

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

- Was ist ein quantenmechanischer Drehimpuls? Diskutieren Sie den Unterschied zur korrespondenzmäßigen Definition.
- Welche besonderen Eigenschaften zeichnen die Kugelflächenfunktionen aus? Vergleichen Sie die Kugelflächenfunktionen mit den Basisfunktionen der Fouriertransformation.
- Erklären Sie die Notwendigkeit und die Bedeutung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten.

2. Exponentialdarstellung von Drehmatrizen

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

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

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

- Zeigen Sie, dass für beliebiges reell antisymmetrisches X die Matrix $T = e^X$ orthogonal ist.
- Zeigen Sie, dass
$$\text{tr}(T^a T^b) = 2\delta^{ab} \quad \text{und} \quad [T^a, T^b] = i\epsilon_{abc} T^c.$$
- Überzeugen Sie sich, dass $(iT^1)^2 = -\text{diag}(0, 1, 1)$, $(iT^1)^3 = -iT^1$, $(iT^1)^4 = \text{diag}(0, 1, 1)$, etc., und analog für T^2 und T^3 .
- Berechnen Sie $e^{i\varphi T^1}$, $e^{i\varphi T^2}$, $e^{i\varphi T^3}$. 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,

$$\hat{P} \psi(\vec{x}) \equiv \psi(-\vec{x}).$$

- Zeigen Sie die folgenden Eigenschaften des Paritätsoperators,

$$\begin{aligned} \hat{P}^2 &= \hat{I}, \\ \hat{P}^\dagger &= \hat{P}, \end{aligned}$$

wobei \hat{I} der Einsoperator ist. Zeigen Sie außerdem, dass \hat{P} unitär ist und die Eigenwerte ± 1 hat.

- b) Berechnen Sie die Kommutatoren $[\hat{x}, \hat{P}]$ und $[\hat{p}, \hat{P}]$.
- 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, \dots, d_N haben, die der Einfachheit halber ganze Zahlen $d_k \in 1, \dots, n$ 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

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

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”)

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

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

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

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

Übungsblatt 8: Lösung

1. Verständnisfragen

- a) Als quantenmechanischer Drehimpuls wird jeder Operator \hat{J} bezeichnet, der hermitesch $\hat{J}^\dagger = \hat{J}$ ist und dessen Lie-Algebra durch den Kommutator

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{J}_k$$

gegeben ist. Hier bezeichnen die Indizes i, j, k die Komponenten des quantenmechanischen Drehimpulses. Der Vektor dieses Drehimpulses ist keine Messgröße, da die Komponenten nicht vertauschen. Allerdings sind \hat{J}^2 und eine Komponente (üblicherweise \hat{J}_3) Messgrößen.

Nach dem Korrespondenzprinzip ist ein quantenmechanischer Drehimpuls gegeben durch den klassischen Ausdruck $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$, indem man den Ort und Impuls durch die entsprechenden Operatoren ersetzt. Dies ist allerdings nur einer von vielen quantenmechanischen Drehimpulsen.

- b) Die Kugelflächenfunktionen erfüllen folgende Eigenschaften:

- $Y_{l,-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{l,m}^*(\vartheta, \varphi)$
- Orthonormalität auf der Einheitskugel

$$\int d\Omega Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) Y_{l',m'}^*(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

- Vollständigkeit

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta', \varphi') = \delta_D(\varphi - \varphi') \delta_D(\cos \vartheta - \cos \vartheta')$$

- Eigenfunktionen des zwei-dimensionalen Laplace-Operators auf der Kugeloberfläche mit Eigenwerten $-l(l+1)$

Aufgrund dieser Eigenschaften können Funktionen $f(\vartheta, \varphi)$ auf der Kugel als Reihe von Kugelflächenfunktionen dargestellt werden:

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$
$$a_{lm} = \int d\Omega Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) f(\vartheta, \varphi).$$

Die Fouriermoden $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ sind ebenfalls Eigenfunktionen des Laplace-Operators, allerdings in \mathbb{R}^d mit Eigenwerten $-\vec{k}^2$. So sind beide Transformationen, d.h. Fouriertransformation und Transformation auf Kugelflächenfunktionen, basierend auf den Eigenfunktionen des Laplace-Operators.

- c) Man nehme z.B. ein System aus zwei Teilchen an, die jeweils einen Drehimpuls j_1 und j_2 haben. Das System liegt also in einem Produktzustand $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$ vor. Das System hat einen Gesamtdrehimpuls, der als Operator $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$ geschrieben werden soll, wobei die beiden Summanden auf unterschiedliche Hilberträume wirken. Der Gesamtdrehimpuls genügt ebenfalls einer Drehimpulsalgebra, siehe Teil a), und so kann eine neue Eigenbasis eingeführt werden, die nun von den Eigenwerten der Operatoren $\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}, \hat{J}_z$ abhängt. \hat{J}_z ist die z -Komponente des Gesamtdrehimpulses.

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind die Projektionen der Eigenvektoren der Gesamtdrehimpulsbasis auf die Eigenvektoren der Drehimpulsbasis beider Teilchen.

2. Exponentialdarstellung von Drehmatrizen

- a) Eine Matrix M heißt orthogonal, falls ihre Transponierte gleich der Inversen ist, also $M^\top M = \mathbb{1}$. Für eine reelle, antisymmetrische Matrix X gilt $X^\top = -X$. Daher

$$(e^X)^\top = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{X^n}{n!} \right)^\top = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(X^n)^\top}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(X^\top)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-X)^n}{n!} = e^{-X}.$$

Daraus folgt

$$(e^X)^\top X = e^{-X} e^X = \mathbb{1}.$$

- b) Einsetzen und multiplizieren der Matrizen T^i ergibt

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

$$T^1 T^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (T^2 T^1)^\top, \quad T^1 T^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (T^3 T^1)^\top, \quad T^2 T^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = (T^3 T^2)^\top.$$

Daraus können die beiden Eigenschaften geschlossen werden

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

- c) Wir wissen bereits aus b), dass $T^1 T^1 = \text{diag}(0, 1, 1)$ ist. Wir finden weiter

$$(iT^1)^3 = i^3 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} (-i) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = -i(-i) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = -iT^1$$

$$(iT^1)^4 = (iT^1)^2 (iT^1)^2 = \text{diag}(0, 1, 1).$$

Und entsprechend so weiter. Analog kann man dies für T^2 und T^3 machen.

- d) Wir zeigen die Rechnung hier für die Drehung um die x_1 -Achse:

$$e^{i\phi T^1} = \mathbb{1} + \phi (iT^1) + \frac{\phi^2}{2} (iT^1)^2 + \frac{\phi^3}{3!} (iT^1)^3 + \frac{\phi^4}{4!} (iT^1)^4 + \dots$$

$$= \mathbb{1} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \phi \\ 0 & -\phi & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\phi^2 & 0 \\ 0 & 0 & -\phi^2 \end{pmatrix} + \frac{1}{3!} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\phi^3 \\ 0 & \phi^3 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4!} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \phi^4 & 0 \\ 0 & 0 & \phi^4 \end{pmatrix} + \dots$$

Man kann nun die Einträge mit den Reihendarstellungen der trigonometrischen Funktionen identifizieren

$$\cos \phi = 1 - \frac{\phi^2}{2} + \frac{\phi^4}{4!} - \dots$$

$$\sin \phi = \phi - \frac{\phi^3}{3!} + \dots$$

Und daher gilt

$$e^{i\phi T^1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & \sin \phi \\ 0 & -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}.$$

Analog für die Matrizen T^2 und T^3 .

3. Parität

- a) Da $\hat{P}^2 \psi(\vec{x}) = \hat{P} \psi(-\vec{x}) = \psi(\vec{x})$, muss gelten, dass $\hat{P}^2 = \hat{I}$.

Da für das Skalarprodukt $\langle \phi(\vec{x}) | \hat{P} \psi(\vec{x}) \rangle$ Folgendes gilt,

$$\langle \phi(\vec{x}) | \hat{P} \psi(\vec{x}) \rangle = \int d^3x \phi^*(\vec{x}) \psi(-\vec{x}) = \int d^3x \phi^*(-\vec{x}) \psi(\vec{x}) = \langle \hat{P} \phi(\vec{x}) | \psi(\vec{x}) \rangle,$$

muss also $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$ gelten. Hieraus folgt sofort, dass $\hat{P}^\dagger \hat{P} = \hat{P}^2 = \hat{I}$, d.h. \hat{P} ist unitär und seine Eigenwerte sind ± 1 .

- b) Wendet man den Kommutator $[\hat{x}, \hat{P}]$ auf eine Ortswellenfunktion $\psi(\vec{x})$ an, so erhält man

$$[\hat{x}, \hat{P}] \psi(\vec{x}) = \vec{x} \hat{P} \psi(\vec{x}) - \hat{P} \vec{x} \psi(\vec{x}) = \vec{x} \psi(-\vec{x}) + \vec{x} \psi(-\vec{x}) = 2\vec{x} \hat{P} \psi(\vec{x})$$

und damit $[\hat{x}, \hat{P}] = 2\vec{x} \hat{P}$.

Für den Kommutator $[\hat{p}, \hat{P}]$ gilt, dass

$$[\hat{p}, \hat{P}] \psi(\vec{x}) = -i\hbar \vec{\nabla} \hat{P} \psi(\vec{x}) + \hat{P} i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{x}) = -i\hbar \vec{\nabla} \psi(-\vec{x}) - i\hbar \vec{\nabla} \psi(-\vec{x}) = -2i\hbar \vec{\nabla} \hat{P} \psi(\vec{x})$$

und damit $[\hat{p}, \hat{P}] = 2\hat{p} \hat{P}$.

Aus dem Kommutator $[\hat{x}, \hat{P}] = \hat{x} \hat{P} - \hat{P} \hat{x} = 2\hat{x} \hat{P}$ folgt sofort, dass $\hat{P} \hat{x} = -\hat{x} \hat{P}$. Analog gilt $\hat{P} \hat{p} = -\hat{p} \hat{P}$. Dies ist noch wichtig für die nächsten Teilaufgaben.

- c) Für den eindimensionalen harmonischen Oszillator ist der Hamilton-Operator gegeben durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2.$$

Der Kommutator $[\hat{H}, \hat{P}]$ berechnet sich also zu

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{P}] &= \frac{1}{2m} [\hat{p}^2, \hat{P}] + \frac{1}{2} m \omega^2 [\hat{x}^2, \hat{P}] \\ &= \frac{1}{2m} (\hat{p} [\hat{p}, \hat{P}] + [\hat{p}, \hat{P}] \hat{p}) + \frac{1}{2} m \omega^2 (\hat{x} [\hat{x}, \hat{P}] + [\hat{x}, \hat{P}] \hat{x}) \\ &= \frac{1}{m} (\hat{p} \hat{p} \hat{P} + \hat{p} \hat{P} \hat{p}) + m \omega^2 (\hat{x} \hat{x} \hat{P} + \hat{x} \hat{P} \hat{x}) \\ &= \frac{1}{m} (\hat{p}^2 \hat{P} - \hat{p}^2 \hat{P}) + m \omega^2 (\hat{x}^2 \hat{P} - \hat{x}^2 \hat{P}) = 0. \end{aligned}$$

Die Energieeigenzustände des harmonischen Oszillators sind also gleichzeitig Eigenzustände des Paritätsoperators und haben somit entweder positive oder negative Parität.

Mit

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right)$$

folgt, dass

$$\begin{aligned} \hat{P} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{P} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{P} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{P} \hat{p} \right) + \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{x} \hat{P} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \hat{P} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{P} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{P} \hat{p} \right) + \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(-\sqrt{m\omega} \hat{P} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{P} \hat{p} \right) = 0, \end{aligned}$$

und somit $\hat{P} \hat{a}^\dagger = -\hat{a}^\dagger \hat{P}$.

Die Ortsdarstellung des Grundzustands $|0\rangle$ ist gegeben durch

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

und hat somit positive Parität (Eigenwert $+1$), denn $\hat{P}\psi_0(x) = \psi_0(-x) = \psi_0(x)$. Die höheren Zustände erhält man aus dem Grundzustand gemäß

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle,$$

sodass gilt

$$\hat{P}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{P} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (-1)^n (\hat{a}^\dagger)^n \hat{P}|0\rangle = (-1)^n |n\rangle.$$

Demnach hat der Zustand $|n\rangle$ die Parität $(-1)^n$.

Zustände positiver Parität haben symmetrische Wellenfunktionen, da $\hat{P}\psi(x) = \psi(-x) = \psi(x)$, während Zustände negativer Parität (Eigenwert -1) antisymmetrische Wellenfunktionen haben, da $\hat{P}\psi(x) = \psi(-x) = -\psi(x)$.

4. Datenbanksuche mit Quantencomputern

a) Die Normierung lässt sich leicht überprüfen

$$\langle D|D\rangle = \frac{1}{N} \sum_{k,l=1}^N \langle l; d_l | k; d_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k,l=1}^N \delta_{l,k} = \frac{1}{N} \cdot N = 1.$$

Das Skalarprodukt berechnet sich wie folgt:

$$\langle \tilde{k}; d_{\tilde{k}} | D \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N \delta_{\tilde{k},k} = \frac{1}{\sqrt{N}},$$

denn der Zustand $|\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle$ ist in der Orthonormalbasis enthalten.

b) Die Wahrscheinlichkeit, dass die Messung von \hat{K} bereits den Wert \tilde{k} ergibt, legt das vierte Postulat der Kopenhagener Interpretation fest. Denn die Eigenzustände zu \hat{K} bilden die Orthonormalbasis des Systems.

Die Wahrscheinlichkeit ist also

$$P(K = \tilde{k}) = |\langle \tilde{k}; d_{\tilde{k}} | D \rangle|^2 = \frac{1}{N}$$

wie bei einer klassischen Suche.

c) Ein Operator \hat{M} ist unitär, wenn $\hat{M}^\dagger = \hat{M}^{-1}$ gilt. Für die beiden Operatoren \hat{U} und \hat{V} haben wir $\hat{U}^\dagger = \hat{U}$ und $\hat{V}^\dagger = \hat{V}$, weil $(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$ und $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ gelten. Das setzen wir ein

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U} = \mathbb{1} + \left(2 \sum_{l=1}^N |l; \tilde{d}\rangle \langle l; \tilde{d}| \right)^2 - 4 \sum_{l=1}^N |l; \tilde{d}\rangle \langle l; \tilde{d}| = \mathbb{1}$$

und analog für \hat{V} .

Die Wirkung dieser Operatoren auf einen beliebigen Basiszustand $|a; \alpha\rangle$ und $|D\rangle$ ergibt

$$\begin{aligned}\hat{U} |a; \alpha\rangle &= |a; \alpha\rangle - 2 \sum_{l=1}^N |l; \tilde{d}\rangle \langle l; \tilde{d} | a, \alpha\rangle = -|a, \alpha\rangle \\ \hat{U} |D\rangle &= |D\rangle - 2 \sum_{l=1}^N |l; \tilde{d}\rangle \langle l; \tilde{d} | D\rangle = |D\rangle - \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_l |l; \tilde{d}\rangle \\ \hat{V} |a; \alpha\rangle &= |a; \alpha\rangle - 2 |D\rangle \langle D | a; \alpha\rangle = |a; \alpha\rangle - \frac{2}{\sqrt{N}} |D\rangle \\ \hat{V} |D\rangle &= |D\rangle - 2 |D\rangle \langle D | D\rangle = -|D\rangle\end{aligned}$$

d) Wir bestimmen nun den Zustand nach einer "Grover-Iteration".

$$\begin{aligned}|D_1\rangle &= -\hat{V}\hat{U} |D\rangle \\ &= -\hat{V} \left(|D\rangle - \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_l |l; \tilde{d}\rangle \right) \\ &= |D\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}} \left(\sum_l |l; \tilde{d}\rangle - 2 \sum_l |D\rangle \langle D | l; \tilde{d}\rangle \right) \\ &= \left(1 - \frac{4}{N} \right) |D\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_l |l; \tilde{d}\rangle.\end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit nach einer Iteration \tilde{k} zu messen ist

$$P_1(K = \tilde{k}) = |\langle \tilde{k}; d_{\tilde{k}} | D_1\rangle|^2 = \left| \left(1 - \frac{4}{N} \right) \frac{1}{\sqrt{N}} + \frac{2}{\sqrt{N}} \right|^2 = \left(3 - \frac{4}{N} \right)^2 \frac{1}{N}.$$

Da die Datenbank viele Einträge hat, $N \gg 1$, ist die Wahrscheinlichkeit größer als in Teil b).

e) Zur Lösung dieser Aufgabe führen wir zwei Zustände ein

$$\begin{aligned}|D\rangle &= \sin \phi_0 |\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle + \cos \phi_0 |T\rangle \\ |D'\rangle &= \cos \phi_0 |\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle - \sin \phi_0 |T\rangle\end{aligned}$$

Aus Teil a) wissen wir bereits, dass

$$\langle \tilde{k}; d_{\tilde{k}} | D\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} = \sin \phi_0$$

gilt. Wir wenden nun den Operator \hat{U} auf $|D\rangle$ an

$$\begin{aligned}\hat{U} |D\rangle &= -\sin \phi_0 |\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle + \cos \phi_0 |T\rangle \\ &= -(\sin^3 \phi_0 + \sin \phi_0 \cos^2 \phi_0) |\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle + (\cos^3 \phi_0 + \cos \phi_0 \sin^2 \phi_0) |T\rangle \\ &= -(\sin^3 \phi_0 + 2 \sin \phi_0 \cos^2 \phi_0 - \sin \phi_0 \cos^2 \phi_0) |\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle + (\cos^3 \phi_0 + 2 \cos \phi_0 \sin^2 \phi_0 - \cos \phi_0 \sin^2 \phi_0) |T\rangle \\ &= (\cos^2 \phi_0 - \sin^2 \phi_0) (\sin \phi_0 |\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle + \cos \phi_0 |T\rangle) - 2 \sin \phi_0 \cos \phi_0 (\cos \phi_0 |\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle - \sin \phi_0 |T\rangle) \\ &= (\cos^2 \phi_0 - \sin^2 \phi_0) |D\rangle - 2 \sin \phi_0 \cos \phi_0 |D'\rangle \\ &= \cos(2\phi_0) |D\rangle - \sin(2\phi_0) |D'\rangle\end{aligned}$$

Hier haben wir in der zweiten Zeile mit $1 = \sin^2 \phi_0 + \cos^2 \phi_0$ multipliziert, in der dritten Zeile zweimal eine Null addiert und in der vierten Zeile die Terme sortiert. Zuletzt haben wir

Additionstheoreme für trigonometrische Funktionen genutzt.

Die Anwendung von $-\hat{V}$ lässt $|D\rangle$ unberührt und ändert das Vorzeichen von $|D'\rangle$. Dann haben wir nach einer Grover-Iteration

$$\begin{aligned}
 -\hat{V}\hat{U}|D\rangle &= \cos(2\phi_0)|D\rangle + \sin(2\phi_0)|D'\rangle \\
 &= (\cos(2\phi_0)\sin\phi_0 + \sin(2\phi_0)\cos\phi_0)|\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle + (\cos(2\phi_0)\cos\phi_0 - \sin(2\phi_0)\sin(\phi_0))|T\rangle \\
 &= (3\cos^2\phi_0\sin\phi_0 - \sin^3\phi_0)|\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle + (\cos^3\phi_0 - 3\sin^2\phi_0\cos(\phi_0))|T\rangle \\
 &= \sin\phi_0(3 - 4\sin^2\phi_0)|\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle + \cos\phi_0(4\cos^2\phi_0 - 3)|T\rangle \\
 &= \sin(3\phi_0)|\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle + \cos(3\phi_0)|T\rangle
 \end{aligned}$$

nach erneutem Basiswechsel. Daraus lässt sich leicht folgern, dass nach r Grover-Iterationen die Wahrscheinlichkeit \tilde{k} zu messen gleich

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

gilt.

Die Wahrscheinlichkeit ist am größten, wenn das Argument des Sinus circa $\pi/2$ ist. Das bedeutet nach

$$r \sim \frac{\pi\sqrt{N}}{4} - \frac{1}{2}$$

Iterationen, hat man mit großer Sicherheit das gewünschte Ergebnis gefunden. Damit hat dieser Algorithmus einen Aufwand von $O(\sqrt{N})$, während eine klassische Suche einen größeren Aufwand $O(N)$ benötigt.

Die Grover-Iteration kann man sich geometrische verdeutlichen anhand der Abbildung auf der nächsten Seite entnommen aus Quantum Computation and Quantum Information von Michael A. Nielsen und Isaac L. Chuang erschienen bei Cambridge University Press. In der Abbildung und ihrer Beschreibung sind die Bezeichnungen wie folgt:

- Gesuchter Zustand $|\tilde{k}; d_{\tilde{k}}\rangle := |\beta\rangle$
- Zustand senkrecht zu dem gesuchten Zustand $|T\rangle := |\alpha\rangle$
- Überlagerungszustand der gesamten Datenbank $|D\rangle := |\psi\rangle$
- Das Orakel $\hat{U} := O$
- Grover-Iteration $-\hat{V}\hat{U} := G$
- Winkel $\phi_0 = \theta$

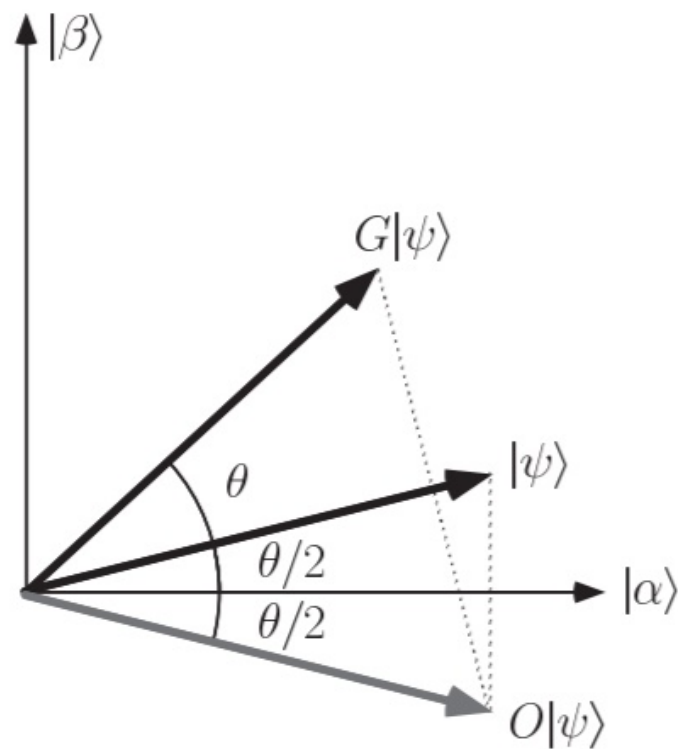


Figure 6.3. The action of a single Grover iteration, G : the state vector is rotated by θ towards the superposition $|\beta\rangle$ of all solutions to the search problem. Initially, it is inclined at angle $\theta/2$ from $|\alpha\rangle$, a state orthogonal to $|\beta\rangle$. An oracle operation O reflects the state about the state $|\alpha\rangle$, then the operation $2|\psi\rangle\langle\psi| - I$ reflects it about $|\psi\rangle$. In the figure $|\alpha\rangle$ and $|\beta\rangle$ are lengthened slightly to reduce clutter (all states should be unit vectors). After repeated Grover iterations, the state vector gets close to $|\beta\rangle$, at which point an observation in the computational basis outputs a solution to the search problem with high probability.