

LÖSUNGSVORSCHLAG ZUM ÜBUNGSBLATT NR.5

Aufgabe 13

Klassischer Computer	Quantencomputer
Bits (0 oder 1)	Quantenbits (Qubits)
Wort 0 0 1 0 1	Wort ↑ ↑ ↓ ↑ ↓

Die Informationsspeicherung in einem klassischen Computer erfolgt über Bits, welche die Werte 0 oder 1 annehmen können. Ein Bit wird realisiert über einen elektronischen Schaltkreis mittels Transistoren (metastabile Kippstufe, Flip-Flop). Mehrere dieser Bits können zu sogenannten Wortn zusammengefasst werden.

Beim Quantencomputer spielen die Quantenbits (auch Qubits) die Rolle der Bits und dienen der Speicherung von Information. Ein Qubit ist im Wesentlichen ein Spin-1/2-Zustand. Der große Unterschied zum klassischen Bit ist, dass ein Qubit nicht nur zwei Werte annehmen kann, sondern dass es sich dabei um die Überlagerung (Superposition) zweier Spin-1/2-Zustände

$$|0\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

handelt, also

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad (2)$$

wobei die letzte Bedingung $|\psi\rangle$ normiert. Mehrere dieser Qubits fasst man in Wortn zusammen. Im Falle von N Qubits verwendet man folgende Basis

$$|0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \equiv |0, 0, 0, 0, \dots\rangle, \quad (3a)$$

$$|1\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \equiv |1, 0, 0, 0, \dots\rangle, \quad (3b)$$

$$|2\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \equiv |0, 1, 0, 0, \dots\rangle, \quad (3c)$$

⋮

$$|n\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes \dots \equiv |1, 1, 1, 1, \dots\rangle. \quad (3d)$$

In einem Wort lassen sich die genannten Basiszustände überlagern:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{2^N-1} C_n |n\rangle. \quad (4)$$

Ein Programm auf diesem Quantencomputer ist nichts anderes als die Manipulation von Qubits, welche durch einen Kontroll-Hamiltonoperator beschrieben wird. Ein Beispiel für einen solchen Hamiltonoperator ist

$$H(t) = - \sum_{i=1}^N [B_x^i(t) S_x^i + B_z^i(t) S_z^i] + \sum_{i<j} J^{ij}(t) S_+^i S_-^j, \quad (5)$$

mit

$$S_{\pm} = S_x \pm i S_y, \quad (S_x, S_y, S_z) = \frac{\hbar}{2} (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z). \quad (6)$$

Man kann Qubits also beispielsweise durch ein äußeres Magnetfeld $\mathbf{B}(t)$ oder durch Selbstwechselwirkung beschrieben über einen Austauschterm mit J^{ij} (beispielsweise Ferro- oder Antiferromagnet) beeinflussen.

Bei dem System in der Aufgabe handelt es sich um ein Wort bestehend aus vier Qubits mit der Basis

$$\{|0, 0\rangle, |1, 0\rangle, |0, 1\rangle, |1, 1\rangle\} \equiv \{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}. \quad (7)$$

Der Hamiltonoperator ist ein Kontrollhamiltonoperator der letztgenannten Art, wobei $J^{ii} = 0$ ist; die zeitliche Entwicklung der Qubits (welche man in Aufgabenteil (b) berechnet) erfolgt durch ihre Selbstwechselwirkung; der Zustand des Wortes ändert sich also im Laufe der Zeit. In Aufgabenteil (c) wird der Wortzustand

$$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = a|0\rangle + b|1\rangle + c|2\rangle + d|3\rangle, \quad (8)$$

betrachtet. Der Zeitentwicklungsoperator führt (modulo Faktoren i) auf einen neuen Vektor

$$|\varphi'\rangle = \begin{pmatrix} a \\ ic \\ ib \\ d \end{pmatrix} = a|0\rangle + ic|1\rangle + ib|2\rangle + d|3\rangle, \quad (9)$$

was nichts anderes als einem Vertauschen beider Spins, der sogenannten SWAP-Operation entspricht. Man kann nachrechnen, dass für den Zeitentwicklungsoperator auf Aufgabenteil (b) folgendes gilt (Additionstheoreme!):

$$U_\gamma \cdot U_\delta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\gamma + \delta) & i \sin(\gamma + \delta) & 0 \\ 0 & i \sin(\gamma + \delta) & \cos(\gamma + \delta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

wobei γ und δ zwei Winkel $\in [0, 2\pi]$ sind. Beispielsweise gilt also

$$U_{\pi/4} \cdot U_{\pi/4} = U_{\pi/2}, \quad (11)$$

und bezeichnen wir

$$U_{\pi/2} \equiv U_{\text{SWAP}}, \quad (12)$$

so gilt also

$$U_{\pi/4} \equiv U_{\sqrt{\text{SWAP}}}. \quad (13)$$

Man kann also eine $\sqrt{\text{SWAP}}$ -Operation definieren. Analog gibt es $\sqrt{\text{NOT}}$, usw., Operationen, welche bei einem klassischen Computer nicht realisiert sind.

Aufgabe 14

Als erstes überprüfen wir, ob der angegebene Zustand auf eins normiert ist:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \left| \exp\left(i\frac{\alpha}{2}\right) \right|^2 \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) \langle + | + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-i\frac{\phi}{2}\right) \langle - | \right] \times \\ &\quad \times \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-i\frac{\phi}{2}\right) | + \rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) | - \rangle \right] = \\ &= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \langle + | + \rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \{ \exp(-i\phi) \langle - | + \rangle + \exp(i\phi) \langle + | - \rangle \} + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \langle - | - \rangle = \\ &= \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = 1. \end{aligned} \quad (14)$$

Passt! Wir berechnen nun die Erwartungswerte des Spins in x -, y - und z -Richtung:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_+ \rangle &= \langle \Psi | \sigma_+ | \Psi \rangle = \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) \langle + | + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-i\frac{\phi}{2}\right) \langle - | \right] \times \\ &\quad \times \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) | + \rangle = \\ &= \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp(i\phi) = \frac{1}{2} \sin(\theta) \exp(i\phi), \end{aligned} \quad (15a)$$

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_- \rangle &= \langle \Psi | \sigma_- | \Psi \rangle = \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) \langle + | + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-i\frac{\phi}{2}\right) \langle - | \right] \times \\
&\quad \times \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-i\frac{\phi}{2}\right) | - \rangle = \\
&= \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp(-i\phi) = \frac{1}{2} \sin(\theta) \exp(-i\phi),
\end{aligned} \tag{15b}$$

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_z \rangle &= \langle \Psi | \sigma_z | \Psi \rangle = \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) \langle + | + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-i\frac{\phi}{2}\right) \langle - | \right] \times \\
&\quad \times \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-i\frac{\phi}{2}\right) | + \rangle - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) | - \rangle \right] = \\
&= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \cos\theta.
\end{aligned} \tag{15c}$$

Verwenden wir schließlich

$$\sigma^\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y), \tag{16}$$

bzw.

$$\sigma_x = \sigma_+ + \sigma_-, \quad \sigma_y = -i(\sigma_+ - \sigma_-), \tag{17}$$

so folgt:

$$\langle \sigma_x \rangle = \sin(\theta) \left\{ \frac{1}{2}(\exp(i\phi) + \exp(-i\phi)) \right\} = \sin(\theta) \cos(\phi), \tag{18a}$$

$$\langle \sigma_y \rangle = \sin(\theta) \left\{ \frac{1}{2i}(\exp(i\phi) - \exp(-i\phi)) \right\} = \sin(\theta) \sin(\phi), \tag{18b}$$

und

$$\langle \sigma_z \rangle = \cos(\theta). \tag{18c}$$

Weiterhin gilt wegen $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1}_2$:

$$\langle \sigma_x^2 \rangle = \langle \Psi | \sigma_x^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1, \quad \langle \sigma_y^2 \rangle = 1, \quad \langle \sigma_z^2 \rangle = 1. \tag{19}$$

Damit können wir wiederum die Schwankungsquadrate ausrechnen:

$$(\Delta\sigma_x)^2 = \langle \sigma_x^2 \rangle - \langle \sigma_x \rangle^2 = 1 - \sin^2(\theta) \cos^2(\phi), \tag{20a}$$

$$(\Delta\sigma_y)^2 = \langle \sigma_y^2 \rangle - \langle \sigma_y \rangle^2 = 1 - \sin^2(\theta) \sin^2(\phi), \tag{20b}$$

$$(\Delta\sigma_z)^2 = \langle \sigma_z^2 \rangle - \langle \sigma_z \rangle^2 = 1 - \cos^2(\theta). \tag{20c}$$

Damit gilt also

$$(\Delta\sigma_x) \cdot (\Delta\sigma_y) = \sqrt{1 - \sin^2(\theta) + \sin^4(\theta) \sin^2(\phi) \cos^2(\phi)} = \sqrt{\cos^2(\theta) + \sin^4(\theta) \sin^2(\phi) \cos^2(\phi)}. \tag{21}$$

Für die rechte Seite benötigt man die Kommutatorrelation $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$ und damit ergibt sich

$$\frac{1}{2} |\langle [\sigma_x, \sigma_y] \rangle| = \frac{1}{2} \cdot 2 |\langle \Psi | \sigma_z | \Psi \rangle| = |\langle \Psi | \sigma_z | \Psi \rangle| = |\cos(\theta)|, \tag{22}$$

und somit gilt schließlich:

$$(\Delta\sigma_x) \cdot (\Delta\sigma_y) = \sqrt{\cos^2(\theta) + \sin^4(\theta) \sin^2(\phi) \cos^2(\phi)} \geq |\cos(\theta)| = \frac{1}{2} |\langle [\sigma_x, \sigma_y] \rangle|. \tag{23}$$

Dass der Zustand $|\Psi\rangle$ tatsächlich auf einer Kugel (der Blochkugel) „liegt“, sieht man nicht direkt am Zustand selbst. Ein Spinzustand wie $|\Psi\rangle$ existiert nämlich im zweidimensionalen Spinraum, der erst einmal nichts mit unserem dreidimensionalen Anschauungsraum zu tun hat. Man sieht dies erst an den Erwartungswerten des Spins (bzw. der Paulimatrizen) in x -, y - und z -Richtung, also (15). Daraus erkennt man unschwer, dass es sich um die Parametrisierung einer Kugel handelt. θ entspricht also dem Polarwinkel und ϕ dem Azimuthalwinkel, wenn man Kugelkoordinaten im dreidimensionalen Anschauungsraum verwendet. Man erkennt noch etwas anderes: Im Spinzustand $|\Psi\rangle$ kommen die Winkel θ und ϕ dividiert durch einen Faktor 2 vor. Man kommt also erst wieder dann zum anfänglichen Zustand zurück, wenn man θ bzw. ϕ um 4π verschiebt, während im dreidimensionalen Raum eine Verschiebung um 2π ausreicht. Dies liegt daran, dass die Spingruppe $SU(2)$ (die Drehungen im zweidimensionalen Spinraum beschreibt) nur **lokal isomorph** ist zur Drehgruppe $SO(3)$ (durch die Drehungen im dreidimensionalen Raum parametrisiert werden). Anders ausgedrückt: $SU(2)$ besitzt einen diskreten invarianten Unterraum $\mathbb{Z}_2 = \{-\mathbb{1}, \mathbb{1}\}$ mit zwei Elementen, während $SO(3)$ nur $\mathbb{1}$ als invarianten Unterraum besitzt. Einfach ausgedrückt: Drehungen im Spinraum sind eben was anderes als Drehungen im dreidimensionalen Raum :-)

Aufgabe 15

Zeitabhängige Störungstheorie führt man am Geschicktesten im Wechselwirkungsbild durch. Wir betrachten ein quantenmechanisches System mit dem Hamiltonoperator

$$H = H_0 + V(t), \quad (24)$$

wobei H_0 der Hamiltonoperator des ungestörten Systems und $V(t)$ der zeitabhängige Störoperator ist. Zur Wiederholung:

- 1.) Es gibt das Schrödingerbild, in dem die zeitliche Entwicklung des quantenmechanischen Systems allein in den Zuständen steckt. Die Operatoren sind dagegen zeitunabhängig.
- 2.) Dann gibt es das Heisenbergbild, in dem die Zustände zeitunabhängig sind und die Operatoren einer zeitlichen Entwicklung unterliegen.
- 3.) Als drittes und letztes schließlich das Wechselwirkungsbild. In dieser Darstellung sind sowohl Zustände als auch Operatoren zeitabhängig. Der Vorteil gegenüber den beiden anderen Bildern ist jedoch, dass die Zeitentwicklung von Zuständen nur über den Störoperator $V(t)$ erfolgt und die Zeitentwicklung von Operatoren nur über H_0 . Damit ist explizit die Störung vom ungestörten System entkoppelt.

Das System befinde sich zum Zeitpunkt $t_0 = -\infty$ im Anfangszustand $|i\rangle$. (Dieser sei ein Eigenzustand des ungestörten Systems.) Die zeitliche Entwicklung dieses Zustandes im Wechselwirkungsbild erfolgt über den Zeitentwicklungsoperator

$$U_I(t, -\infty) = T \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_I(t') \right), \quad (25)$$

wobei T der Zeitordnungsoperator ist. Wie oben schon erwähnt, wird die Zeitentwicklung eines Zustandes im Wechselwirkungsbild einzig und allein durch den Störoperator $V(t)$ (hier $V_I(t)$ im Wechselwirkungsbild) vermittelt. Der Zustand des Systems ist zur Zeit t gegeben durch

$$|\psi(t)\rangle = U_I(t, -\infty)|i\rangle, \quad (26)$$

und ist jedoch kein Eigenzustand des ungestörten Systems mehr. Die Übergangsamplitude $A_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle}$ dafür, dass sich das System zum Zeitpunkt t in einem Eigenzustand $|f\rangle$ befindet, ergibt sich durch Projektion auf diesen Zustand

$$A_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} = \langle f|\psi(t)\rangle = \langle f|U_I(t, -\infty)|i\rangle, \quad (27)$$

und die Wahrscheinlichkeit für einen solchen Übergang ist das Betragsquadrat dieser Amplitude:

$$W_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} = |A_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle}|^2 = |\langle f|U_I(t, -\infty)|i\rangle|^2. \quad (28)$$

Der dritte Term in der Entwicklung lautet dann:

$$\left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t''). \quad (29)$$

Jetzt müssen wir noch den Störoperator $V(t)$ ins Wechselwirkungsbild bringen. Hierbei gilt

$$V_I(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0t\right) V(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0t\right), \quad (30)$$

und damit erhalten wir speziell für die zeitabhängige periodische Störung

$$\begin{aligned} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \langle f | \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0t'\right) V \exp(-i\omega t') \exp(\varepsilon t') \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0t'\right) \times \\ \times \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0t''\right) V \exp(-i\omega t'') \exp(\varepsilon t'') \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0t''\right) |i\rangle. \end{aligned} \quad (31)$$

An dieser Stelle wäre es von Vorteil, wenn wir die Operatoren H_0 loswerden könnten. Hierbei müssen wir beachten, dass H_0 im Allgemeinen nicht notwendigerweise mit dem Störoperator $V(t)$ vertauscht, also $[H_0, V(t)] \neq 0$! $\exp(i/\hbar H_0 t')$ ganz links können wir auf $\langle f |$ wirken lassen und $\exp(-i/\hbar H_0 t'')$ ganz rechts auf $|i\rangle$. Da sowohl $|i\rangle$ als auch $|f\rangle$ Eigenzustände zu H_0 sind, gilt

$$\langle f | \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0t'\right) = \langle f | \exp\left(\frac{i}{\hbar}E_f t'\right) = \exp(i\omega_f t') \langle f |, \quad (32a)$$

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0t''\right) |i\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_i t''\right) |i\rangle = \exp(-i\omega_i t'') |i\rangle. \quad (32b)$$

Um die beiden H_0 in der Mitte loszuwerden, schieben wir ein vollständiges System von Eigenzuständen von H_0 ein, also

$$\mathbb{1} = \sum_z |z\rangle \langle z|, \quad (33)$$

und erhalten:

$$\begin{aligned} U_I^{(2)} &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_z \exp(i(\omega_f - \omega_i)t) \langle f | \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' V \exp(-i\omega t') \exp(\varepsilon t') \times \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0t'\right) |z\rangle \langle z| \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0t''\right) V \exp(-i\omega t'') \exp(\varepsilon t'') |i\rangle = \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_z \langle f | V |z\rangle \langle z | V |i\rangle I, \end{aligned} \quad (34)$$

mit

$$I = \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \exp[i(\omega_f - \omega_z - \omega - i\varepsilon)t'] \exp[i(\omega_z - \omega_i - \omega - i\varepsilon)t'']. \quad (35)$$

An dieser Stelle werten wir noch das Integral I aus. Hierbei ist zu beachten, dass die Integrationsvariable des ersten Integrals als Grenze des zweiten vorkommt!

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^t dt' \exp[i(\omega_f - \omega_z - \omega)t' + \varepsilon t'] \frac{1}{i(\omega_z - \omega_i - \omega) + \varepsilon} \exp[i(\omega_z - \omega_i - \omega)t'' + \varepsilon t''] \Big|_{t''=-\infty}^{t''=t'} = \\ &= \frac{1}{i(\omega_z - \omega_i - \omega) + \varepsilon} \int_{-\infty}^t dt' \exp[i(\omega_f - \omega_i - 2\omega)t' + 2\varepsilon t'] = \\ &= \frac{1}{i(\omega_z - \omega_i - \omega) + \varepsilon} \frac{1}{i(\omega_f - \omega_i - 2\omega) + 2\varepsilon} \exp[i(\omega_f - \omega_i - 2\omega)t + 2\varepsilon t]. \end{aligned} \quad (36)$$

Damit folgt dann:

$$U_I^{(2)}(t, -\infty) = \frac{1}{\hbar^2} \exp(i(\omega_f - \omega_i)t) \frac{\exp(2t(\varepsilon - i\omega))}{\omega_f - \omega_i - 2\omega - 2i\varepsilon} \sum_z \frac{\langle f | V |z\rangle \langle z | V |i\rangle}{\omega_z - \omega_i - \omega - i\varepsilon}. \quad (37)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit ergibt sich durch Bildung des Betragsquadrats und Ableitung nach der Zeit:

$$\begin{aligned} \frac{dW_{|i\rangle \mapsto |f\rangle}}{dt} &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{d}{dt} \left| \frac{\exp(2\varepsilon t)}{\omega_f - \omega_i - 2\omega - 2i\varepsilon} \sum_z \frac{\langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle}{\omega_z - \omega_i - \omega - i\varepsilon} \right|^2 = \\ &= \frac{1}{\hbar^4} \frac{4\varepsilon \exp(4\varepsilon t)}{(\omega_f - \omega_i - 2\omega)^2 + 4\varepsilon^2} \left| \sum_z \frac{\langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle}{\omega_z - \omega_i - \omega - i\varepsilon} \right|^2. \end{aligned} \quad (38)$$

Nach Voraussetzung verschwinden Matrixelemente $\langle z|V|i\rangle$ für Übergänge mit $E_z - E_i = \hbar\omega$. Damit können wir in der Summe sofort $\varepsilon = 0$ setzen, ohne eine Divergenz durch den Nenner zu erzeugen :-). Nun wird noch die Darstellung der δ -Funktion als Grenzwert der Funktionenfolge (Lorentzkurve)

$$\delta_\varepsilon(x - a) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{(x - a)^2 + \varepsilon^2}, \quad (39)$$

für $\varepsilon \mapsto 0$ verwendet und wir erhalten das Ergebnis aus der Musterlösung:

$$\boxed{W_{|i\rangle \mapsto |f\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_z \frac{\langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle}{\omega_z - \omega_i - \omega - i\varepsilon} \right|^2 \delta(E_f - E_i - 2\hbar\omega)}. \quad (40)$$

b.)

Zur Berechnung der Integrale ist es am Geschicktesten, die Kosinusfunktion über komplexe Exponentialfunktionen auszudrücken:

$$\cos(\omega t) = \frac{1}{2} (\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)). \quad (41)$$

Damit können wir den dritten Term des Zeitentwicklungsoperators wie folgt schreiben:

$$\frac{1}{4} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_z \langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle \times I, \quad (42)$$

with

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \exp[i(\omega_f - \omega_z - i\varepsilon)t'] \{ \exp(i\omega t') + \exp(-i\omega t') \} \times \\ &\quad \times \exp[i(\omega_z - \omega_i - i\varepsilon)t''] \{ \exp(i\omega t'') + \exp(-i\omega t'') \}. \end{aligned} \quad (43)$$

Im Prinzip handelt es sich hierbei um die Summe von vier Integralen der Form

$$\begin{aligned} I^{(n)} &= \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \exp[(i\omega_1 + \varepsilon)t'] \exp(i\omega_2 t') \exp((i\omega_3 + \varepsilon)t'') \exp(i\omega_4 t'') = \\ &= \int_{-\infty}^t dt' \exp[(i(\omega_1 + \omega_2) + \varepsilon)t'] \frac{1}{i(\omega_3 + \omega_4) + \varepsilon} \exp[(i(\omega_3 + \omega_4) + \varepsilon)t'']_{-\infty}^{t'} = \\ &= \frac{1}{i(\omega_3 + \omega_4) + \varepsilon} \frac{1}{i(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4) + 2\varepsilon} \exp[(i(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4) + 2\varepsilon)t]. \end{aligned} \quad (44)$$

Damit können wir die vier Integrale ausrechnen:

$$I^{(1)} = \frac{1}{i(\omega_z - \omega_i + \omega) + \varepsilon} \frac{1}{i(\omega_f - \omega_i + 2\omega) + 2\varepsilon} \exp[(i(\omega_f - \omega_i + 2\omega) + 2\varepsilon)t], \quad (45)$$

$$I^{(2)} = \frac{1}{i(\omega_z - \omega_i + \omega) + \varepsilon} \frac{1}{i(\omega_f - \omega_i) + 2\varepsilon} \exp[(i(\omega_f - \omega_i) + 2\varepsilon)t], \quad (46)$$

$$I^{(3)} = \frac{1}{i(\omega_z - \omega_i - \omega) + \varepsilon} \frac{1}{i(\omega_f - \omega_i) + 2\varepsilon} \exp[(i(\omega_f - \omega_i) + 2\varepsilon)t], \quad (47)$$

$$I^{(4)} = \frac{1}{i(\omega_z - \omega_i - \omega) + \varepsilon} \frac{1}{i(\omega_f - \omega_i - 2\omega) + 2\varepsilon} \exp[(i(\omega_f - \omega_i - 2\omega) + 2\varepsilon)t], \quad (48)$$

Damit lautet die Übergangsamplitude:

$$\begin{aligned} A_{|i\rangle \mapsto |f\rangle} &= \frac{1}{4\hbar^2} \left\{ I^{(1)} + I^{(4)} + (I^{(2)} + I^{(3)}) \right\} = \\ &= \frac{\exp(i(\omega_f - \omega_i)t)}{4\hbar^2} \left\{ \frac{\exp(2(i\omega + \varepsilon)t)}{\omega_f - \omega_i + 2\omega - 2i\varepsilon} \sum_z \frac{\langle f|V|z\rangle \langle V|i\rangle}{\omega_z - \omega_i + \omega - i\varepsilon} \right. \\ &\quad + \frac{\exp(2(-i\omega + \varepsilon)t)}{\omega_f - \omega_i - 2\omega - 2i\varepsilon} \sum_z \frac{\langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle}{\omega_z - \omega_i - \omega - i\varepsilon} \\ &\quad \left. + \frac{\exp(2\varepsilon t)}{\omega_f - \omega_i - 2i\varepsilon} \sum_z \frac{2(\omega_z - \omega_i - i\varepsilon) \langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle}{(\omega_z - \omega_i - i\varepsilon)^2 - \omega^2} \right\}. \end{aligned} \quad (49)$$

Wir definieren nun der Einfachheit :-) halber:

$$A \equiv \frac{\exp(2(i\omega + \varepsilon)t)}{\omega_f - \omega_i + 2\omega - 2i\varepsilon} S_1, \quad S_1 = \sum_z \frac{\langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle}{\omega_z - \omega_i + \omega - i\varepsilon}, \quad (50a)$$

$$B \equiv \frac{\exp(2(-i\omega + \varepsilon)t)}{\omega_f - \omega_i - 2\omega - 2i\varepsilon} S_2, \quad S_2 = \sum_z \frac{\langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle}{\omega_z - \omega_i - \omega - i\varepsilon}, \quad (50b)$$

$$C \equiv \frac{\exp(2\varepsilon t)}{\omega_f - \omega_i - 2i\varepsilon} S_3, \quad S_3 = \sum_z \frac{2(\omega_z - \omega_i - i\varepsilon) \langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle}{(\omega_z - \omega_i - i\varepsilon)^2 - \omega^2}. \quad (50c)$$

Wir haben also das Betragsquadrat des Ausdrucks

$$\frac{\exp(i(\omega_f - \omega_i)t)}{4\hbar^2} (A + B + C), \quad (51)$$

zu bilden, um die Wahrscheinlichkeit $W_{|i\rangle \mapsto |f\rangle}$ zu berechnen. Dabei treten Betragsquadratsterme $|A|^2$, $|B|^2$, $|C|^2$ und sechs Mischterme (wie beispielsweise AB^*) auf. Jeweils zwei dieser Mischterme kann man kombinieren und dann geschickt über

$$z + z^* = 2\text{Re}(z), \quad z \in \mathbb{C}, \quad (52)$$

berechnen. Wir führen diese Berechnung für die Kombination $AB^* + A^*B$ explizit durch. In den Summen S_1 , S_2 (und auch S_3) stecken nur Imaginärteile, die proportional zu ε sind. Die Bildung des Realteils von $S_1 S_2^*$ bedeutet also nicht anderes als den Grenzwert $\varepsilon \mapsto 0$ von $S_1 S_2^*$ zu bilden:

$$\begin{aligned} AB^* + A^*B &= 2\text{Re}(AB^*) = 2\text{Re} \left\{ \frac{\exp(4t(-i\omega + \varepsilon))}{(\omega_f - \omega_i - 2\omega - 2i\varepsilon)(\omega_f - \omega_i + 2\omega + 2i\varepsilon)} S_1 S_2^* \right\} = \\ &= 2\text{Re} \left\{ \frac{\exp[4t(-i\omega + \varepsilon)]}{(\omega_f - \omega_i - 2\omega)(\omega_f - \omega_i + 2\omega) - 8i\varepsilon\omega + 4\varepsilon^2} \right\} (S_1 S_2)_{|\varepsilon=0} = \\ &= 2\text{Re} \left\{ \frac{\exp[4t(-i\omega + \varepsilon)] [(\omega_f - \omega_i)^2 + 4(\omega^2 + \varepsilon^2) + 8i\varepsilon\omega]}{[(\omega_f - \omega_i)^2 + 4(\omega^2 + \varepsilon^2) - 8i\varepsilon\omega][(\omega_f - \omega_i)^2 + 4(\omega^2 + \varepsilon^2) + 8i\varepsilon\omega]} \right\} (S_1 S_2)_{|\varepsilon=0} = \\ &= 2\text{Re} \left\{ \frac{\exp(4\varepsilon t) [\cos(4\omega t) - i \sin(4\omega t)] [(\omega_f - \omega_i)^2 + 4(\omega^2 + \varepsilon^2) + 8i\varepsilon\omega]}{[(\omega_f - \omega_i)^2 + 4(\omega^2 + \varepsilon^2)]^2 + 64\varepsilon^2\omega^2} \right\} (S_1 S_2)_{|\varepsilon=0} = \\ &= \frac{2 \exp(4\varepsilon t)}{[(\omega_f - \omega_i)^2 + 4(\omega^2 + \varepsilon^2)]^2 + 64\varepsilon^2\omega^2} \text{Re} \left\{ [(\omega_f - \omega_i)^2 + 4(\omega^2 + \varepsilon^2)] \cos(4\omega t) \right. \\ &\quad \left. + \{8\varepsilon\omega \cos(4\omega t) - [(\omega_f - \omega_i)^2 + 4(\omega^2 + \varepsilon^2)] \sin(4\omega t)\} i + 8\varepsilon\omega \sin(4\omega t) \right\} (S_1 S_2)_{|\varepsilon=0} = \\ &= \frac{2 \exp(4\varepsilon t) \{[(\omega_f - \omega_i)^2 + 4(\omega^2 + \varepsilon^2)] \cos(4\omega t) + 8\varepsilon\omega \sin(4\omega t)\}}{[(\omega_f - \omega_i)^2 + 4(\omega^2 + \varepsilon^2)]^2 + 64\varepsilon^2\omega^2} (S_1 S_2)_{|\varepsilon=0}. \end{aligned} \quad (53)$$

Leitet man nun diesen Ausdruck nach der Zeit ab und bildet den Grenzwert $\varepsilon \mapsto 0$, so erkennt man, dass dieser leider nicht verschwindet (wie es nach der ursprünglichen Aufgabenstellung) gedacht war. Die Aufgabenstellung wurde jetzt aber dahingehend abgeändert, dass eine Mittelung über alle Frequenzen durchgeführt wird, was

Terme wie $\cos(\omega t)$ und $\sin(\omega t)$ zum Verschwinden bringt. Unter dieser Voraussetzung verschwinden dann auch alle Mischterme :-). Dann kann man schließlich die Zeitableitung bilden und ε gegen null gehen lassen. Unter Verwendung von

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{4\varepsilon}{(\omega_f - \omega_i)^2 + (2\varepsilon)^2} = 2\pi\delta(\omega_f - \omega_i), \quad (54)$$

und analog für die anderen Terme ergibt sich dann das Ergebnis aus der Musterlösung:

$$W_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} = \frac{\pi}{2\hbar} \left\{ \left| \sum_z \frac{\langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle}{E_z - E_i + \hbar\omega} \right|^2 \delta(E_z - E_i + 2\hbar\omega) + \left| \sum_z \frac{\langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle}{E_z - E_i - \hbar\omega} \right|^2 \delta(E_f - E_i - 2\hbar\omega) \right. \\ \left. + \left| \sum_z \frac{2(E_z - E_i) \langle f|V|z\rangle \langle z|V|i\rangle}{(E_z - E_i)^2 - (\hbar\omega)^2} \right|^2 \delta(E_f - E_i) \right\}. \quad (55)$$

Nun zur physikalischen Interpretation. Aus dem Ergebnis ließt man ab, dass in zweiter Ordnung Störungstheorie Übergänge von $|i\rangle \equiv |E_i\rangle$ nach $|f\rangle \equiv |E_f\rangle$ (bzw. umgekehrt) unter Zuhilfenahme von beliebigen Zwischenzuständen $|z\rangle \equiv |E_z\rangle$ stattfinden. (Dies erkennt man an der Summe über z .) Um zu verstehen, was genau sich hier physikalisch abspielt, benötigen wir die Heisenbergsche Energie-Zeit-Unbestimmtheitsrelation:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (56)$$

Diese ist anders zu interpretieren als die aus Theorie D bekannte Orts-Impuls-Unbestimmtheitsrelation

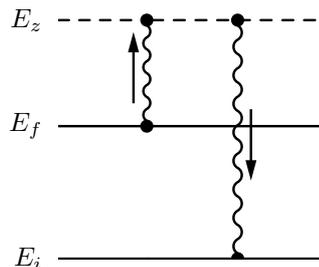
$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (57)$$

wobei hier Δp und Δx keine von der Messapparatur abhängige Messfehler sind, sondern prinzipielle Unbestimmtheiten von Impuls und Ort, die aus den Eigenschaften der Quantentheorie heraus folgen. (57) besagt im Wesentlichen, dass Ort und Impuls gleichzeitig nicht beliebig genau gemessen werden können. Das ist eine Folge der Nichtvertauschbarkeit des Orts- und Impulsoperators. In (56) sind ΔE und Δt jedoch keine Ungenauigkeiten, weil man der Zeit auch in der Quantenmechanik keinen Operator zuordnet; diese ist wie auch in der klassischen Mechanik ein einfacher Parameter. In einem quantenmechanischen System ist ΔE die Abweichung vom mittleren Wert der Energie $\langle E \rangle$, die das System über ein Zeitintervall Δt annehmen kann. Hierbei muss

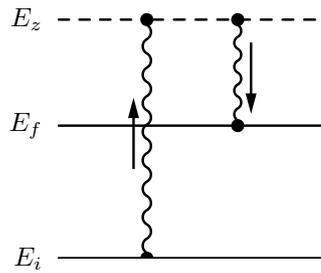
$$\Delta t \ll \frac{\hbar}{2\Delta E}, \quad (58)$$

sein, so dass die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^*\psi$ der Wellenfunktion ψ (welche diesen Zustand der Energie $\langle E \rangle + \Delta E$ beschreibt) konstant (stationär, also von der Zeit unabhängig) ist. Damit ist es beispielsweise möglich, dass aus dem Vakuum heraus ein virtuelles Teilchen entsteht, das sich nach der Zeit $\Delta t \sim \hbar/(2\Delta E)$ wieder vernichtet. (Man spricht dabei von Vakuumfluktuationen.) Der klassische Energieerhaltungssatz ist also für einen sehr kurzen Zeitraum Δt verletzt, denn das Vakuum hat $\langle E \rangle = 0$. Genau etwas Ähnliches kann sich hier abspielen, wobei wir die verschiedenen Fälle, die auftreten, getrennt durchsprechen wollen. Die Zwischenzustände $|E_z\rangle$ sind alle Eigenzustände, die der Hamiltonoperator hergibt; wobei Übergänge mit großem Energieabstand zwischen $|E_z\rangle$ und $|E_i\rangle$ bzw. $|E_f\rangle$ unterdrückt sind (Nenner!). Im Wesentlichen tragen Zwischenzustände nahe bei $|E_i\rangle$ bzw. $|E_f\rangle$ bei. Übergänge von $|E_f\rangle$ nach $|E_z\rangle$ laufen durch Emission/Absorption eines virtuellen Photons ab, sofern sich $|E_z\rangle$ unter- oder oberhalb von $|E_f\rangle$ befindet. Da alle diese virtuellen Prozesse stattfinden können, ist über die Amplituden (nicht über die Betragsquadrate, oder Wahrscheinlichkeiten!) zu summieren, was einer sogenannten **kohärenten Summation** entspricht. Eine Summe über die Betragsquadrate ist **inkohärent** und berücksichtigt quantenmechanische Interferenzeffekte nicht.

- 1.) Das System befindet sich anfänglich in einem angeregten Zustand $|E_f\rangle$. Unter Emission/Absorption virtueller Photonen nimmt das System den intermediären Zustand $|E_z\rangle$ ein und geht dann in den energetisch stabilen Zustand mit Energie $|E_i\rangle$ über:



- 2.) Das System befindet sich anfangs im energetisch niedrigsten Zustand $|E_i\rangle$ und geht durch Emission/Absorption virtueller Photonen über einen Zwischenzustand $|E_z\rangle$ in den angeregten Zustand $|E_f\rangle$ über.



- 3.) Hier gibt es zwei Fälle. Im ersten Fall befindet sich das System im Zustand $|E_i\rangle$ wird dann durch Absorption eines virtuellen Photons auf den Zustand $|E_z\rangle$ angeregt und fällt danach durch Emission eines virtuellen Photons wieder auf den Zustand $|E_i\rangle$ zurück. Im zweiten Fall befindet sich das System im angeregten Zustand $|E_f\rangle$, emittiert/absorbiert ein virtuelles Photon und nimmt damit den Zwischenzustand $|E_z\rangle$ ein und absorbiert/emittiert zu guter Letzt wieder ein virtuelles Photon, um sich erneut im angeregten Zustand $|E_f\rangle$ zu befinden.

