Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik
3. Übungsblatt

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Fachbereich Mathematik
Prof. Dr. Burkhard Kümmerer
Florian Sokoli

Wintersemester 2012/2013
22./29 November 2012

Gruppenübung

Aufgabe G1 (Die Blochsphäre)
Für Vektoren $\xi, \eta \in \mathbb{C}^2$ definieren wir $t_{\xi,\eta} : \mathbb{C}^2 \to \mathbb{C}^2$ durch

$$t_{\xi,\eta}\zeta := \xi\langle\eta,\zeta\rangle$$

Bemerkung: In der Quantenmechanik schreibt man hierfür $|\xi\rangle\langle\eta|$.

(a) Zeigen Sie, dass durch $t_{\xi,\eta}$ eine lineare Abbildung definiert wird und bestimmen Sie deren Rang in Abhängigkeit von ξ und η.

(b) Bestimmen Sie eine Matrix $A \in M_{2,2}(\mathbb{C})$ mit $t_{\xi,\eta}\zeta = A\zeta$ für alle $\zeta \in \mathbb{C}^2$ in Abhängigkeit von ξ und η.

(c) Sei nun $\xi \in \mathbb{C}^2$ ein Einheitsvektor. Zeigen Sie: Für die orthogonale Projektion P_ξ auf den von ξ erzeugten eindimensionalen Teilraum $\mathbb{C}\xi$ gilt

$$P_\xi = t_{\xi,\xi}$$

Inwiefern ist ξ eindeutig?

(d) Zeigen Sie, dass es für jeden Einheitsvektor $\xi \in \mathbb{C}^2$ eindeutig bestimmte Zahlen $z_1, z_2 \in \mathbb{C}$ mit $|z_1| = |z_2| = 1$ und einen Winkel $\vartheta \in [0,\pi]$ gibt, sodass gilt

$$\xi = \begin{pmatrix} z_1 \cos(\vartheta/2) \\ z_2 \sin(\vartheta/2) \end{pmatrix}.$$

Folgern Sie, dass es zu jeder eindimensionalen orthogonalen Projektion P eindeutig bestimmte Winkel $\vartheta \in [0,\pi]$ und $\varphi \in [0,2\pi)$ gibt, sodass gilt

$$P = \begin{pmatrix} \cos^2(\vartheta/2) & e^{-i\varphi}\sin(\vartheta/2)\cos(\vartheta/2) \\ e^{i\varphi}\sin(\vartheta/2)\cos(\vartheta/2) & \sin^2(\vartheta/2) \end{pmatrix}.$$

(e) Begründen Sie, dass die Menge der selbstadjungierten[1] 2×2 Matrizen über $\mathbb{C}$ einen $\mathbb{R}$-Vektorraum bilden und zeigen Sie, dass durch $\{\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ mit

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

eine Basis desselben gegeben ist.

[1] Zur Definition der Selbstadjungiertheit von Matrizen siehe Aufgabe H1, falls erforderlich.

(f) Stellen Sie nun die Projektion P aus d) in der Form $P = \frac{1}{2}\left(\alpha_1 \mathbb{1} + \alpha_x \sigma_x + \alpha_y \sigma_y + \alpha_z \sigma_z\right)$ mit $\alpha_1, \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z \in \mathbb{R}$ dar und vereinfachen Sie die Koeffizienten so weit wie möglich.

Hinweis: Verwenden Sie die für $x \in \mathbb{R}$ gültigen Identitäten

$$\cos^2(x) = \frac{1}{2}(1 + \cos(2x)) \quad , \quad \sin(2x) = 2\sin(x)\cos(x)$$

(g) Folgern Sie abschließend, dass es für jede eindimensionale orthogonale Projektion P auf $\mathbb{C}^2$ genau einen Einheitsvektor $(x, y, z)^T \in \mathbb{R}^3$ gibt, sodass $P = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z)$. Welchen Projektionen entsprechen die kanonischen Einheitsvektoren e_1, e_2, e_3 bzw. deren Spiegelung am Ursprung?

Bemerkung: Dieses Konzept nennt man die ***Blochsphärendarstellung*** der eindimensionalen orthogonalen Projektionen auf $\mathbb{C}^2$ und $(x, y, z)^T$ heißt der zu P gehörige ***Blochvektor***. In der Quanteninformationstheorie wird es vielfach zur Beschreibung von Qubits verwendet.

Aufgabe G2 (Flüsse linearer Differentialgleichungen 1. Ordnung mit konstanten Koeffizienten)

Es sei $A \in M_{n,n}(\mathbb{R})$. Dann besitzt das das Anfangswertproblem

$$x'(t) = Ax(t), \quad x(0) = x_0 \in \mathbb{R}^n$$

die eindeutige, globale Lösung

$$x(t) = \varphi_t(x_0),\ t \in \mathbb{R}$$

mit $\varphi_t := e^{At} \in M_{n,n}(\mathbb{R})$.

(a) Zeigen Sie die folgenden Eigenschaften der Familie linearer Abbildungen $(\varphi_t)_{t\in\mathbb{R}}$:
- $\varphi_0 = \mathrm{Id}_{\mathbb{R}^n}$
- $\varphi_{s+t} = \varphi_s \circ \varphi_t = \varphi_t \circ \varphi_s \quad \forall s, t \in \mathbb{R}$
- Für alle $t \in \mathbb{R}$ ist φ_t invertierbar mit ${\varphi_t}^{-1} = \varphi_{-t}$

Insbesondere bildet $(\varphi_t)_{t\in\mathbb{R}}$ eine abelsche Untergruppe von $\mathrm{GL}(n, \mathbb{R})$.

(b) Sei $B \subset \mathbb{R}^n$ eine Borel-messbare Menge. Beweisen Sie die für das Lebesgue-Maß λ auf $\mathbb{R}^n$ und alle $t \in \mathbb{R}$ gültige Gleichung

$$\lambda(\varphi_t(B)) = e^{t\cdot\mathrm{tr}(A)} \cdot \lambda(B)\,.$$

Warum existiert $\lambda(\varphi_t(B))$ überhaupt?

Hinweis: Verwenden Sie, dass für eine positive, messbare Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ und einen C^1-Diffeomorphismus $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ die Beziehung

$$\int_{\varphi(\mathbb{R}^n)} f\, d\lambda = \int_{\mathbb{R}^n} f \circ \varphi \cdot |\det(d\varphi)|\, d\lambda \quad (*)$$

gilt. Weiterhin ist eine beliebige messbare Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ genau dann integrierbar, wenn $f \circ \varphi \cdot |\det(d\varphi)|$ integrierbar ist und in diesem Fall gilt $(*)$ ebenso.

(c) Beweisen Sie, dass für alle $t \in \mathbb{R}$ durch

$$\begin{aligned} U_t : L^2(\mathbb{R}^n, \mathcal{B}(\mathbb{R}^n), \lambda) &\to L^2(\mathbb{R}^n, \mathcal{B}(\mathbb{R}^n), \lambda) \\ f &\mapsto f \circ \varphi_t \end{aligned}$$

ein beschränkter linearer Operator definiert wird, welcher $U_{s+t} = U_s U_t = U_t U_s$ für alle $t, s \in \mathbb{R}$ erfüllt.

(d) Beweisen Sie die Äquivalenz der folgenden Aussagen:

i. Das Vektorfeld $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, $x \mapsto Ax$ ist divergenzfrei.

ii. Es gilt $\mathrm{tr}(A) = 0$.

iii. Der Fluss φ_t ist für das Lebesgue-Maß und alle $t \in \mathbb{R}$ ***maßerhaltend***, d.h.

$$\lambda(\varphi_t(B)) = \lambda(B) \quad \forall B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^n)$$

iv. Der Operator U_t ist für alle $t \in \mathbb{R}$ unitär.

Aufgabe G3 (Positive Funktionale entsprechen positiven Maßen)
Wir betrachten das endliche System $\Omega = \{\omega_1, \dots, \omega_n\}$. Ein lineares Funktional φ auf dem Raum der Observablen $\mathrm{Abb}(\Omega, \mathbb{R})$ heißt ***positiv***, wenn für alle $f \in \mathrm{Abb}(\Omega, \mathbb{R})$ mit $f \geq 0$ auch $\varphi(f) \geq 0$ gilt. Beweisen Sie:

(a) Ist $\Sigma = \mathcal{P}(\Omega)$ und μ ein endliches Maß auf Σ, so definiert

$$\mathrm{Abb}(\Omega, \mathbb{R}) \ni f \mapsto \int_\Omega f(\omega)\, d\mu(\omega) \in \mathbb{R}$$

ein positives lineares Funktional auf $\mathrm{Abb}(\Omega, \mathbb{R})$.

(b) Für jedes positive, lineare Funktional auf $\mathrm{Abb}(\Omega, \mathbb{R})$ existiert genau ein endliches Maß μ_φ auf $\Sigma = \mathcal{P}(\Omega)$, sodass

$$\varphi(f) = \int_\Omega f(\omega)\, d\mu_\varphi(\omega) \quad \forall f \in \mathrm{Abb}(\Omega, \mathbb{R}).$$

Hausübung

Aufgabe H1 (Wiederholung: Adjungierte in der linearen Algebra)
Es seien $\mathcal{H}, \mathcal{K}$ endlichdimensionale, komplexe Vektorräume mit Skalarprodukt (insbesondere also Hilberträume). Wir bezeichnen mit $\mathcal{H}'$ bzw. $\mathcal{K}'$ die Vektorräume der linearen Funktionale auf $\mathcal{H}$ bzw. $\mathcal{K}$. Beweisen Sie nacheinander die folgenden Aussagen:

(a) Für $\xi \in \mathcal{H}$ ist die Abbildung $\varphi_\xi : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$, $\eta \mapsto \langle \xi, \eta \rangle$ ein lineares Funktional auf $\mathcal{H}$.

(b) Die Abbildung $\Phi : \mathcal{H} \to \mathcal{H}'$, $\xi \mapsto \varphi_\xi$ definiert eine antilineare, injektive Abbildung.

(c) Für jedes $\psi \in \mathcal{H}'$ existiert ein $\xi \in \mathcal{H}$ mit $\psi = \varphi_\xi$. Insbesondere ist die Abbildung Φ ein antilinearer Isomorphismus.

Bemerkung: Dies ist der ***Satz von Riesz-Fréchet*** im Falle endlichdimensionaler Hilberträume. In der Quantenmechanik benutzt man für Vektoren $\xi \in \mathcal{H}$ die Schreibweise $|\xi\rangle$ ("Ket-Vektor"), während man das zugehörige lineare Funktional φ_ξ durch $\langle\xi|$ notiert ("Bra-Vektor").

Sei im Folgenden immer $T:\mathcal{H}\to\mathcal{K}$ eine lineare Abbildung. Für $\eta\in\mathcal{K}$ definiert die Zuordnung $\mathcal{H}\ni\xi\mapsto\langle\eta,T\xi\rangle\in\mathbb{C}$ ein lineares Funktional (klarmachen, falls nötig). Nach dem Satz von Riesz-Fréchet existiert daher genau ein $\zeta\in\mathcal{H}$ mit $\langle\eta,T\xi\rangle=\langle\zeta,\xi\rangle$ für alle $\xi\in\mathcal{H}$. Wir setzen $T^*\eta:=\zeta$.

(d) Die oben definierte Abbildung $T^*:\mathcal{K}\to\mathcal{H}$ ist linear. Sie heißt die zu T ***adjungierte Abbildung***.

(e) Gilt für eine lineare Abbildung $S:\mathcal{K}\to\mathcal{H}$ die Gleichung

$$\langle T\xi,\eta\rangle=\langle\xi,S\eta\rangle\quad\forall\xi\in\mathcal{H},\,\eta\in\mathcal{K}$$

so folgt bereits $S=T^*$. Die Adjungierte ist also durch die obige Gleichung bereits eindeutig bestimmt.

Für eine Matrix A definieren wir deren ***adjungierte Matrix*** A^* durch Transposition und komponentenweise Konjugation von A, also $A^*:=\overline{A}^T$.

(f) Seien $B_1:=\{e_1,\dots,e_n\}$ bzw. $B_2:=\{f_1,\dots,f_m\}$ Orthonormalbasen von $\mathcal{H}$ bzw. $\mathcal{K}$. Ist $M_T^{B_1,B_2}$ die darstellende Matrix von T bezüglich B_1, B_2, so gilt

$$M_{T^*}{}^{B_2,B_1}=\left(M_T{}^{B_1,B_2}\right)^*$$

T heißt ***unitär***[2], wenn T die Skalarprodukte auf $\mathcal{H}$ bzw. $\mathcal{K}$ erhält, d.h. $\langle T\xi,T\eta\rangle=\langle\xi,\eta\rangle$ für alle $\xi,\eta\in\mathcal{H}$.

(g) Ist T unitär und λ ein Eigenwert von T, so gilt $|\lambda|=1$. Ferner ist T genau dann unitär, wenn T invertierbar ist mit $T^{-1}=T^*$.

T heißt ***selbstadjungiert***, wenn $\mathcal{H}=\mathcal{K}$ und $T=T^*$ gilt.

(h) Ist T selbstadjungiert, so sind die Eigenwerte von T reell und Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten stehen senkrecht aufeinander.

Der Spektralsatz der linearen Algebra besagt:

Ist $T:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$ eine selbstadjungierte lineare Abbildung, so existiert eine Orthonormalbasis $B=\{e_1,\dots,e_n\}$ von $\mathcal{H}$ bestehend aus Eigenvektoren von T.

(i) Sei $\Omega=\{1,\dots,n\}$, $\Sigma=\mathcal{P}(\Omega)$ und μ das Zählmaß auf Σ. Für eine Funktion $f\in L^2(\Omega,\Sigma,\mu)$ schreiben wir $f=(f(1),\dots,f(n))$. Dann definiert $U:\mathcal{H}\to L^2(\Omega,\Sigma,\mu)$, $\sum_{i=1}^n\alpha_ie_i\mapsto(\alpha_1,\dots,\alpha_n)$ einen unitären Operator und sind $\lambda_1,\dots,\lambda_n$ die Eigenwerte von T, so gilt für $g=(\lambda_1,\dots,\lambda_n)$

$$T=U^*M_gU\,.$$

Insbesondere sind selbstadjungierte lineare Abbildungen auf endlichdimensionalen Räumen immer unitär äquivalent zu Multiplikationsoperatoren auf einem endlichen Maßraum.

[2] Im allgemeinen bezeichnet man eine lineare Abbildung U als unitär, wenn sie isometrisch und bijektiv ist. Im Falle endlichdimensionaler Hilberträume (und nur dann!) ist diese Definition äquivalent zur hier gewählten, welche für diese Aufgabe besser geeignet ist.