Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik
4. Übungsblatt

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Fachbereich Mathematik
Prof. Dr. Burkhard Kümmerer
Florian Sokoli

Wintersemester 2012/2013
6./13 Dezember 2012

Gruppenübung

Aufgabe G1 (Positive Funktionale entsprechen positiven Maßen)
Wir betrachten das endliche System $\Omega = \{\omega_1, ..., \omega_n\}$. Ein lineares Funktional φ auf dem Raum der Observablen $\text{Abb}(\Omega, \mathbb{R})$ heißt ***positiv***, wenn für alle $f \in \text{Abb}(\Omega, \mathbb{R})$ 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

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

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

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

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

Aufgabe G2 (Funktionalkalkül für Matrizen)
Es sei $A \in M_{n,n}(\mathbb{C})$ eine normale Matrix. Dann existiert eine unitäre Matrix U, sodass $A = U\text{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_n)U^*$ mit den Eigenwerten $\lambda_1, ..., \lambda_n$ von A. Für eine Funktion $f : \sigma(A) \to \mathbb{C}$ setzen wir (vergleiche Aufgabe H1 auf Blatt 2)

$$f(A) := U\text{diag}(f(\lambda_1), ..., f(\lambda_n))U^*$$

Beweisen Sie:

(a) Für $f, g : \sigma(A) \to \mathbb{C}$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ gilt

$$\begin{aligned} (\alpha f + \beta g)(A) &= \alpha f(A) + \beta g(A) \\ (f \cdot g)(A) &= f(A)g(A) \\ \overline{f}(A) &= (f(A))^* \end{aligned}$$

(b) $\text{Id}_{\sigma(A)}(A) = A$. Insbesondere gilt für die komplexe Konjugation $f : \sigma(A) \to \mathbb{C}$, $\lambda \mapsto \overline{\lambda}$, dass $f(A) = A^*$.

(c) Ist $c \in \mathbb{C}$ und $f : \sigma(A) \to \mathbb{C}$, $\lambda \mapsto c$ die konstante c-Funktion, so gilt $f(A) = c \cdot \mathbb{1}$.
(d) Ist A invertierbar und $f : \sigma(A) \to \mathbb{C}$, $\lambda \to \frac{1}{\lambda}$, so gilt $f(A) = A^{-1}$.
(e) Es gilt der ***spektrale Abbildungssatz***: $\sigma(f(A)) = f(\sigma(A))$
(f) Auch $f(A)$ ist normal und für $g : \sigma(f(A)) \to \mathbb{C}$ gilt $(g \circ f)(A) = g(f(A))$.
(g) Es gelten die Äquivalenzen:

$$\begin{aligned} f(A) \text{ ist selbstadjungiert} &\iff f \text{ ist reellwertig} \\ f(A) \text{ ist positiv (definit)} &\iff f \text{ ist (strikt) positiv} \\ f(A) \text{ ist orthogonale Projektion} &\iff f \text{ ist } \{0,1\}\text{-wertig} \\ f(A) \text{ ist unitär} &\iff f \text{ nimmt nur Werte vom Betrag 1 an} \end{aligned}$$

(h) Ist A selbstadjungiert, so ist e^{iA} unitär.

Bemerkung: Der Funktionalkalkül für Matrizen lässt sich auch auf unendliche Systeme anwenden, wobei man sich allerdings zunächst auf stetige Funktionen auf dem Spektrum beschränken muss. Dies liefert den ***stetigen Funktionalkalkül***, welchen man zweckmäßig im Rahmen von ***C^*-Algebren*** behandelt. Dieser widerum lässt sich zu einem ***messbaren Funktionalkalkül*** fortsetzen, welcher zu ***von Neumann Algebren*** korrespondiert. Letzteres ist wichtig, da man zur Berechnung von Spektralprojektionen charakteristische Funktion von Operatoren bestimmen muss.

Aufgabe G3 (Positive Matrizen)

(a) Es sei $A \in M_{n,n}(\mathbb{C})$ eine positive Matrix. Zeigen Sie, dass genau eine positive Matrix $B \in M_{n,n}(\mathbb{C})$ existiert, sodass $B^2 = A$ gilt.
(b) Zeigen Sie, dass für positive Matrizen $A, B \in M_{n,n}(\mathbb{C})$ nicht notwendig auch AB positiv sein muss, aber dass stets $\mathrm{tr}(AB) \geq 0$ gilt.

    Hinweis: Benutzen Sie, dass eine Matrix A genau dann positiv ist, wenn es ein Matrix B gibt, sodass $A = B^*B$ gilt. Verwenden Sie nun (a).

Aufgabe G4 (von Neumann Entropie)

(a) Machen Sie sich kurz klar, dass die Funktion $(0, \infty) \ni x \mapsto x \cdot \log(x) \in \mathbb{R}$ zu einer stetigen Funktion h auf $[0, \infty)$ fortgesetzt werden kann. Was ist $h(0)$? Beschreiben Sie den Funktionsverlauf von h qualitativ.
(b) Es sei $\rho \in M_{n,n}(\mathbb{C})$ eine Dichtematrix, d.h. $\rho \geq 0$ und $\mathrm{tr}(\rho) = 1$. Dann definieren wir mit Hilfe des in Aufgabe G2 entwickelten Funktionalkalküls deren ***von Neumann Entropie*** durch

$$S(\rho) := -\mathrm{tr}(h(\rho))$$

    Zeigen Sie:

$$\rho \text{ ist rein} \iff S(\rho) = 0$$

(c) Bestimmen Sie das Maximum der von Neumann Entropie über die Menge aller Dichtematrizen. Wo wird dieses angenommen?

Bemerkung: Die von Neumann Entropie spielt eine wichtige Rolle in der Quanteninformationstheorie und der statistischen Physik. Sie dient als mikroskopische Grundlage der Entropie thermodynamischer Systeme.

Hausübung

Aufgabe H1 (Dichtematrizen)
Es sei $\rho \in M_{n,n}(\mathbb{C})$ eine Dichtematrix, d.h. $\rho \geq 0$ und $\mathrm{tr}(\rho) = 1$. Zeigen Sie:

(a) Die Menge der Dichtematrizen $\mathcal{S}(M_{n,n}(\mathbb{C}))$ ist konvex.

(b) Es sind äquivalent:

   i. ρ ist Extremalpunkt von $\mathcal{S}(M_{n,n}(\mathbb{C}))$ (d.h. ρ ist rein).

   ii. ρ ist eindimensionale orthogonale Projektion.

   iii. Es gilt $\mathrm{tr}\left(\rho^2\right) = 1$.

Aufgabe H2 (Die Blochkugel für beliebige Zustände)
Wir werden in dieser Aufgabe das Konzept der Blochkugel aus Aufgabe G1 von Blatt 3 auf beliebige Dichtematrizen übertragen.

(a) Sei $\rho \in M_{2,2}(\mathbb{C})$ selbstadjungiert. Begründen Sie, dass es eindeutig bestimmte Zahlen $\alpha_1, \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z \in \mathbb{R}$ gibt, sodass

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \alpha_1 + \alpha_z & \alpha_x - i\alpha_y \\ \alpha_x + i\alpha_y & \alpha_1 - \alpha_z \end{pmatrix}$$

gilt.

(b) Welche Einschränkungen ergeben sich durch die Bedingungen $\mathrm{tr}(\rho) = 1$ und $\rho \geq 0$?

(c) Folgern Sie, dass es zu jeder Dichtematrix ρ auf $\mathbb{C}^2$ einen eindeutig bestimmten Vektor $(x, y, z)^T \in \mathbb{R}^3$ mit $x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$ gibt, sodass

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z)$$

gilt. Wann ist ρ rein? Welcher Dichtematrix entspricht der Punkt $(0, 0, 0)^T$?

(d) Nun liege zum Zeitpunkt $t = 0$ eine Dichtematrix $\rho(0) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ vor. Deren Zeitentwicklung sei gegeben durch $\rho(t) = e^{it\sigma_z}\rho(0)e^{-it\sigma_z}$ für $t \in \mathbb{R}$. Ermitteln Sie die Bahn der zugehören Blochvektoren. Ist der Zustand für alle Zeiten rein?

Bemerkung: Eine solche Zeitentwicklung ergibt sich beispielsweise bei der Beschreibung eines Spin-1/2-Teilchens in einem zeitunabhängigen Magnetfeld in z-Richtung.