Übung 1. Dichtematrix und Wahrscheinlichkeiten

Lernziel: Wir lernen den Umgang mit Dichtematrizen durch ein paar Beispiele besser kennen. Insbesondere wird verständlich, dass sie als Verallgemeinerung klassischer Wahrscheinlichkeiten gesehen werden kann; ihre definierenden Eigenschaften entsprechen bekannten Eigenschaften der klassischen Wahrscheinlichkeitstheorie.

(a) Finde die Dichtematrix folgender Zwei-Niveau Systeme in der Basis $|0\rangle = \binom{1}{0}$, $|1\rangle = \binom{0}{1}$. Welche Preparationsvorgänge ergeben die gleiche Dichtematrix?

- (i) Ein System präpariert im Zustand $|1\rangle$;
- (ii) Ein System präpariert im Superposition Zustand $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i\,|1\rangle)$;
- (iii) Ein System, zufällig präpariert im Zustand $|0\rangle$ oder $|1\rangle$ mit Wahrscheinlichkeit 1/2;
- (iv) Ein System, zufällig präpariert im Zustand $|+\rangle$ oder $|-\rangle$ mit Wahrscheinlichkeit 1/2, wobei $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle)$;
- (v) Ein System im Zustand $|\phi\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}|0\rangle + \frac{1}{2}|1\rangle$;
- (vi) Das System in (v) nach einer Messung in der Basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, die das Resultat $|0\rangle$ ergeben hat;
- (vii) Das System in (v), nachdem jemand anders einer Messung in der Basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ durchgeführt hat, aber dir das Messresultat nicht mitgeteilt hat;
- (viii) Das System in (v), nachdem jemand anders einer Messung in der Basis $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ durchgeführt hat, aber dir das Messresultat nicht mitgeteilt hat.

Diskutiere in welchen obigen Fällen, die Dichtematrix in der Basis $\{|\pm\rangle\}$ diagonal wird.

(b) Man prepariere ein System in Zuständen $|\psi_k\rangle$ mit Wahrscheinlichkeiten p_k. Betrachte auch eine Observable A mit Spektralzerlegung $A = \sum_i a_i P_i$ (mit P_i Projektoren zu den Eingenräumen mit Eigenwert a_i). Zeige folgende Eigenschaften der Dichtematrix $\rho = \sum p_k\,|\psi_k\rangle\langle\psi_k|$:

- (i) $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$;
- (ii) $\rho \geqslant 0$, d.h. ρ ist positiv semidefinit;
- (iii) die Wahrscheinlichkeit eines Messresultats a_i nach Messung von A ist $\Pr[a_i] = \mathrm{Tr}\,(\rho\,P_i)$;
- (iv) nach Messung der Observable A mit dem Ergebnis a_i wird der verbliebenen Zustand beschrieben durch eine kollabierte Dichtematrix

$$\rho_i = \frac{P_i\,\rho\,P_i}{\mathrm{Tr}\,(\rho\,P_i)}. \tag{1}$$

Eine klassische Wahrscheinlichkeitsverteilung kann als Spezialfall einer Dichtematrix ρ aufgefasst werden, wobei die Basis $\{|\psi_k\rangle\}$ als *Eigenbasis* von ρ festgelegt wird. Bemerke: Die Basis ist nicht mehr frei wählbar. Auf ein klassisches System können ausserdem nur Messungen A durchgeführt werden, welche dieser Basis eine diagonale Darstellung besitzen.

(c) Bestimme welchen fundamentalen Eigenschaften aus der klassischen Wahrscheinlichkeitstheorie die jeweilige Eigenschaften in (b) entsprechen.

Hinweis: Was ist eine "Messung" in die klassische Wahrscheinlichkeitstheorie?

Übung 2. Freies Teilchen im Heisenberg-Bild

Lernziel: Im Heisenberg-Bild sind Operatoren statt Wellenfunktionen zeitabhängig. Wir betrachten als illustratives Beispiel das freie Teilchen im Heisenberg-Bild.

Sei $X_H(t)$ das Ortsoperator an der Zeit t im Heisenberg-Bild. Zeige, dass für ein freies Teilchen der Masse m gilt

$$\Delta X_H(0) \cdot \Delta X_H(t) \geq \frac{\hbar t}{2m}. \tag{2}$$

Übung 3. Das Helium Atom

Lernziel: Hier wenden wir die Variationsmethode auf den Beispiel des Helium-Atoms an, um den Grundzustandsenergie zu approximieren.

Betrachte ein Helium-Atom, dessen Hamilton-Operator gegeben ist durch

$$H = H_{\text{kin}} + H_{\text{pot}} + H_{\text{WW}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Delta_{\boldsymbol{r}_1} + \Delta_{\boldsymbol{r}_2}\right) - 2e^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|}\,. \tag{3}$$

Wir möchten den Grundzustandsenergie dieses Systems mit der Variationsmethode schätzen (dabei ist die effektive Kernladung α der Variationsparameter). Dafür setzen wir die Form der Zweiteilchen-Wellenfunktion aus Lösungen Ψ_0 des Grudzustands vom Wasserstoffatom an [mit $a_B = \hbar^2/(me^2)$]

$$\Psi\left(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2\right) = \alpha^3\, \Psi_0\left(\alpha \boldsymbol{r}_1\right) \Psi_0\left(\alpha \boldsymbol{r}_2\right), \qquad \Psi_0\left(\boldsymbol{r}\right) = \left(\pi a_B^3\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right), \tag{4}$$

(a) Verifiziere, dass dieser Zustand für alle α normiert ist, d.h. $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$.

(b) Zeige, dass für die jeweiligen Energiebeiträge ($E_i = \langle \Psi | H_{\text{i}} | \Psi \rangle$) gilt

$$E^{\text{kin}} = e^2\alpha^2/a_B \qquad E^{\text{pot}} = -4e^2\alpha/a_B \qquad E^{\text{WW}} = 5\alpha\, e^2/(8a_B) \tag{5}$$

Erkläre für jeden Term die jeweilige Abängigkeit in α.

Hinweise: Benutze die bekannten Werten $E_0^{\text{kin}} = e^2/(2a_B)$ und $E_0^{\text{pot}} = -e^2/a_B$ für das Wasserstoffatom und beachte, dass das Helium-Atom zwei Protonen besitzt. Zur Berechnung von E^{WW}, benutze man die Fourierdarstellung

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}|} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{k^2} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad \textit{sowie} \qquad \int_0^\infty \frac{dk}{(1+k^2)^4} = \frac{5\pi}{32}.$$

(c) Minimiere zum Schluss die totale mittlere Energie $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ des Zustands als Funktion von α, um die Grundzustandsenergie zu schätzen. Vergleiche mit dem experimentellen Wert $E_0 \approx -2.904\; e^2/a_B$.