Theoretische Physik III
- Quantenmechanik (SoSe 2017) -

Übungsblatt 05 ($20 + \pi + e$ Punkte)[1]

Ausgabe 15.05.17 – Abgabe 24.05.17 – Besprechung n.V.

Aufgaben mit Sternchen sind Klausurisomorph

▷ **Aufgabe 1 (Bahndrehimpuls)** (10 Punkte)

[diese Aufgabe ist nicht klausurisomorph, aber klausurrelevant . . .]

Der Drehimpuls der Bahnbewegung ist eine wichtige Größe – denken Sie nur an die Vereinfachungen, die sich bei der Lösung des klassischen Keplerproblems aufgrund der Drehimpulserhaltung ergeben haben. Zeit also, sich den Drehimpuls näher anzusehen . . .

Im Korrespondenzprinzip wird der kanonische Drehimpuls $\vec{\ell}(\vec{p}, \vec{q}) = \vec{q} \times \vec{p}$ zum Drehimpulsoperator befördert,

$$\hat{\vec{\ell}} := \hat{\vec{q}} \times \hat{\vec{p}} . \tag{1}$$

(a) Für die kartesischen Komponenten (pedantisch: Koordinaten) $\hat{\ell}_i$, $i = x, y, z$ bestätige man durch einfaches Nachrechenen die wichtigen Vertauschungsrelationen,

$$\left[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y\right] = i\hbar\hat{\ell}_z , \qquad (xyz \text{ zyklisch}) , \tag{2}$$

Bemerkung: Beim Nachrechnen hilfreich ist die Ortsdarstellung $\hat{\vec{\ell}} = \frac{\hbar}{i}\vec{x} \times \nabla$, in Komponenten (bitte bestätigen!)

$$\hat{\ell}_x = \hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) , \tag{3}$$

$$\hat{\ell}_y = \hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) , \tag{4}$$

$$\hat{\ell}_z = \hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) , \tag{5}$$

aber die abstrakten Heisenbergkommutatoren $[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ tuns natürlich auch.

(b) Zeigen Sie, dass die "Quadratlänge" des Drehimpulsvektors, $\hat{\vec{\ell}}^2 = \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2$ selbstadjungiert, und mit jeder beliebigen kartesischen Komponenten $\hat{\ell}_i$ kommutiert,

$$\left[\hat{\vec{\ell}}^2, \hat{\ell}_i\right] = 0 . \tag{6}$$

Bemerkung: Die Quadratlänge $\hat{\vec{\ell}}^2$ ist ein sog. Casimiroperator der Drehgruppe.

(c) Der Drehimpuls kommt insbesondere bei zentralsymmetrischen Problemen zum Einsatz, und da empfehlen sich bekanntlich Kugelkoordinaten,

$$x = r\cos\varphi\sin\vartheta , \qquad y = r\sin\varphi\sin\vartheta , \qquad z = r\cos\vartheta . \tag{7}$$

[1]Aufgaben mit transzendenter Punktezahl sind fakultative Nüsse. Nüsse sind bekanntlich nahrhaft . . .

Zeigen Sie, dass in Kugelkoordinaten

$$\hat{\ell}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{8}$$

$$\hat{\ell}_y = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{9}$$

$$\hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{10}$$

Für die Quadratlänge findet man nach ein wenig Fummelei

$$\hat{\vec{\ell}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right], \tag{11}$$

kurz $\hat{\vec{\ell}}^2 = -\hbar^2\Delta_{S^2}$, mit Δ_{S^2} der Laplace-Operator auf der Oberfläche der Einheitskugel.

(d) Zeigen Sie, dass auch die drei sog. Spin-Matrizen

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{12}$$

der Drehimpulsalgebra (2) genügen. Was haben die mit der Darstellung des Bahndrehimpulses auf dem Vektorraum(!) der Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}$ zur Quantenzahl $\ell = 1$ zu tun?

▷ **Aufgabe 2 (Erhaltungsgrößen im Zweikörperproblem)** (10 Punkte)

[auch diese Aufgabe ist nicht klausurisomorph, aber klausurrelevant ...]

Gegeben zwei Punktteilchen im physikalischen Raum, dem $\mathbb{R}^3$, deren kanonisch konjugierten Koordinaten(-Vektoren) und Impulse mit $\hat{\vec{q}}^{(i)}$, $\hat{\vec{p}}^{(i)}$, $i = 1, 2$ bezeichnet seien. Die fundamentalen Kommutatoren lauten

$$\left[\hat{q}_i^{(\alpha)}, \hat{p}_j^{(\beta)}\right] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij} \tag{13}$$

alle anderen Kommutatoren Null.

(a) In der Orstdarstellung für jedes der beiden Teilchen ist die quantenmechanische Wellenfunktion des zwei-Teilchen Systems zu jedem Zeitpunkt t eine komplexwertige Funktion von 6 Variablen, $\Psi(x^{(1)}, y^{(1)}, \ldots, z^{(2)})$. Welche physikalische Bedeutung hat diese Wellenfunktion im Bezug auf eine Ortsmessung der beiden Teilchen?

Beschränkt man sich auf konservative Wechselwirkung (kein Vektorpotential), und nimmt an, daß keine externen Kräfte wirken, lautet der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^{(1)2}}{2m^{(1)}} + \frac{\hat{\vec{p}}^{(2)2}}{2m^{(2)}} + V\big(|\hat{\vec{q}}^{(1)} - \hat{\vec{q}}^{(2)}|\big). \tag{14}$$

Die Funktion V bezeichnet hier das *Wechselwirkungspotential* der beiden Teilchen. Die ausschließliche Abhängigkeit des WW-Potentials vom Abstand der beiden Teilchen respektieren die Homogenität und Isotropie des Raumes und die Homogenität der Zeit.

(b) Homogenität des Raumes besagt, daß kein Raumpunkt ausgezeichnet ist. Mathematisch ist die Wechselwirkung invariant unter einer Verschiebung des Koordinatenursprungs, sie hängt nur von den Relativkoordinaten $\hat{\vec{q}}$ ab,

$$\hat{\vec{q}} := \hat{\vec{q}}^{(1)} - \hat{\vec{q}}^{(2)} \tag{15}$$

nicht aber von den Schwerpunktskoordinaten,

$$\hat{\vec{Q}} := \frac{m^{(1)}\hat{\vec{q}}^{(1)} + m^{(2)}\hat{\vec{q}}^{(2)}}{m^{(1)} + m^{(2)}} \tag{16}$$

Welche Erhaltungsgrößen sind mit dieser Invarianz verknüpft?

Hinweis: Denken Sie an alle Erhaltungsgrößen eines freien Teilchens. Bezeichnen Sie, falls er Ihnen über den Weg läuft,

$$\hat{\vec{P}} := \hat{\vec{p}}^{(1)} + \hat{\vec{p}}^{(2)} \tag{17}$$

den Gesamtimpuls (= Schwerpunktimpuls) des Zwei-Teilchensystems, und

$$\hat{\vec{\ell}}_{\mathrm{S}} := \hat{\vec{Q}} \times \hat{\vec{P}} \tag{18}$$

den Drehimpuls der Schwerpunktbewegung (*nicht* Gesamtdrehimpuls!).

(c) Zeigen Sie, dass

$$\hat{\vec{p}} = \frac{m^{(2)}\hat{\vec{p}}^{(1)} - m^{(1)}\hat{\vec{p}}^{(2)}}{m^{(1)} + m^{(2)}} \tag{19}$$

den zu $\hat{\vec{q}}$ kanonisch konjugierten Impuls der Relativbewegung bezeichnet. Ist die Transformation $\left\{\hat{\vec{q}}^{(1)}, \hat{\vec{p}}^{(1)}, \hat{\vec{q}}^{(2)}, \hat{\vec{p}}^{(2)}\right\} \to \left\{\hat{\vec{Q}}, \hat{\vec{P}}, \hat{\vec{q}}, \hat{\vec{p}}\right\}$ kanonisch?

(d) Zeigen Sie, dass der Gesamtdrehimpuls $\hat{\vec{L}} \equiv \hat{\vec{\ell}}^{(1)} + \hat{\vec{\ell}}^{(2)}$ sich in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten ausdrückt

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{Q}} \times \hat{\vec{P}} + \hat{\vec{q}} \times \hat{\vec{p}} \tag{20}$$

(e) Zeigen Sie, dass sich in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten der Hamiltonoperator ausdrückt (1 Punkt)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\vec{q}}|)\,. \tag{21}$$

(f) Isotropie des Raumes besagt, daß keine Richtung im Raum ausgezeichnet ist. Mathematisch ist das WW-Potential daher invariant unter Drehungen des Radiusvektors $\hat{\vec{q}}$. Welche Erhaltungsgröße ist mit dieser Invarianz verknpft?

(g) Homogenität der Zeit besagt, daß kein Zeitpunkt ausgezeichnet ist. Mathematisch hängt das WW-Potential daher nicht explizit von der Zeit ab. Welche Erhaltungsgröße der Relativbewegung ist mit dieser Invarianz verknüpft?

(h) Zeigen Sie: Die allgemeine Lösung der zwei-Teilchen Schrödingergleichung lässt sich als lineare Superposition von Produktvektoren der Gestalt $|\Phi(t)\rangle \otimes |\psi(t)\rangle$ darstellen, wobei die Faktoren $|\Phi(t)\rangle$ bzw. $|\psi(t)\rangle$ Vektoren im Hilbertraum der Schwerpunkts- bzw. Relativbewegung sind. Insbesondere gilt aufgrund der Separierbarkeit des Hamiltonoperators, vgl. (21),

$$i\hbar|\dot{\Phi(t)}\rangle = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M}|\Phi(t)\rangle\,, \tag{22}$$

$$i\hbar|\dot{\psi(t)}\rangle = \left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\vec{q}}|)\right]|\psi(t)\rangle\,. \tag{23}$$

▷ **Aufgabe 3 (Qubit)** (e Punkte)

Das "Bit" ist bekanntlich das Elementarteilchen der Informatik: Sein Konfigurationsraum umfasst nur die beiden Zustände "gesetzt" (symbolisch $\mathtt{1}$) und "ungesetzt" (symbolisch $\mathtt{0}$). Wird das Bit quantisiert, erhält man das Elementarteilchen der Quanteninformatik, genannt "Qubit".

Der Hilbertraum des Qubit ist zweidimensional – das Qubit ist gewissermaßen das kleinste nicht-triviale quantemechanische System. Physikalisch realisieren lassen sich Qubits durch den Spin eines Elektrons, den Polarisationsfreiheitsgrad eines Photons, oder zwei Energieniveaus eins Atoms.

Die klassischen Zustände $\mathtt{1}$ und $\mathtt{0}$ werden im Qubit-Hilbertraum $\mathcal{H}_{\text{qubit}}$ durch die beiden orthonormalen Basisvektoren $|\mathtt{1}\rangle$ und $|\mathtt{0}\rangle$ dargestellt, genannt die "Computer-Basis". Gemäß Superpositionsprinzip ist aber auch die Superposition

$$|\psi\rangle = \psi_0|\mathtt{0}\rangle + \psi_1|\mathtt{1}\rangle\,, \tag{24}$$

ein möglicher Zustand des Qubit. Die Koeffizienten $\psi_i \in \mathbb{C}$ bilden die Darstellung in der Computer-Basis,

$$\psi_i = \langle i|\psi\rangle\,, \tag{25}$$

und werden folgendermaßen interpretiert:

$$|\psi_i|^2 = \text{W'keit, das Qubit gesetzt } (i = \mathtt{1}) \text{ bzw ungesetzt } (i = \mathtt{0}) \text{ zu finden} \tag{26}$$

Um sich das Leben (und Schreiben) etwas zu erleichtern, werden Qubits gerne in einer Matrixdarstellung beschrieben. Die Darstellung ist definiert durch eine Abbildung $\mathcal{H}_{\text{qubit}} \to \mathbb{C}^2$

$$|\mathtt{0}\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\,, \qquad |\mathtt{1}\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\,. \tag{27}$$

Die Manipulation eines Bits wird in der Informatik durch Gatter erreicht. Ein Gatter, das als Input ein Bit nimmt, und als Output wiederum ein Bit liefert, heißt unäres Gatter. Mathematisch formuliert ist ein unäres Gatter eine Abbildung

$$g : \{\mathtt{0}, \mathtt{1}\} \;\to\; \{\mathtt{0}, \mathtt{1}\} \tag{28}$$

(a) Zeigen Sie: es gibt genau 4 unäre Gatter.

(b) Zeigen Sie: Die einzigen reversiblen Gatter sind die Identität (hier bezeichnet IDT) und das logische NOT. Ein reversibles Gatter ist ein Gatter, bei dem Sie bei Kenntnis des Output auf den Input schließen können.

(c) Beweisen Sie den *Fundamentalsatz der Informatik*: Es gibt kein unäres Gatter $\sqrt{\mathrm{NOT}}$, das in Hintereinanderschaltung das NOT realisiert.

In der Quanteninformatik werden reversible unäre Gatter durch unitäre Operatoren dargestellt, und das Hintereinanderschalten von logischen Gattern entspricht der Multiplikation der zugeordneten Operatoren. In der Matrixdarstellung sind Gatter einfach unitäre 2×2-Matrizen. Hintereinanderschaltung ist also einfach Matrixmultiplikation.

(d) Zeigen Sie: Die Matrix

$$\hat{U}_{\mathrm{NOT}} := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{29}$$

ist unitär und realisiert das logische NOT für Qubits.

(e) Zeigen Sie: der Fundamentalsatz der Informatik wird mit Qubits außer Kraft gesetzt. Es gibt sehr wohl ein unäres Gatter $\hat{U}_{\sqrt{\mathrm{NOT}}}$, das in Hintereinanderschaltung das logische NOT realisiert, $\hat{U}_{\mathrm{NOT}} = \hat{U}_{\sqrt{\mathrm{NOT}}}\hat{U}_{\sqrt{\mathrm{NOT}}}$. Welche Matrix ist diesem Gatter zugeordnet?

Genießen Sie hier ruhig Ihren Erkenntnisvorsprung vor den Kollegen aus der Informatik. Und verbeugen sich in Demut vor der Einsicht: nicht alles, von dem man felsenfest überzeugt ist (weil man's so in der Uni gelernt hat) ist unter allen Umständen richtig. Werden Sie jetzt aber bloß nicht übermutig …

▷ Aufgabe 4 (Quantenhexerei) (π Punkte)

Im Nachklang zur Walpurgisnacht erreicht Sie eine SMS:

Take a friend, go to the bar, get a drink and play a game:

Place a coin head up in a box. Seal the box so that nobody can look inside. You will now take three turns, first you, then your friend, then you again. At each turn you (or your friend) can manipulate the coin: turn it around, or not turn it around. Of course neither you nor your friend can see the actual state of the coin (heads or tails up). Also, you can't see what action your friend takes (turn or not turn), nor can your friend see what action you take. Once you are done, you may open the box. You win if the coin is still head up in the end. Otherwise your friend wins.

(a) Convince your friend that there is no winning strategy for neither you nor your friend.

(b) Recall quantum mechanics (but don't tell your friend) and win the game – always!

Reference: D. Meyer, Phys. Rev. Lett. **82**, 1052.