; \tilde{d}\,|\,D\rangle$.

b) Gegeben sei der Zustand $|D\rangle$. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit $P(K = \tilde{k})$, dass die Messung von $\hat{K}$ bereits das gewünschte Ergebnis $K = \tilde{k}$ ergibt?
Hinweis: Argumentieren Sie, dass $P(K = \tilde{k}) = |\langle \tilde{k}; \tilde{d}\,|D\rangle|^2$. Vergleichen Sie mit der klassischen Suche.

c) Man nutzt die Zeitentwicklungsoperatoren

$$\hat{U} = \mathbb{1} - 2 \sum_{l=1}^{N} |l; \tilde{d}\rangle\,\langle l; \tilde{d}| \quad \text{und} \quad \hat{V} = \mathbb{1} - 2\,|D\rangle\,\langle D|\,.$$

Zeigen Sie, dass $\hat{U}$ und $\hat{V}$ unitär sind. Wie wirken diese Operatoren auf die Basiszustände und $|D\rangle$?

---

*Informationen dazu finden Sie hier: `https://arxiv.org/pdf/quant-ph/9605043`, `https://arxiv.org/abs/1201.1707`, `https://de.wikipedia.org/wiki/Grover-Algorithmus`. Siehe auch: `https://arxiv.org/abs/quant-ph/9508027`, `https://de.wikipedia.org/wiki/Shor-Algorithmus`

†Informationen dazu finden Sie unter: `https://dornsife.usc.edu/news/stories/1126/quantum-computer-built-inside-a-diamond/`

d) Gegeben sei wieder der Zustand $|D\rangle$. Wir führen nun mit unserem Quantencomputer *ohne zu messen* einmal die unitäre Transformation ("Grover-Iteration")

$$|D\rangle \to -\hat{V}\hat{U}\,|D\rangle = |D_1\rangle$$

durch und messen anschließend $\hat{K}$. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit $P_1(K = \tilde{k}) = |\langle \tilde{k}; \tilde{d}\,|D_1\rangle|^2$? Hat sie sich gegenüber b) verbessert?

e) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit nachdem Sie die Transformation aus d) r mal angewendet haben?
Schreiben Sie hierzu $|D\rangle$ und $|D_r\rangle$ als orthogonale Kombination

$$|D\rangle = \sin\phi_0\,|\tilde{k}; \tilde{d}\rangle + \cos\phi_0\,|T\rangle\,, \quad |D_r\rangle = \sin\phi_r\,|\tilde{k}; \tilde{d}\rangle + \cos\phi_r\,|T\rangle$$

und zeigen Sie, dass $\sin\phi_0 = 1/\sqrt{N}$ ist. Führen Sie eine vollständige Induktion über r durch, indem Sie, die Änderung des Winkels ϕ_r pro Iteration berechnen. Zeigen Sie damit, dass $\phi_r = (2r+1)\phi_0$ und somit

$$P_r(K = \tilde{k}) = \sin^2\left((2r+1)\phi_0\right).$$

Betrachten Sie den Fall $N \gg 1$. Wie muss man r wählen, um mit großer Sicherheit das gewünschte Ergebnis zu messen?