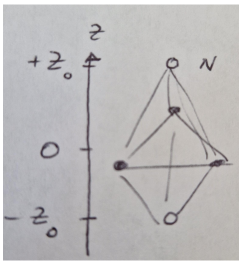
III Das Zwei-Zustands-System

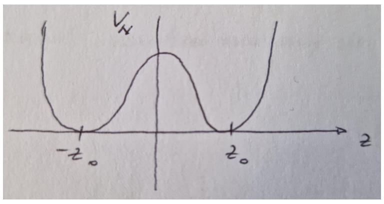
Um den nächsten Teil der mathematischen Grundlagen, der zunächst ein wenig abstrakt erscheint, zu motivieren, folgen zunächst ein paar Beispiele.

1 Motivation

(i) NH_3-Molekül:

Liegt das N-Atom über- oder unterhalb der H_3-Ebene?





Es existieren zwei Minima der potenziellen Energie, getrennt durch eine hohe, aber endliche Energiebarriere.

Es existieren also zwei Grundzustände, die wir $|L\rangle$ (linker Grundzustand) und $|R\rangle$ (rechter Grundzustand) nennen, ohne deren Wellenfunktionen im Ortsraum genauer angeben zu wollen. Bereits ohne diese Ortsrauminformation lassen sich viele Eigenschaften des Systems bereits verstehen.

Der Hamiltonian dieses Systems lässt sich dann ausdrücken als

$$H = \mathrm{E}_0 \Big(|L\rangle \langle L| + |R\rangle \langle R| \Big) + \hbar\Delta \Big(|L\rangle \langle R| + |R\rangle \langle L| \Big), \tag{III.1}$$

wobei der zweite Teil das Tunnelphänomen beschreibt. In der Basis $\{|L\rangle, |R\rangle\}$ schreibt sich der Hamiltonian

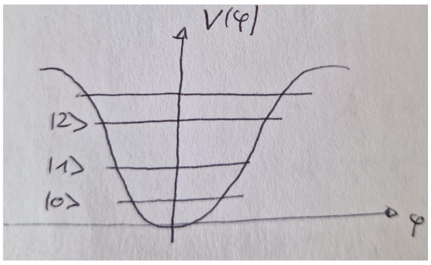
$$H = \begin{pmatrix} \mathrm{E}_0 & \hbar\Delta \\ \hbar\Delta & \mathrm{E}_0 \end{pmatrix} \tag{III.2}$$

Beide Darstellungen sind äquivalent und geben ein ungefähres Gefühl dafür, was es mit $|L\rangle$ und $|R\rangle$ auf sich hat.

(ii) Anharmonisches Potenzial (Josephsonkontakt, Cooperpaar)

Das anharmonische Potenzial zeichnet sich durch nicht-äquidistante Energieniveaus aus:

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{E}_1 - \mathrm{E}_0}{\hbar} \neq \frac{\mathrm{E}_2 - \mathrm{E}_1}{\hbar}$$



$\Rightarrow$ Anregung von nur $|1\rangle$ aus $|0\rangle$ möglich
$\Rightarrow$ Manipulationen im Unterraum $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, z.B.

$$H = \mathrm{E}_0 |0\rangle \langle 0| + \mathrm{E}_1 |1\rangle \langle 1| + \lambda f(t) \Big(|0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0| \Big), \tag{III.3}$$

wobei $f(t)$ ein zeitunabhängiges Feld darstellt.

(iii) Ein weiteres Beispiel wäre der Spin des Elektrons. Der Spin ist der intrinsische (quantisierte) Eigendrehimpuls des Elektrons $\vec{S}$ mit $S_z = \pm\frac{\hbar}{2}$; Dieser wurde durch das Stern-Gerlach Experiment nachgewiesen, bei dem sich Elektronen in einem Magnetfeld befinden ($H = H_0 + \lambda\vec{B}\vec{S}$), wodurch sich der Elektronenstrahl aufspaltet. Der Spin wird an anderer Stelle ausführlich besprochen.

2 Mathematische Grundlagen II: Dirac Notation

Wir haben bisher gesehen, dass der Zustand eines physikalischen Systems beschrieben wird durch eine Wellenfunktion, die als Funktion im Ortsraum oder als Funktion im Impulsraum auftreten kann. Der Informationsgehalt ist absolut identisch, da beide über eine Fouriertransformation miteinander verknüpft sind. Dirac hat daher eine abstrakte Notation eingeführt, die nicht mehr auf einer bestimmten „Darstellung“ beruht, sondern allein auf der Struktur des Hilbertraumes.

(i) **Ket und Bra Vektoren**

- Darstellungsunabhängiges Symbol für die Wellenfunktion:

  $$\text{„ket“} \;\; |\Psi\rangle \in \mathscr{H}$$

  „bra“ $\langle\Psi|$ entspricht im Ortsraum der komplexen Konjugation:

  $$\Psi(\vec{r}) \to \Psi^*(\vec{r}) \,,$$

  hier ist es mathematisch gesehen ein Element des Dualraums zu $\mathscr{H}$.

- **Skalarprodukt:**

$$(\varphi, \Psi) = \langle\varphi|\Psi\rangle \quad \text{„bra-ket“} \mathrel{\widehat{=}} \text{bracket}$$

mit

$$\begin{aligned}
|\lambda\Psi\rangle &= \lambda\,|\Psi\rangle \\
\langle\lambda\Psi| &= \lambda^*\,\langle\Psi| \\
\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\Psi\rangle &= \lambda_1^*\,\langle\varphi_1|\Psi\rangle + \lambda_2^*\,\langle\varphi_2|\Psi\rangle \\
\langle\varphi|\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2\rangle &= \lambda_1\,\langle\varphi|\Psi_1\rangle + \lambda_2\,\langle\varphi|\Psi_2\rangle \\
\langle\varphi|\Psi\rangle^* &= \langle\Psi|\varphi\rangle
\end{aligned}$$

(ii) Lineare Operatoren

- Für einen linearen Operator A gilt

$$\begin{aligned}
A\,|\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2\rangle &= \lambda_1\,A\,|\Psi_1\rangle + \lambda_2\,A\,|\Psi_2\rangle \\
\langle\varphi|A|\Psi\rangle &= (\varphi|A\Psi) \in \mathbb{C},
\end{aligned}$$

hierbei ist $\langle\varphi|A|\Psi\rangle$ das Matrixelement von A bezüglich $|\varphi\rangle\,, |\Psi\rangle$.

- Projektoren

$$P = |\Psi\rangle\,\langle\varphi|$$

P ist ein linearer Operator:

$$P\,|\chi\rangle = |\Psi\rangle\,\langle\varphi|\chi\rangle$$

Jedem Zustand $|\chi\rangle$ wird ein Zustand $P\,|\chi\rangle = \lambda_x\,|\Psi\rangle$ zugeordnet, man sagt $|\chi\rangle$ wird auf $|\Psi\rangle$ projiziert.

Anmerkung:

$$\underbrace{|\Psi\rangle\,\langle\varphi|}_{\textit{Operator}} \neq \underbrace{\langle\varphi|\Psi\rangle}_{\textit{Zahl}}$$

und

$$\underbrace{|\Psi\rangle\,\langle\varphi|}_{\text{Proj. auf } |\Psi\rangle} \neq \underbrace{|\varphi\rangle\,\langle\Psi|}_{\text{Proj. auf } |\varphi\rangle}$$

- Orthogonalprojektoren:

$$P_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi| \,;\; \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$$
$$P_\Psi|\varphi\rangle = |\Psi\rangle\langle\Psi|\varphi\rangle\,,$$

  wobei $\langle\Psi|\varphi\rangle$ die Komponente von $|\varphi\rangle$ in Richtung $|\Psi\rangle$.
  Außerdem ist P_Ψ indempotent:

$$\begin{aligned} P_\Psi^2 &= P_\Psi P_\Psi \\ &= |\Psi\rangle\underbrace{\langle\Psi|\Psi\rangle}_{=1}\langle\Psi| = P_\Psi \end{aligned}$$

- Projektoren auf Unterräume:
  Der Unterraum h_n wird aufgespannt durch orthonormierte Zustände $\{|\varphi_j\rangle\},\ j = 1, 2, \dots, n$. Mathematisch ausgedrückt bedeutet dies

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{\mathrm{i,j}}.$$

  Der Projektor dieses Unterraums schreibt sich daher

$$P_n = \sum_{j=1}^{n} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\,,$$

  und das Produkt aus Projektor und dem Zustand $|\varphi\rangle$

$$P_n|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{n} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\varphi\rangle\,.$$

  Auch für diesen Projektor gilt

$$\begin{aligned} P_n^2 &= \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} |\varphi_j\rangle\underbrace{\langle\varphi_j|\varphi_k\rangle}_{\delta_{\mathrm{i,j}}}\langle\varphi_k| \\ &= P_n. \end{aligned}$$

  Es folgt somit für $|\varphi\rangle \in h_n$

$$\begin{aligned} &\Rightarrow |\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j |\varphi_j\rangle \\ &\Rightarrow P_n|\varphi\rangle = |\varphi\rangle\,. \end{aligned}$$

(iii) **Hermitesche Konjugation**

$$
\begin{aligned}
|\Psi\rangle &\longleftrightarrow \langle\Psi| \\
A|\Psi\rangle = |\Psi_A\rangle &\longleftrightarrow \langle\Psi_A| = \langle\Psi| A^\dagger
\end{aligned}
$$

$A^\dagger$ ist der zu A adjungierte Operator

- Für komplexe Konjugation gilt

$$
\begin{aligned}
\langle\varphi|A|\Psi\rangle^* &= \langle\varphi|\Psi_A\rangle^* \\
&= \langle\Psi_A|\varphi\rangle \\
&= \langle\Psi|A^\dagger|\varphi\rangle \\
\Rightarrow \langle\Psi|A^\dagger|\varphi\rangle &= \langle\varphi|A|\Psi\rangle^*
\end{aligned}
$$

  Das Matrixelement von $A^\dagger$ zwischen $\langle\Psi|$ und $|\varphi\rangle$ entspricht also dem konjugierten Matrixelement von A zwischen $\langle\varphi|$ und $|\Psi\rangle$ (adjungiert = transponiert*).

- $A^\dagger$ ist ebenfalls ein linearer Operator:

$$
\begin{aligned}
\langle\Psi|A^\dagger|\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2\rangle &= \langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|A|\Psi\rangle^* \\
&= \Big[\lambda_1^* \langle\varphi_1|A|\Psi\rangle + \lambda_2^* \langle\varphi_2|A|\Psi\rangle\Big]^* \\
&= \lambda_1 \langle\Psi|A^\dagger|\varphi_1\rangle + \lambda_2 \langle\Psi|A^\dagger|\varphi_2\rangle .
\end{aligned}
$$

  Insbesondere gilt

$$
\begin{aligned}
A|\Psi\rangle &= |A\Psi\rangle = |\Psi_A\rangle , \\
\langle\Psi| A^\dagger &= \langle A\Psi| = \langle\Psi_A| .
\end{aligned}
$$

- Außerdem gilt
  - $\langle\varphi|A|\Psi\rangle = \langle\varphi|A\Psi\rangle = \left\langle A^\dagger\varphi\middle|\Psi\right\rangle$, da $A = (A^\dagger)^\dagger$
  - $(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$
  - $(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$
  - $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

  Für die Projektoren $P = |u\rangle\langle v|$ und $P^\dagger = |v\rangle\langle u|$ lässt sich daher folgendes ableiten:

$$
\begin{aligned}
\langle\varphi|P|\Psi\rangle^* &= \langle\Psi|P^\dagger|\varphi\rangle \\
&= \langle\varphi|u\rangle^* \langle v|\Psi\rangle^* \\
&= \langle\Psi| \underbrace{|v\rangle\langle u|}_{=P^\dagger} |\varphi\rangle .
\end{aligned}
$$

Regeln zur Hermiteschen Konjugation
Bei einem Ausdruck aus Konstanten, bras, kets und Operatoren erhält man den hermitesch konjugierten Ausdruck, in dem man

(a) Konstanten $\rightarrow$ komplex konjugierte Konstanten

$$\begin{aligned} \langle\varphi| &\rightarrow |\varphi\rangle \\ |\Psi\rangle &\rightarrow \langle\Psi| \\ A &\rightarrow A^\dagger \end{aligned}$$

(b) die Reihenfolge der Faktoren umkehrt (bei Konstanten gleichgültig)

Ein paar Beispiele hierzu:

1.) Da sowohl λ als auch $\langle v|A|\varphi\rangle$ Skalare sind, gilt

$$\begin{aligned} \lambda\,|u\rangle\,\langle v|A|\varphi\rangle\,\langle\Psi| &= B \\ \Rightarrow B^\dagger &= |P\rangle\,\langle\varphi|A^\dagger|v\rangle\,\langle u|\,\lambda^* \\ &= \lambda^*\,\langle\varphi|A^\dagger|v\rangle\,|\Psi\rangle\,\langle u| \end{aligned}$$

2.) Definiert man den Zustand

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \lambda\,|u\rangle\,\langle v|\varphi\rangle \\ \Rightarrow \langle\Psi| &= \langle\varphi|v\rangle\,\langle u|\,\lambda^* \\ &= \lambda^*\,\langle\varphi|v\rangle\,\langle u|\,. \end{aligned}$$

- Ein linearer Operator heißt hermitesch, falls

$$\begin{aligned} A &= A^\dagger \\ \Rightarrow\ \langle\Psi|A|\varphi\rangle^* &= \langle\varphi|A|\Psi\rangle \\ \langle\Psi|A\varphi\rangle &= \langle A\Psi|\varphi\rangle \end{aligned}$$

  Dies gilt bspw. für Projektoren

$$P_\Psi = |\Psi\rangle\,\langle\Psi| = P_\Psi^\dagger$$

- Eigenwerte einer hermiteschen Matrix sind reell:

$$\begin{aligned} A\,|\varphi_n\rangle = \lambda_n\,|\varphi_n\rangle &\Rightarrow\ \langle\varphi_n|A|\varphi_n\rangle = \lambda_n \\ \lambda_n^* &= \langle\varphi_n|A|\varphi_n\rangle^* = \langle\varphi_n|A^\dagger|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|A|\varphi_n\rangle = \lambda_n \\ &\Rightarrow \lambda_n \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Eine weitere Schlussfolgerung hieraus ist, dass ein Operator, der einer Observable (eine beobachtbare Größe) zugeordnet ist, hermitesch sein muss, da wir in der Realität nur reelle Messwerterte messen.

3 Hamiltonoperator

Nachdem nun die Diracnotation eingeführt wurde, widmen wir uns wieder dem Zwei-Zustandssystem.

(i) Im Folgenden arbeiten wir in einem Hilbertraum, der aufgespannt wird von zwei Zuständen: $|1\rangle, |2\rangle$. Ein allgemeiner Hamiltonoperator hat dann die Form

$$H = \mathrm{E}_1 |1\rangle \langle 1| + \mathrm{E}_2 |2\rangle \langle 2| + W_{12} |1\rangle \langle 2| + W_{21} |2\rangle \langle 1| \tag{III.4}$$

mit $W_{12} = W_{21}^*$ aufgrund der Hermitizität. In Matrixdarstellung:

$$H = \begin{pmatrix} \mathrm{E}_1 & W_{12} \\ W_{12}^* & \mathrm{E}_2 \end{pmatrix} \tag{III.5}$$

(ii) Nun können wir auch schon einmal den Unterschied zwischen Bra und Ket explizit fassen:

$$|1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \;,\; |2\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \;,\; \langle 1| \rightarrow (1\ 0) \;,\; \langle 2| \rightarrow (0\ 1)\,. \tag{III.6}$$

Dann schreiben wir z.B.

$$|1\rangle\langle 2| \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0\ 1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} , \tag{III.7}$$

aber

$$\langle 1|2\rangle = (1\ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0\,. \tag{III.8}$$

(iii) Pauli Matrizen:

Wir führen ein

$$
\begin{aligned}
\sigma_0 &= \mathbb{1}, \\
\sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\
\sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\
\sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

Die Matrizen $\sigma_1,\ \sigma_2,\ \sigma_3$ heißen Pauli-Matrizen; sie bilden zusammen mit σ_0 eine Basis im Raum der hermiteschen 2×2 Matrizen.

Anmerkung: In der Literatur sind die Pauli Matrizen auch definiert als $\sigma_x = \sigma_1,\ \sigma_y = \sigma_2,\ \sigma_z = \sigma_3$.

Satz: Eine allgemeine, hermitesche 2×2 Matrix lässt sich durch 4 unabhängige Komponenten ausdrücken durch

$$
M = \begin{pmatrix} a & b - ic \\ b + ic & d \end{pmatrix}; \quad a, \ldots, d \in \mathbb{R} \tag{III.9}
$$

$$
\tag{III.10}
$$

Summieren wir über die Pauli Matrizen, erhalten wir

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=0}^{3} m_i \sigma_i &= \begin{pmatrix} m_0 & 0 \\ 0 & m_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & m_1 \\ m_1 & 0 \end{pmatrix} && \text{(III.11)} \\
&+ \begin{pmatrix} 0 & -im_2 \\ im_2 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m_3 & 0 \\ 0 & -m_3 \end{pmatrix} && \text{(III.12)} \\
&= \begin{pmatrix} m_0 + m_3 & m_1 - im_2 \\ m_1 + im_2 & m_0 - m_3 \end{pmatrix}. && \text{(III.13)}
\end{aligned}
$$

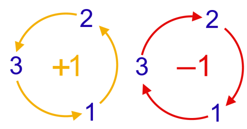
Vergleicht man die Koeffizienten, findet man, dass

$$
a = m_0 + m_3; \quad b = m_1 \tag{III.14}
$$

$$
c = m_2; \quad d = m_0 - m_3 \tag{III.15}
$$

Es gelten außerdem folgende Relationen:

$$\begin{aligned}
\sigma_k^2 &= \mathbb{1}, \text{ für } k = 0,1,2,3 \\
[\sigma_k, \sigma_j] &= 2i\, \varepsilon_{kjl}\, \sigma_l \text{ (Drehimpulsalgebra)}, \\
\{\sigma_k, \sigma_j\} &= \sigma_k\sigma_j + \sigma_j\sigma_k = 2 \cdot \delta_{kj}, \\
\sigma_1\sigma_2\sigma_3 &= i\, \mathbb{1}
\end{aligned}$$



Auf der rechten Seite ist dabei eine Visualisierung zur Anwendung des Levi-Civitas Symbol ε_{jkl} gegeben.

(iv) Zurück zum Hamiltonoperator in (i): Eigenwerte, Eigenvektoren.

Wir schreiben

$$H = \frac{E_1 + E_2}{2}\, \sigma_0 + \frac{E_1 - E_2}{2} \begin{pmatrix} 1 & \frac{2W_{12}}{E_1 - E_2} \\ \frac{2W_{12}^*}{E_1 - E_2} & -1 \end{pmatrix}, \tag{III.16}$$

so dass

$$H = \frac{E_1 + E_2}{2}\, \sigma_0 + \frac{E_1 - E_2}{2} \begin{pmatrix} 1 & \tan(\theta)\, \mathrm{e}^{-i\varphi} \\ \tan(\theta)\, \mathrm{e}^{i\varphi} & -1 \end{pmatrix} \tag{III.17}$$

mit

$$\tan(\theta) = \frac{2|W_{12}|}{E_1 - E_2}\,, \quad W_{12} = |W_{12}|\, \mathrm{e}^{-i\varphi}\,. \tag{III.18}$$

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung lautet dann

$$H|\pm\rangle = E_\pm\, |\pm\rangle\,, \tag{III.19}$$

wobei die Eigenzustände (Eigenvektoren) Linearkombinationen der Zustände $|1\rangle, |2\rangle$ sind.

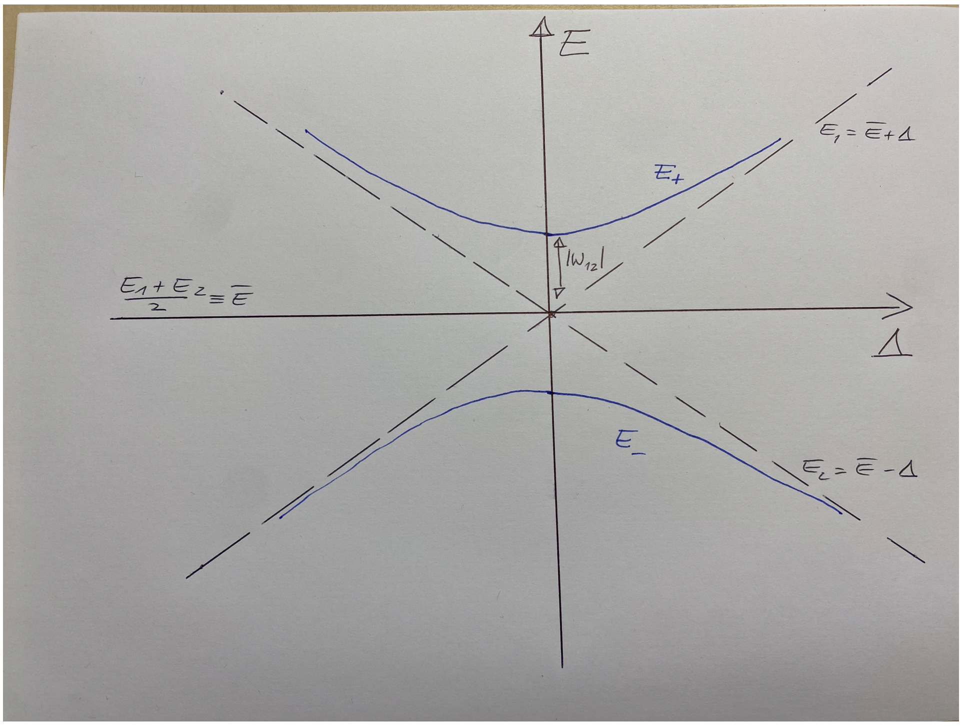
- Aus $\mathrm{Det}(H - E) = 0$ gewinnen wir zunächst die Eigenwerte

  $$E_\pm = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2} \tag{III.20}$$

  mit

  $$\Delta = \frac{E_1 - E_2}{2}\,. \tag{III.21}$$

  Für $|\Delta| \gg |W_{12}|$ hat man $E_+ \to E_1, E_- \to E_2$ falls $\Delta > 0$ bzw. entsprechend für $\Delta < 0$. Die Energien $E_\pm$ werden auch die adiabatische Energien genannt, die Energien E_1, E_2 auch diabatischen. Das sog. Adiabatentheorem der Quantenmechanik besagt, dass, in einer Situation, in der sich Δ zeitlich ändert, das System den adiabatischen Energien "folgt", falls sich diese Änderung hinreichend langsam vollzieht.



- Die entsprechenden Eigenvektoren lauten

$$|+\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi/2} \; |1\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi/2} \; |2\rangle \tag{III.22}$$

$$|-\rangle = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi/2} \; |1\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi/2} \; |2\rangle \tag{III.23}$$

mit $\langle \pm | \pm \rangle = 1, \langle + | - \rangle = 0$.

Fall 1a:$\Delta > 0$, $\Delta \gg |W_{12}|$:

$$\Rightarrow \tan(\theta) \rightarrow 0^+ \; , \; \theta \rightarrow 0^+ \tag{III.24}$$

$$\Rightarrow |+\rangle \rightarrow e^{-i\varphi/2} \, |1\rangle \tag{III.25}$$

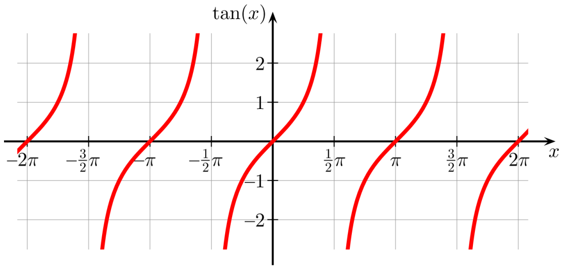
$$\Rightarrow |-\rangle \rightarrow e^{i\varphi/2} \, |2\rangle \tag{III.26}$$

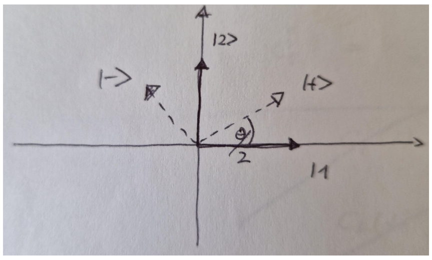
Fall 1b: $|\Delta| \gg |W_{12}|$, $\Delta < 0$:

$$\Rightarrow \tan(\theta) \to 0^- \ , \ \theta \to \pi \tag{III.27}$$
$$\Rightarrow |+\rangle \to e^{i\varphi/2} |2\rangle \tag{III.28}$$
$$\Rightarrow |-\rangle \to e^{-i\varphi/2} |1\rangle \tag{III.29}$$

Fall 2: $\Delta \to 0^+$:

$$\tan(\theta) \to +\infty \Rightarrow \theta \to \frac{\pi}{2}$$
$$\cos\left(\frac{\pi}{4}\right) = \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$
$$\Rightarrow |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-i\varphi/2} |1\rangle + e^{i\varphi/2} |2\rangle\right],$$
$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[-e^{-i2} |1\rangle + e^{i\varphi/2} |2\rangle\right]$$





Für $\varphi = 0$ gilt daher

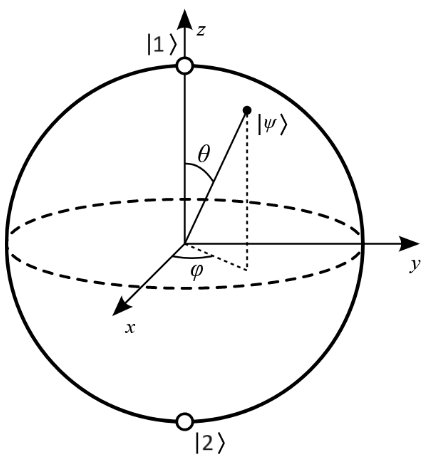
$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\pm|1\rangle + |2\rangle\Big),$$

eine gleich gewichtete Linearkombination von $|1\rangle$ und $|2\rangle$. Auf der linken Seite ist diese bildlich dargestellt.

Offenbar wird im $|1\rangle, |2\rangle$ Raum jeder Zustand durch Angabe zweier Winkel θ, φ eindeutig festgelegt. Daher liegt es nahe, beliebige Zustände durch Punkte auf der Oberfläche einer Einheitskugel zu beschreiben. Dies ist die sog. *Blochkugel*.

Der Zustand $\theta = 0$, $\varphi = 0$ entspricht $|1\rangle$, der Zustand $\theta = \pi$, $\varphi = 0$ entspricht $|2\rangle$. Allgemein wird ein Zustand dargestellt als

$$|\theta, \varphi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi/2} |1\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi/2} |2\rangle$$



Zustandsänderungen bewirken Drehungen auf der Blochkugel. Durch den Zustandsraum, aufgespannt durch die zwei Zustände $|1\rangle$, $|2\rangle$, lassen sich unendlich viele weitere Zustände $|\theta, \varphi\rangle$ "kodieren". Diese Zustände werden im Kontext der Quanteninformationsverarbeitung als quantum bits (qubits) bezeichnet.

Wenn wir zurück an den Anfang des Kapitels denken, lässt sich in Bezug auf das NH_3 Molekül also sagen, dass N die Eigenzustände $|+\rangle$, $|-\rangle$ hat, mit der Energieaufspaltung : $\hbar\Delta \ll \omega\hbar \equiv E_1 = E_2$.

(v) Übergangswahrscheinlichkeit, zeitunabhängige Störung

Aus der stationären Schrödingergleichung für ein Zweiniveau-System ohne Kopplung (Nebendiagonalelemente)

$$H\,|k\rangle = E_k\,|k\rangle\,;\; k = 1, 2 \tag{III.30}$$

folgt mit $E_k = \hbar\omega_k$ für die zeitabhängige Lösung

$$|k(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}\,|k\rangle \tag{III.31}$$

$$= e^{-i\omega_k t}\,|k\rangle\,. \tag{III.32}$$

Wir wollen nun die zeitabhängige Schrödingergleichung mit Kopplung der Zustände $|1\rangle, |2\rangle$ betrachten, d.h.

$$i\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\Psi(t)\rangle = (H + W)\,|\Psi(t)\rangle \tag{III.33}$$

mit $W = W_{12}|1\rangle\langle 2| + W_{21}|2\rangle\langle 1|$ und $W_{12} = W_{21}^*$. Wir können schreiben

$$|\Psi(t)\rangle = c_1(t)\;e^{-i\omega_1 t}\,|1\rangle + c_2(t)\;e^{-i\omega_2 t}\,|2\rangle \tag{III.34}$$

mit Amplituden $c_i(t)$, die es zu bestimmen gilt. Einsetzen liefert

$$i\hbar\left[\dot{c}_1\;e^{-i\omega_1 t}\,|1\rangle - i\omega_1 c_1\;e^{-i\omega_1 t}\,|1\rangle + \dot{c}_2\;e^{-i\omega_2 t}\,|2\rangle - i\omega_2 c_2\;e^{-i\omega_2 t}\,|2\rangle\right] \tag{III.35}$$

$$= \hbar\omega_1 c_1\;e^{-i\omega_1 t}\,|1\rangle + \hbar\omega_2 c_2\;e^{-i\omega_2 t}\,|2\rangle + c_1\;e^{-i\omega_1 t} W\,|1\rangle + c_2\;e^{-i\omega_2 t} W\,|2\rangle \tag{III.36}$$

Man erhält somit durch Projektion (Skalarprodukt) auf die Zustände $|1\rangle, |2\rangle$

$$i\hbar\dot{c}_1 e^{-i\omega_1 t} = c_2\;e^{-i\omega_2 t}\;\underbrace{\langle 1|W|2\rangle}_{W_{12}}, \tag{III.37}$$

$$i\hbar\dot{c}_2\;e^{-i\omega_2 t} = c_1\;e^{-i\omega_1 t}\;\underbrace{\langle 2|W|1\rangle}_{W_{21}}. \tag{III.38}$$

Stellt man diese Gleichungen um, bekommt man für $\dot{c}_1$ und $\dot{c}_2$

$$\alpha) \quad \dot{c}_1 = -\frac{i}{\hbar} c_2 \; e^{-i\Delta\omega t} W_{12}, \tag{III.39}$$

$$\beta) \quad \dot{c}_2 = -\frac{i}{\hbar} c_1 \; {}^{i\Delta\omega t} W_{21} \tag{III.40}$$

mit $\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1$.
Aus α) erhalten wir

$$\ddot{c}_1 = \underbrace{-\frac{\Delta\omega}{\hbar} W_{12} c_2 \; e^{-i\Delta\omega t}}_{=-i\Delta\omega\dot{c}_1} - \frac{i}{\hbar} \dot{c}_2 \; e^{-i\Delta\omega t} \, W_{12} \tag{III.41}$$

$$\Rightarrow \ddot{c}_1 = -i\Delta\omega\dot{c}_1 - \frac{i}{\hbar} \dot{c}_2 \; e^{-i\Delta\omega t} \, W_{12} \tag{III.42}$$

$$\Rightarrow \dot{c}_2 = (\ddot{c}_1 + i\Delta\omega\dot{c}_1) \; e^{i\Delta\omega t} \frac{i\hbar}{W_{12}}. \tag{III.43}$$

Aus β) folgt dann

$$(\ddot{c}_1 + i\Delta\omega\dot{c}_1) \; e^{i\Delta\omega t} = -\frac{|W_{12}|^2}{\hbar^2} c_1 \; e^{i\Delta\omega t} \tag{III.44}$$

$$\Rightarrow \ddot{c}_1 + i\Delta\omega\dot{c}_1 + \frac{|W_{12}|^2}{\hbar^2} c_1 = 0. \tag{III.45}$$

Dies entspricht der Differenzialgleichung eines „gedämpften“harmonischen Oszillators. Daher wählen wir den Ansatz

$$c_1 \propto e^{\lambda t} \to \lambda^2 + i\Delta\omega\lambda + \frac{|W_{12}|^2}{\hbar^2} = 0 \tag{III.46}$$

$$\Rightarrow \lambda_\pm = -i\frac{\Delta\omega}{2} \pm \sqrt{-\frac{\Delta\omega^2}{4} - \frac{|W_{12}|^2}{\hbar^2}} \tag{III.47}$$

$$\Rightarrow \lambda_\pm = \frac{i}{2}\Big[-\Delta\omega \pm \sqrt{\Delta\omega^2 + \frac{4|W_{12}|^2}{\hbar^2}}\Big] \tag{III.48}$$

Die allgemeine Lösung ist die Überlagerung aus λ_+ und λ_-. Ferner folgt aus α)

$$c_2 = \dot{c}_1 \; e^{i\Delta\omega t} \frac{i\hbar}{W_{12}}. \tag{III.49}$$

- Zustandsgleichung:
  Mit der Anfangsbedingung $c_1(0) = 0, \;\; c_2(0) = 1$ (bis auf globale Phase!)

erhalten wir somit

$$
\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle = &-i\, e^{-i\Delta\omega t}\frac{2W_{12}}{\hbar\Omega}\sin\Big(\Omega\frac{t}{2}\Big)\Big)\,|1\rangle && \text{(III.50)}\\
&+\Big[\cos\Big(\Omega\frac{t}{2}\Big) - i\frac{\Delta\omega}{\Omega}\sin\Big(\Omega\frac{t}{2}\Big)\Big]\;|2\rangle && \text{(III.51)}
\end{aligned}
$$

mit $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle \iff |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ und

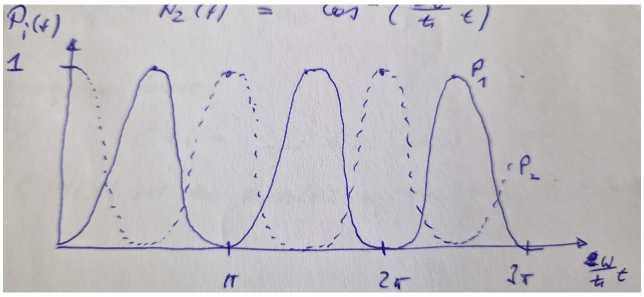
$$
\Omega = \sqrt{\Delta\omega^2 + \frac{4|W_{12}|^2}{\hbar^2}} \tag{III.52}
$$

- Betrachte Resonanz $\Delta\omega = 0$ und $-iW_{12} = W \in \mathbb{R}$ $(\Omega = 2W/\hbar)$

$$
\Rightarrow |\Psi(t)\rangle = \sin\Big(\frac{W}{\hbar}t\Big)\,|1\rangle + \cos\Big(\frac{W}{\hbar}t\Big)\,|2\rangle \tag{III.53}
$$

$$
\tag{III.54}
$$

Die Oszillation entspricht auf der Blochkugel einer Drehung auf dem Großkreis durch die Nord-Südpol-Achse um den Winkel $\theta/2 = Wt/\hbar$. Wählt man die Zeiten so, dass $\theta = \pi/2$, spricht man von einem $\pi/2$-Puls etc. (Qubits: Gatter-Operationen; ESR: Resonante Absorption).



$$
\begin{aligned}
|c_1(t)|^2 = &P_1(t) = \sin^2\Big(\frac{W}{\hbar}t\Big)\\
&P_2(t) = \cos^2\Big(\frac{W}{\hbar}t\Big)
\end{aligned}
$$

4 Mathematische Grundlagen III: Darstellungstheorie

(i) **Basen**

diskret	kontinuierlich
$\{\lvert i\rangle\}$ $\langle i\vert j\rangle = \delta_{\mathrm{i,j}}$	$\{\lvert\alpha\rangle\}$ $\langle\alpha\vert\alpha'\rangle = \delta(\alpha-\alpha')$

$|i\rangle$ ist der einer Basisfunktion $u_i(\vec{r})$ zugeordnete Zustandsvektor in $\mathscr{H}$, z.B.

$$\begin{aligned} \text{Basisfunktion:} \quad & v_p(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi h)^{3/2}}\, e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar} \\ \text{Eigenwert...Eigenvektor:} \quad & |\vec{p}\rangle \end{aligned}$$

- **Darstellung von kets (siehe auch oben explizit für das Zweiniveau-system:**

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_i c_i\, |i\rangle\,, \quad c_i = \langle i|\Psi\rangle \\ |\Psi\rangle &= \sum_i |i\rangle\, \langle i|\Psi\rangle \\ \Rightarrow \mathbb{1} &= \sum_i |i\rangle\, \langle i|\,, \quad \text{(Vollständigkeit)} \end{aligned}$$

  $\langle i|\Psi\rangle$ ist die Darstellung von $|\Psi\rangle$ bezüglich der Basis $\{|i\rangle\}$.

  Analog dazu gilt im kontinuierlichen

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\; c(\alpha)\;\, |\alpha\rangle\,;\;\; c(\alpha) &= \langle \alpha|\Psi\rangle\,, \\ \mathbb{1} &= \int \mathrm{d}\alpha\;\, |\alpha\rangle\, \langle\alpha| \end{aligned}$$

- **Darstellung von bras:**

$$\langle\Psi| = \sum_i \langle\Psi|i\rangle\, \langle i| = \sum_i c_i^*\, \langle i|$$

  $\{\langle\Psi|i\rangle\}$ ist die Darstellung von $\langle\Psi|$ bezüglich der Basis $\{|i\rangle\}$.

- **Skalarprodukt:**

$$
\begin{aligned}
|\Psi\rangle &= \sum_i |i\rangle \underbrace{\langle i|\Psi\rangle}_{c_i} \\
|\varphi\rangle &= \sum_i |i\rangle \underbrace{\langle i|\varphi\rangle}_{b_i} \\
\langle\varphi|\Psi\rangle &= \sum_{i,j} \langle\varphi|j\rangle \underbrace{\langle j|i\rangle}_{=\delta_{\mathrm{i,j}}} \langle i|\Psi\rangle \\
&= \sum_i \langle\varphi|i\rangle \langle i|\Psi\rangle \quad \text{„Parceval Identität“} \\
&= \sum_i b_i^* c_i
\end{aligned}
$$

Darstellung des Skalarprpdukts bezüglich der Basis $\{|i\rangle\}$.

- **Darstellung von Operatoren:**

$$
\begin{aligned}
|\Psi\rangle &= \sum_j |j\rangle \langle j|\Psi\rangle \\
A|\Psi\rangle &= \sum_i |i\rangle \; \langle i|A|\Psi\rangle \\
&= \sum_i |i\rangle \; \langle i|A|j\rangle \, \langle j|\Psi\rangle
\end{aligned}
$$

$\langle i|A|j\rangle$ ist dabei die Darstellung von A bezüglich de Basis $\{|i\rangle\}$. Matrixdarstellung $\rightarrow$ jeweils das Element der i-ten Zeile und j-ten Spalte (vergl. Heisenbergsche Matrizenmechanik).

- **Hermitesche Operatoren:**

$$
\begin{aligned}
A &= A^\dagger \\
A_{ij}^* = \langle i|A|j\rangle^* &= \langle j|A^\dagger|i\rangle = \langle j|A|i\rangle = A_{ji} \\
\Rightarrow A_{ij} &= A_{ji}^*,
\end{aligned}
$$

D.h. $A = (A^t)^*$, insbesondere gilt $A_{ii} \in \mathbb{R}$.

(ii) **Ortsdarstellung**

- Basisfunktion: $\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$, Vektor $|\vec{r}_0\rangle \in \mathscr{H}$

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r}_0|\vec{r}_0'\rangle &= \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0') \\
|\Psi\rangle &= \int \mathrm{d}^3 r \ \underbrace{\langle \vec{r}|\Psi\rangle}_{\text{Ortsdarstellung von}|\Psi\rangle} |\vec{r}\rangle \\
\langle \vec{r}|\vec{r}_0\rangle &= \ \underbrace{\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)}_{\text{Ortsdarstellung von } \vec{r}_0}
\end{aligned}$$

- Vollständigkeit:

$$\int \mathrm{d}^3 r \ |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \mathbb{1}$$

in der Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned}
&\langle \vec{r}_0| \int \mathrm{d}^3 r \ |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}|\vec{r}_0'\rangle \\
&= \int \mathrm{d}^3 r \ \langle \vec{r}_0|\vec{r}\rangle \langle \vec{r}|\vec{r}_0'\rangle \\
&= \langle \vec{r}_0|\vec{r}_0'\rangle \\
&= \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0')
\end{aligned}$$

- Operatoren:

$$\underbrace{\langle \vec{r}|A|\Psi\rangle}_{=\Psi_A(\vec{r})} = \int \mathrm{d}^3 r \ \underbrace{\langle \vec{r}|A|\vec{r}'\rangle}_{A(\vec{r},\vec{r}') \text{ Ortsdarstellung von A}} \ \langle \vec{r}'|\Psi\rangle$$

- Konjugation:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r}|\vec{A}|\vec{r}'\rangle^* &= \langle \vec{r}'|A^\dagger|\vec{r}\rangle \\
A(\vec{r},\vec{r}')^* &= A(\vec{r}',\vec{r})
\end{aligned}$$

- Skalarprodukt:

$$\begin{aligned}
\langle \varphi|\Psi\rangle &= \int \mathrm{d}^3 r \ \langle \varphi|\vec{r}\rangle \langle \vec{r}|\Psi\rangle \\
&= \int \mathrm{d}^3 r \ \varphi(\vec{r})^* \Psi(\vec{r})
\end{aligned}$$

(iii) **Impulsdarstellung**

- Basisvektor: $|\vec{p}\rangle$, $\langle\vec{p}|\vec{p}'\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}')$
- Ortsdarstellung $|\vec{p}\rangle$:

$$\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = V_p(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}$$

- Impulsdarstellung $|\vec{r}\rangle$:

$$\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle = V_p(\vec{r})^*$$

- Vollständigkeit:

$$\int \mathrm{d}^3 r \;\; |\vec{r}\rangle\,\langle\vec{r}| = \mathbb{1}$$
$$\rightarrow \int \mathrm{d}^3 r \;\; \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle\,\langle\vec{r}|\vec{p}'\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}')$$

- Operatoren:

$$\langle\vec{p}|A|\Psi\rangle = \int \mathrm{d}^3 p'\, \underbrace{\langle\vec{p}|A|\vec{p}'\rangle}_{A(\vec{p},\vec{p}')}\,\langle\vec{p}'|\Psi\rangle$$

Beispiele zur Darstellung von Operatoren

(i) Impulsoperator in Ortsdarstellung

$$\begin{aligned}
\langle\vec{r}'|\hat{\vec{p}}|\vec{r}\rangle &= \int d^3p d^3p'\, \langle\vec{r}'|\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle \\
&= \int d^3p d^3p'\, \langle\vec{r}'|\vec{p}'\rangle\delta(\vec{p}'-\vec{p})\,\vec{p}\,\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle \\
&= \int d^3p\, \langle\vec{r}'|\vec{p}\rangle\,\vec{p}\,\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle \\
&= -i\hbar\nabla_{r'}\,\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3p\, \mathrm{e}^{i\vec{p}(\vec{r}'-\vec{r})/\hbar} \\
&= -i\hbar\nabla_{r'}\,\delta(\vec{r}'-\vec{r})\,.
\end{aligned}$$

(i) Ortsoperator in Impulsdarstellung

$$
\begin{aligned}
\langle \vec{p}'|\hat{\vec{r}}|\vec{p}\rangle &= \int d^3r d^3r'\, \langle \vec{p}'|\vec{r}'\rangle\langle \vec{r}'|\hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle \\
&= \int d^3r d^3r'\, \langle \vec{p}'|\vec{r}'\rangle\delta(\vec{r}' - \vec{r})\, \vec{r}\, \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle \\
&= \int d^3r\, \langle \vec{p}'|\vec{r}\rangle\, \vec{r}\, \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle \\
&= -i\hbar\nabla_{p'}\, \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r\, \mathrm{e}^{-i\vec{r}(\vec{p}'-\vec{p})/\hbar} \\
&= -i\hbar\nabla_{p'}\, \delta(\vec{p}' - \vec{p})\,.
\end{aligned}
$$