1.1 Die Quantenmechaik und ihre Probleme

Dies ist keine Geschichte der Quantenmechanik sondern nur eine kurze Orientierung zur Einordnung der neueren Entwicklung in Richtung des Quanten Computing (QC). Auch der Versuch, die quantenmechanik etwas zu "demystifizieren".

> *"If there is any moment that marks the birth of quantum mechanics, it would be the vacation taken by the young Werner Heisenberg in 1925" (S. Weinberg) .*

1.1 Die QM und ihre Probleme

Heisenberg schreibt kurz und bündig:

> *"In der Arbeit soll versucht werden, Grundlagen zu gewinnen für eine quanten-theoretische Mechanik, die ausschliesslich auf Beziehungen zwischen prinzipiell beobachtbaren Grössen basiert ist."*

[Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen,1925]

Die beobachtbaren Grössen (z.B. Energieniveaux eines Atoms) werden in Listen (Vektoren) angegeben. Auf diese wirken Matrizen, daher der frühe Name für die QM: Matrizenmechanik.

Dies erforderte für ein einfaches physikalisches System wie das H-atom schon komplizierte Rechnung (Pauli).

1.1 Die QM und ihre Probleme

In der physikalischen Anwendung erfolgte eine gewaltige Vereinfachung durch die **Schrödinger-Gleichung** [E. Schrödinger: Quantisierung als Eigenwertproblem,1926].

Gleichwertigkeit der beiden Zugänge gezeigt mit Hilfe der Funktionalanalysis:

Zustandsraum wird gebildet von:

Vektoren in einem Hilbertraum	bei Heisenberg, Born, Jordan und Pauli:
Wellenfunktionen	bei Schrödinger
Operatoren sind :	
Matrizen	bei Heisenberg, Born, Jordan und Pauli
Lineare Funktionsoperationen	bei Schrödinger
wie Ableitungen, Multiplikation	

Die formale Entwicklung der Quantenmechanik wurde weitgehend abgeschlossen durch John von Neumanns Buch:
Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik (1932).
Klare mathematische Darstellung und Einführung des statistischen Operators. $\Rightarrow$ C^* Algebren, (bei Mathematikern sehr beliebt.)

Zusammenfassung

	klassisch	Quantenmechanik			Quantenfeltheorie
	Phasenraum	Hilbertraum		C^*	Fockraum
	< 1925	1925	1926	1932	1927ff
	Newton....	Heisenberg	Schrödinger	v. Neumann	Jordan,Klein...
Observable	$F(p,q)$	Matrizen	$\partial_x, x \cdots$	$\in C^*$	Operatoren
Zustände	$\rho(p,q)$	Vektoren	Funktionen	$\in C^*$	Zustände
Mathem.	Diff-Int. Rechn	Lin. Algebra.	Funkt. Anal.	lin. Algebra.	

1.1 Die QM und ihre Probleme

Schrödinger grosse Erleichterung bei der Lösung der Probleme, aber erweckte Hoffnungen: Quantenmechanik doch klassisch?

quantisiertes H-Atom $\overbrace{\sim}^{???}$ elektr. Hohlleiter ??

Grund für die angebliche "Unverständlichkeit" der Quantenphysik ?

Für QC besonders wesentliche Aspekte erregten besonderes Misstrauen:

statistische Interpretation, Verschränkung, Teleportation

Einsteins Kritik, Das EPR Paradox

Der prominenteste Kritiker der neuen Quantenmechanik war Albert Einstein. Seine Kritik: mitverantwortlich für den Ruf der QM als "unverstanden" und wirkt heute noch nach, besonders in USA (s. Lit. über QC).

Einstein an seinen Freund Max Born (4.12. 1926):

> *Die Quantenmechanik ist sehr achtunggebietend. Aber eine innere Stimme sagt mir, dass das doch nicht der wahre Jakob ist. Die Theorie liefert viel, aber dem Geheimnis des Alten bringt sie uns kaum näher. Jedenfalls bin ich überzeugt, dass der nicht würfelt. (Brief vom 4.12.1926)*

1.1 Die QM und ihre Probleme

Born's spätere (1951) Antwort auf Einsteins Kritik prophetisch im Hinblick auf QC::

> *„If God has made the world a perfect mechanism, He has at least conceded so much to our imperfect intellect that in order to predict little parts of it, we need not solve innumerable differential equations, but can use dice with fair success.“*

Max Born *Einstein's Statistical Theorie*s in Albert Einstein : Philosopher-Scientist

Zeitgenössischen Reaktionen auf Einsteins Kritik: sehr geteilt.

Die meisten der jüngeren Physiker nicht beeindruckt

aber Niels Bohr, er ging darauf ausführlich ein:

Zur Vermeidung von Abmahnungen ausgelassene Abbildung

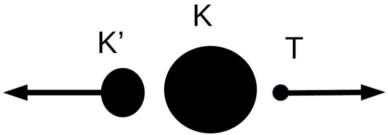
1.1 Die QM und ihre Probleme

• Einstein (Akademiesitzung 1927): früher Versuch, sein Missbehagen an der QM konstruktiv zu untermauern, Veröffentlichung aber zurückzogen.
• de Broglie (Solvay-Konferenz 1927): unbeobachtbares Führungsfeld einzuführen, das aber z.B. zu den Interferenzerscheinungen beim Doppelspalt führt, fand wenig Anklang
"he was laughed out of court" (J. Bell:)

• 1936: EPR Pradoxon, in jeder Abhandlung über QC erwähnt.
Einstein, A; B Podolsky; N Rosen ; Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be Considered Complete?. Physical Review. 47 (10): 777–780.

EPR

$$\vec{p}_{K'} = -\vec{p}_T$$



Ruhendenr radioaktiver Kern zerfällt: $K \to K' + T$.

Impulserhaltung: $\vec{p}_{K'} = -\vec{p}_T$. Messung von $\vec{p}_{K'}$ bestimmt $\vec{p}_T = -\vec{p}_{K'}$.

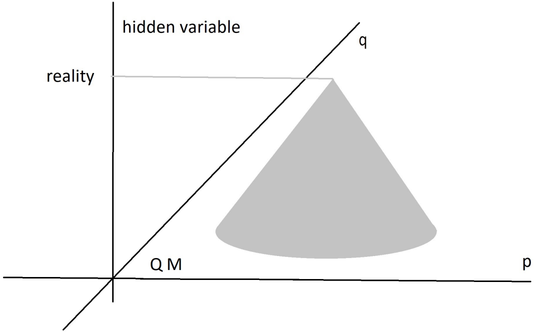
EPR: K' als auch T haben beide einen wohldefinierten (scharfen) Impulswert. $\longrightarrow$ Wenn wir Ort und Impuls kennen können, dann muss er auch dem Teilchen ungeteilt zukommen.

QM: Unschärferelation: Ort und Impuls nicht gleichzeitig scharf bestimmt.

EPR: QM gibt keine vollständige Beschreibung der “Physikalischen Realität”.

Verborgene Parameter hidden variables (Bohm)

Es gibt neben Ort und Impuls noch weitere Parameter, zur Bestimmung eines Teilchens, die wir aber nicht kennen, und die Unschärfe ist nur eine Konseqenz unsrer Unkenntnis über diese “Verborgenen Parameter” (*hidden variables*.)



1.1 Die QM und ihre Probleme

John Bell: Erweiterung von EPR, die zwischen “Einstein-Realität” und QM unterscheidet:

Bellsche Ungleichungen. (ausführlich später)

Hidden Variables: konstruiert, um die QM genau zu rekonstuieren

$\rightarrow$keinerlei Bedeutung für QC.

Auch nicht übertragen auf Quanten-Feldtheorie.

Historische Bemerkung

Newton: Licht = Teilchenstrahl

Interferenzeffekte (Newton’schen Ring) “unerklärte Fits” einführen : Optische Teichen haben gewisse Eigenschaften (**Fits**) die entscheiden, ob der Strahl an einer Grenzfläche eindringt oder reflektiert wird.

(Opticks, Book 2, Part III, Prop. 13 1704)

Wir hatten bereits bei der Behandlung der Informatik die Möglichkeit einer Addition (linearen Überlagerung) von "bits" betrachtet.
Dieses Phänomen wird als Verschränkung (entanglement) bezeichnet und ist in der Mikrophysik sehr wichtig und bestens bestätigt.

In der Makrophysik allerdings führt es zu "burlesken Fällen". Besonders

bekannt ist die "Schrödingersche Katze", die eine Superposition von einer lebendigen und einer toten Katze ist.

Schrödingers Katze

Zwei Teilsysteme (entsprechen bit-Raum):

• Erstes Teilsystem besteht aus:

einem radioaktiven Atom, z. B., ^{224}Ra, einem Geiger-Zähler der einen Hammer bedient und einer einer Ampulle gefüllt mit einem starken Narkotikum(bei Schrödinger: KCN).

• Das andere Teilsystem ist eine Katze.

Beide Systeme befinden sich in einem dicht abgeschlossenen Raum.

Ist das Radium-Atom intakt ist das Narkotikum in der Ampulle und die Katze ist wach.

Ist das Atom zerfallen, so ist die Ampulle zertrümmert, das Narkotikum freigesetzt und die Katze schläft.

Wir haben also: Jedes System kann in 2 Teilzuständen sein:

System 1: $|Ra\rangle$: Narkotikum in der Flasche

System 1': $(|Rn\rangle|\alpha\rangle)$: Narkotikum im ganzen Raum verteilt

System 2: Katze ist wach

System 2': Katze narkotisiert

Klassische Physik: Katze ist wach **oder** narkotisiert

Quantenmechanik: System ist verschränkt: Überlagerung von wach und narkotisiert

Schrödingers Katze

$|Ra\rangle \otimes \Big|$  $\Big\rangle + (|Rn\rangle|\alpha\rangle) \otimes \Big|$  $\Big\rangle$

Narkotikum in der Flasche — Narkotikum im ganzen Raum verteilt

Überlagerung einer schlafenden **und** einer narkotisierten Katze!!!!

Noch nie beobachtet !

Das Problem, dass makroskopische Überlagerungen (wie tote und lebendige Katze) absurd erscheinen wurden aber als “burleske” Konsequenzen hingenommen.

Dass sie tatsächlich nicht beobachtet wurden, wurde erst durch das Phänomen der **Dekohärenz** erklärt. Ein makroskopischer Körper wird so stark von der Umgebung beeinflusst, dass dadurch die Verschränkung, die auf festen Phasenbeziehungen basiert, extrem schnell (quasi-instantan) zerstört wird. [H. Dieter Zeh]
Wir kommen später darauf ausführlicher zurück.

1.1 Die QM und ihre Probleme

Aber auch die sehr gut bestätigten Verschränkungen in der Mikrophysik haben viele Physiker gestört, vor allem auch wieder Einstein, wie oben geschildert.
Das QC, und vor allem seine Vorteile gegenüber dem klassischen Computer, beruhen gerade ganz wesentlich auf den umstrittenen Prinzipien der QM, während die Dekohärenz, die den Übergang zur klassischen Physik erklärt, die Möglichkeiten zur Konstruktion von Quantencomputern gewaltig einschränkt. Wir fassen daher nochmal zusammen:

1) Grund für das Unbehagen mancher Physiker eher erkenntnistheoretisch als handfest physikalisch:

klassische Physik beschreibt die **Wirklichkeit** (Bild der Wirklichkeit)

dagegen

Quantenphysik beschreibt die **Möglichkeiten**

$\Downarrow$ **Messung**

Wirklichkeit (Zählerstände)

Grenzen der Physik? Wenn ja, wo?

2) Es gibt aber auch sehr handfeste Probleme:
Was ist isoliertes System in der QM ??
Oft technisch schwierig, bei geladenen Teilchen prinzipiell unmöglich:
Geladenes Teilchen immer gekoppelt an das elektromagnetische Feld;
QM: Ignorierung der Kopplung $\Rightarrow$ auch die angeregten Zustände z. B. eines H-Atoms sind im Rahmen der QM stabil!
Behebung durch **Rezept**: Fermi's Golden rule als Rezept für Übergangswahrscheinlichkeit.
Teilweise Lösung in **Quantenfeldtheorie (QFT)** aber neue Probleme (Renormierungsprobleme)
Gravitation noch einschneidender: Universell und lässt sich nicht abschirmen.

1.1 Die QM und ihre Probleme

Lange Zeit: Sehr pragmatische Einstellung der meisten Physiker.
Grosse Fortschritte trotz der grundsätzlichen Probleme:
z.B. Standardmodell der Elementarteilchenphysik, Festkörperphysik, Quantenoptik.

aber in neuerer Zeit Beschäftigung mit den mehr grundsätzlichen Problemen ermöglicht z.B. durch:
Kühltechnik (näher $T = 0$)
Atomphysik (Jonenfallen [Paul und Dehmelt, Nobelpreis 1989, Haroche und Wineland, Nobelpreis 2012])
Quantenoptik (Laser)

Daher:

Neuere direkte Untersuchungen zu den “kritischen” Prinzipien möglich.

Wichtiges Resultat:

- **Bellsche Ungleichungen verletzt**

[Aspect, Clauser,Zeilinger, Nobelpreis 2022]

$\rightarrow$ EPR auch durch verborgene Parameter nicht zu lösen!!

Aber:

Mehrzahl der Physiker nicht überrascht:

Das Ergebnis bedeutet nämlich:

Die QM ist richtig !

Spin-off Effekt dieser Entwicklung in der Atomphysik :

Quanten-Computing

[Richard P Feynman. Simulating physics with computers, 1981. International Journal of Theoretical Physics, 21(6/7). Yuri Manin. Computable and Uncomputable. Sovetskoye Radio, Moscow, 128, 1980.]

Der Durchbruch zum QC kam aber nicht durch neue Einsichten in die QM, sondern

• durch die Entwicklung von Algorithnmen, die auf Prinzipien der QM beruhen. (Shore)

• Fortschritt in der experimentellen Technik, die es erlaubt Systeme von Qubits über eine nützliche Zeit kohärent zu halten und Gatter zu realisieren.

Quanten-Computing

QC: Rückkehr zur Heisenbergschen Matrizenmechanik.
Rechnerisch sehr einfach: die auftretenden Matrizen sind endlich dimensional, Qubit ist sogar nur 2 dimensional.

In den nächsten Stunden:
Wiederholung der QM speziell im Hinblick auf das QC, aber auch auf die Grenzen, die durch die Einfachheit (Vereinfachungen) der Informatik bedingt sind.

- Das Qubit ist ein Modell der Informatik.
- Quanten Computer sind aber raum-zeitliche Gebilde.

Klassische Bücher:

W. Heisenberg

"Die Physikalischen Prinzipien de Quantentheorie" Leipzig 1928 (2. 1931)

H. Weyl

"Gruppentheorie und Quantenmechanik" Leipzig 1928 (2. 1931)

J. von Neumann

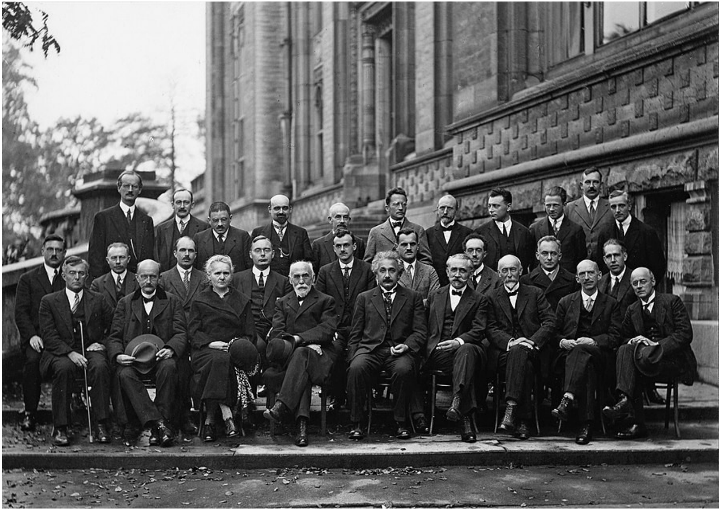
"Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik" Berlin 1932

P A M Dirac

"The Principles of Quantum Mechanics" Oxford 1930 (4. 1957)

1.1 Die QM und ihre Begründer

Solvay-Konferenz 1927



Back: Auguste Piccard, Émile Henriot, Paul Ehrenfest, Édouard Herzen, Théophile de Donder, Erwin Schrödinger,
JE Verschaffelt, Wolfgang Pauli, Werner Heisenberg, Ralph Fowler, Léon Brillouin.

Middle: Peter Debye, Martin Knudsen,
William Lawrence Bragg, Hendrik Anthony Kramers, Paul Dirac, Arthur Compton, Louis de Broglie,
Max Born, Niels Bohr.

Front: Irving Langmuir, Max Planck, Marie Curie, Hendrik Lorentz, Albert Einstein, Paul Langevin, Charles-Eugène Guye, CTR Wilson, Owen Richardson.

Hilbertraum $\mathcal{H}$

Ein Hilbertraum $\mathcal{H}$ ist ein

metrischer vollständiger separabeler linearer Vektorraum über den komplexen Zahlen

Vektorraum Eine Abelsche Gruppe über einem Körper, i. A. komplexe Zahlen $\mathcal{C} \ni \alpha, \beta \ldots$.

Seine Elemente heissen Vektoren, bezeichnet mit $|.\rangle$.

Das neutrale Element der Gruppe (das Null-element) wird i. A. mit 0 bezeichnet (ohne Umrandung) da $|0\rangle$ schon anderweitig belegt.

Linearität

$|f\rangle, \, |g\rangle \in \mathcal{H}, \; \alpha, \beta \in \mathcal{C} \Longrightarrow |\alpha \, f\rangle + |\beta \, g\rangle \in \mathcal{H}$

Meist nicht explizit erwähnt, aber wichtig z.B. für no-cloning Theorem

$|f\rangle - |f\rangle = 0; \; 0|f\rangle = 0$

Metrik induziert durch das Skalarprodukt $\mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathcal{C}$:

bilineare Sesquilinearform: $\mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathcal{C} \; \langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^* \in \mathcal{C}$,

$\langle f|(\alpha g + \beta h\rangle = \alpha scpfg + \beta scphg; \langle(\alpha^* \beta^*)f|g\rangle = (\alpha + \beta)\langle f|g\rangle$

$\langle f|f\rangle \geq 0$, \$$\langle f|f\rangle = 0$ nur für $|f\rangle = 0$ (neutrales Element)

im endlichdimensionalen $(0, 0, 0, \cdots 0)$

Abstand zweier Vektoren $|g_1\rangle, \, |g_2\rangle: \; ||g_1\rangle - |g_2\rangle| = \sqrt{\langle g_1 - g_2|g_1 - g_2\rangle}$

separabel: $\exists$ höchstens abzählbar unendliche Menge $|n_k\rangle$ dass
$\forall\ f \in \mathcal{H}$ gilt: $|f\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} |n_k\rangle$
:-) im QC: endlichdimensionale $\mathcal{H}$.
Vollständigkeit Der $\mathcal{H}$ is vollständig in der Norm, d.h. jede Cauchyfoge im $\mathcal{H}$ convergiert gegen ein Element des $\mathcal{H}$
Wenn $||f_j\rangle - |f_k\rangle| \leq \epsilon \forall\ j, k > N$ dann $\exists |f\rangle \in \mathcal{H}$ mit $\lim_{N\to\infty} |f_k\rangle = |f\rangle$
:-) im QC: endlichdimensionale $\mathcal{H}$, daher trivial.

Basis eines $\mathcal{H}$: Es gibt eine abzählbare Zahl von Basis-Vektoren.

$$|f_1\rangle, |f_2\rangle, \cdots |f_N\rangle \tag{1}$$

als deren Summe jedes Element dargestellt werden kann:

$$|\phi\rangle = \lim_{N\to\infty} \sum_{1}^{N} \alpha_i \, |f_i\rangle \tag{2}$$

:-) Im QC N endlich!

Wir können ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass die Basis orthonormal ist, d.h.

$$\langle f_i | f_k \rangle = \delta_{ik} \tag{3}$$

Wenn ein vollständiges System nicht orthogonal ist, können wir es orthonormaliseren (Verfahren von E. Schmidt):

$$
\begin{aligned}
|\tilde{\psi}_1\rangle &= \frac{1}{\|\psi_1\|}|\psi_1\rangle \\
|\hat{\psi}_2\rangle &= |\psi_2\rangle - \langle\tilde{\psi}_1|\psi_2\rangle|\tilde{\psi}_1\rangle; \quad |\tilde{\psi}_2\rangle = \frac{1}{\|\hat{\psi}_2\|}\hat{\psi}_2 \\
&\vdots \\
|\hat{\psi}_N\rangle &= |\psi_N\rangle - \sum_{i=1}^{N-1}\langle\tilde{\psi}_i|\psi_N\rangle|\tilde{\psi}_i\rangle; \quad |\tilde{\psi}_N\rangle = \frac{1}{\|\hat{\psi}_N\|}|\hat{\psi}_N\rangle
\end{aligned}
\tag{4}
$$

Die neuen Vektoren

$$
|\tilde{\psi}_1\rangle, |\tilde{\psi}_2\rangle, \cdots |\tilde{\psi}_N\rangle \tag{5}
$$

bilden eine orthonormale Basis (vollständiges Orthonormalsystem **voS**)

Sei $\{\cdots |f_n\rangle \cdots\}$ ein voS., d.h. $\langle f_k|f_j\rangle = \delta_{kj}$
Dann folgt aus $|\psi\rangle = \sum_k \alpha_k |f_k\rangle$ durch Multiplikation mit $\langle f_j|$:
$\langle f_j, \psi_j| =\rangle \sum_k \alpha_k \langle f_j|f_k\rangle = \alpha_j$ d.h. $\alpha_j = \langle f_j|\psi\rangle$
Wir haben also allgemein:

$$|\psi\rangle = \sum_j \langle j|\psi\rangle\, |j\rangle = \sum_i |f_j\rangle\langle f_j|\psi\rangle \tag{6}$$

d.h.

$$\sum_i |f_j\rangle\langle f_j| = 1 \tag{7}$$

Wahre Zauberformel, wird oft benutzt!

Die Existenz einer Basis im Hilbertraum macht den Zusammenhang mit der linearen Algebra besonders deutlich:

Jeder Vektor aus einer Cauchy-konvergente Zahlenfolge ist ein Hilbertraum (Hilbertscher Folgenraum)
und jedem $|f\rangle \in \mathcal{H}$ entsprich über eine Basis $\{\cdots, |f_i\rangle \cdots\}$ ein Element des Hilbertschen Folgenraumes, durch die Zupordnung:

$$(\cdots \alpha_n \cdots) \leftrightarrow \sum_n \alpha_n |f_n\rangle \tag{8}$$

:-) Ist N endlich und die Basis orthonormal, so ist der Hilbertsche Folgenraum ein Euklidischer Vektrorraum.

Ein wichtiges Beispiel für Hilberträume sind die quadratintegrablen Funktionen $\mathcal{L}_2(R^d) : \mathcal{R}^d \rightarrow \mathcal{C}$:

Das Skalarprodukt ist: $\langle\psi|\phi\rangle = \int d^d x \, \psi^*(x) \, \phi(x)$

Enwickeln wir etwa die Funktion $\psi(x) \in \mathcal{L}_2(R)$ nach einem beliebigen voS $\{\cdots f_i(x) \cdots\}$:

$$\psi(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k f_k(x) \qquad \text{dann gilt:} \tag{9}$$

$$\int dx |\psi(x)|^2 = \sum_{k,k'} \alpha^*_{k'} f^*_{k'}(x) \alpha_k f_k(x) \tag{10}$$

$$= \sum_{k,k'} \alpha^*_{k'} \alpha_k \langle f^*_{k'} | f_k \rangle \tag{11}$$

$$= \sum_{k,k'} \alpha^*_{k'} \alpha_k \delta_{k'\,k} = \sum_k |\alpha_k|^2 < \infty \tag{12}$$

D.h. $(\alpha_1, \alpha_2, \cdots \alpha_n, \cdots) \in \ell_2$ Hilbertscher Folgenraum.

Direktes Produkt von Hilberträumen

Das direkte Produkt zweier Hilberträume, $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ ist ein Hilbertraum,
der alle geordneten Paare $|\psi\rangle_A, |\phi\rangle_B \in \mathcal{H}_A$ und $\mathcal{H}_B$ und deren (abgeschlossene) Summen enthält.

Das Skalarprodukt eines solchen Paares ist Produkt der Skalarprodukte:

$$\langle (\langle\psi|_A \otimes \langle\phi|_B) | (|\chi\rangle_A \otimes |\xi\rangle_B) \rangle = \langle\psi|\chi\rangle_A \langle\phi|\xi\rangle_B \tag{13}$$

Für die neutralen Elemente gilt:

$$0 \otimes |.\rangle_B = |.\rangle_A \otimes 0 = 0 \tag{14}$$

Für endlichdimensionale Hilberträume gilt:
$dim(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B) = dim(\mathcal{H}_A) \cdot dim(\mathcal{H}_b)$

Das direkte Produkt lässt sich assoziativ auf N Hilberträume erweitern, z. B. auf 3:

$(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2) \otimes \mathcal{H}_3 = \mathcal{H}_1 \otimes (\mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3) \equiv \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3 \equiv \mathcal{H}^{\otimes 3}$ etc Ist

$\{\cdots |f_i^n\rangle_n \cdots\}$ voS von $\mathcal{H}_n$ dann ist

$$|f_i^1, f_k^2, \cdot f_j^N\rangle \cdots = |f_i^1\rangle_1 \otimes |f_k^2\rangle_2 \otimes \cdots \otimes |f_j^N\rangle_N \cdots \tag{15}$$

Ortonormalbasis von $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \mathcal{H}_N$

Für endlichdimensionale Hilberträume gilt:

$dim(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \mathcal{H}_N) = dim(\mathcal{H}_1) \cdot dim(\mathcal{H}_1) dim(\mathcal{H}_2) \cdots dim(\mathcal{H}_N)$

Beispiele für direkte Produkte in der QM:
Wie wir bereits gesehen haben, wird im QC i. A. ein Hilbertraum betrachtete, der das direkte Produkt von N 2-dimensionalen Hilberträumen ist (Qubits).
Dieser beschreibt dann einen Raum von der Dimension 2^N, d.h. die Zahl der Dimensionen wächst exponentiell mit der Zahl der Qubits.

Direkte Produkte von Hilberträumen spielen in der Physik eine eminent wichtige Rolle.
Bei einem Mehrteilchenproblem (z.B. zwei Spins, mehrere Elektronen in einem Atom) hat jedes Teilchen seinen eigenen $\mathcal{H}$.

Der Vollständigkeit halber sei hier erwähnt:

Direkte Summe Die direkte Summe zweier Hilberträume, $\mathcal{H}_A \oplus \mathcal{H}_B$: Hilbertraum, der alle Paare $|\psi\rangle_A, |\phi\rangle_B \in \mathcal{H}_A$ und $\mathcal{H}_B$ enthält.
Das Skalarprodukt eines solchen Paares die **Summe** der Skalarprodukte:

$$(\langle(|\psi\rangle_A + |\phi\rangle_B)\,|(|\chi\rangle_A + |\xi\rangle_B)\rangle = \langle\psi|\chi\rangle_A + \langle\phi|\xi\rangle_B \tag{16}$$

Für Mehrteilchenzustände mit variabler Teilchenzahl (a.B. in der Quantenoptik), in der Vielteichenphysik (z.B. statistischenMechanik) oder der Hochenergiephysik mit übergängen zwischen den Teilchensktoren spielt die direkte Summe (Fockraum) eine wichtige Rolle

Lineare Operatoren im $\mathcal{H}$

$\mathbf{A}, \mathbf{B} \cdots$: Lineare Abb im in einem Hilbertraum $\mathcal{H}$: Abbildung von $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$.

$$\mathbf{A}: \ |\psi\rangle \mapsto |\mathbf{A}\psi\rangle; \tag{17}$$

$\mathbf{A}\ Big(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle\Big) = \alpha|\mathbf{A}\psi_1\rangle + \beta|\mathbf{A}\psi_2\rangle;$
$(\mathbf{A}+\mathbf{B})|\psi\rangle = |\mathbf{A}\psi\rangle + |\mathbf{B}\psi\rangle; \quad (\mathbf{A}\,\mathbf{B})|\psi\rangle = \mathbf{A}|\mathbf{B}\psi\rangle = |\mathbf{AB}\psi\rangle$

Das **direkte Operatorprodukt** $\mathbf{M}_A \otimes \mathbf{N}_b$ wirkt im direkten Produkt $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$:

$$(\mathbf{M}_A \otimes \mathbf{N}_B)(|\psi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B) = |\mathbf{M}_A\psi\rangle_A \otimes |\mathbf{N}_B\phi\rangle_B \tag{18}$$

Auch das direkte Operatorprodukt lässt sich assoziativ erweitern, ganz analog zum direkten Produkt der Hilberträume.

Operatoren

Bemerkung: Meist nimmt man in der Physik Linearität an, um die Probleme zu vereinfachen, z.B. beim Hooke'schen Gesetz. Es ist bemerkenswert, dass in der QM lineare Operatoren eine fundamentale Rolle spielen. Nichtlinearitäten bei den Operatoren, die in den deduktiven Aufbau der QM eingehen, müssen, wenn überhaupts sehr sehr klein sein, da sie zu messbaren Abweichungen z. B. in der Atomphysik mit iHilberträumer ungeheuren Präzision führtten. Auch für das QC is die Linearität der Operatoren wesentlich.

Operatoren

Der **adjungierte** Operator $\mathbf{A}^\dagger$ zu $\mathbf{A}$ ist definiert durch:

$$\langle \mathbf{A}^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \mathbf{A} \psi \rangle \tag{19}$$

Ein Operator ist **selbstadjungiert oder hermitisch**, wenn

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger \tag{20}$$

und **unitär** wenn

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^\dagger \tag{21}$$

Ein unitärer Operator erhält das Skalarprodukt:

$$\langle \mathbf{A}\phi | \mathbf{A}\psi \rangle = \langle \mathbf{A}^\dagger \mathbf{A}\phi | \psi \rangle = \langle \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}\phi | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \tag{22}$$

Wie wir jedes Element eins Hilbertraumes als einen (u.U. abzählbar unendlich-dimensionalen) Vektor darstellen können, so auch jeden linearen Operator als (u.U. unendlich dimensionale) Matrix.

Dazu benutzen wir die Zauberformel (7):

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = \underbrace{\sum_j |f_j\rangle\langle f_j|}_{\mathbf{1}} \mathbf{A} \underbrace{\sum_k |f_k\rangle\langle f_k|}_{\mathbf{1}} |ps\rangle \tag{23}$$

mit $\psi_k \equiv \langle f_k|\psi\rangle \quad A_{jk} \equiv \langle f_j|\mathbf{A} f_k\rangle$ Durch ein voS $\{\cdots, |f_j\rangle, \cdots\}$ kann mit dem Vektor und der Matrix:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \equiv \left(A_{jk}\right); \tag{24}$$

kann mit den üblichen Regeln die lineare Abbildung $|\psi\rangle \mapsto |\mathbf{A}\psi\rangle$ dargestellt werden als

$$|\mathbf{A}\psi\rangle = \sum_k A_{jk}\psi_k\,|f_j\rangle; \qquad \text{mit} \;\; \psi_k = \langle f_k|\psi\rangle \tag{25}$$

Es gelten (auch für unendlich dimensionale Matrizes) die üblichen Rechenregeln: Die Summe zweier Matrizes ist die Summe der Komponenten

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \left(A_{jk} + B_{jk}\right) \tag{26}$$

das Produkt das übliche Matrixprodukt

$$\mathbf{A}\,\mathbf{B} = \left(\sum_k A_{jk}\,B_{km}\right) \tag{27}$$

Ist ein Operator $\mathbf{H}$ selbstadjungiert (hermitisch), d.h. $\mathbf{H}^\dagger = \mathbf{H}$ dann gilt

$$H_{jk} = \langle j|\mathbf{H}|k\rangle = \langle \mathbf{H}^\dagger j|k\rangle = \langle \mathbf{H}j|k\rangle = \langle k|\mathbf{H}|j\rangle^* = H_{kj}^* \tag{28}$$

Umgekehrt gilt: eine selbstadjungierte Matrix

$$H_{jk} = H_{kj}^* \leftrightarrow \mathbf{H}^\dagger = \mathbf{H} \tag{29}$$

ist ein selbstadjungierter (hermitischer) Operator.

Ist $\mathbf{U}$ unitär, d.h. $\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}$ dann sind Zeilen und Spalten orthonormal

$$\sum_k U^*_{kj}\, U_{km} = \delta_{jm} \qquad \sum_k U^*_{jk}\, U_{mk} = \delta_{jm} \text{ d.h. } U^*_{jk} = (\mathbf{U}^\dagger)_{kj} \tag{30}$$

Daraus folgt:

Das System $|f_k\rangle = \sum_j U_{ki} |f_j\rangle,\ k = 1, \ldots$ ist ein voS, wenn $|j\rangle,\ j = 1, \ldots$ ein voS ist

und umgekehrt sind zwei voS stets durch eine unitäre Matrix verknüpft.

$$\text{voS} \qquad \underbrace{\Longleftrightarrow}_{\text{unitäre Matrix}} \qquad \text{voS} \tag{31}$$

Operatoren

Ein **Projektionsoperator** $\mathbf{P}_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi|$ is die Abbildung auf ein Element des Hilbertraum:

$$P_\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle\,|\psi\rangle \tag{32}$$

Die Zauberformel (7) läst sich also auch schreiben als

$$\sum_j P_{f_j} = \mathbf{1} \tag{33}$$

Beschränktheit

Ein beschränkter Operator ist ein Operator **A**, für den es ein M gibt mit

$$||\mathbf{A}\psi\rangle| \leq M||\psi\rangle|\ \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{34}$$

Eigenwerte, Eigenvektoren und Spektraldarstellung

Es gilt der wichtige Satz:

Jeder beschränkte hermitische Operator $\mathbf{H}$ (d.h. insbesondere jede $N \times N$ Matrix) hat N linear unabhängige Eigenvektoren $|E_j\rangle$ mit reellen Eigenwerten E_j:

$$\mathbf{H}|E_j\rangle = E_j|E_j\rangle \tag{35}$$

Wir folgen hier der Diracschen Schreibweise Eigenvektoren zum Eigenwert E_i mit dem Ket $|E_i\rangle$ zu bezeichnen.

Die Eigenwerte bilden eine Basis des $\mathcal{H}$. Man zeigt leicht: Die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten $E_a \neq E_b$ sind orthogonal:

Bew.

$\langle E_a | \mathbf{H} E_b \rangle = E_b \langle E_a | E_b \rangle = \langle \mathbf{H} E_a | E_b \rangle = E_a \langle E_a | E_b \rangle$ Da $E_a \neq E_b$ nur gültig für $\langle E_a | E_b \rangle = 0$

Die Werte E_i können entartet sein, aber verschiedene Eigenvektoren zum gleichen E_a können nach Schmidt orthonormalisiert werden.

Also können wir stets davon ausgehen:

Die Eigenvektoren eines hermitischen (=selbstadjungierten) Operators bilden ein voS

Da die Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators ein voS bilden, gilt nach (7) die **Spektraldarstellung**:

$$\mathbf{H} = \sum_j |E_j\rangle\langle E_j| \tag{36}$$

Wir stellen die Eigenvektoren als Komponentenvektor in einem beliebigen voS $\{\cdots, |f_k\rangle \cdots\}$ dar $|E_j\rangle = \begin{pmatrix} U_{j1} \\ U_{j2} \\ \vdots \end{pmatrix}$ mit $U_{jk} = \langle f_k | E_j\rangle$

Daraus können wir die Matrix $\mathbf{U}$ konstruieren

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & \cdots \\ U_{21} & U_{22} & \ldots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} ; \quad U_{jk} = \langle f_k | E_j \rangle \tag{37}$$

Aus der Orthogonalität der Eigenvektoren $\langle E_j | E_k \rangle = \sum_n U^*_{jn} U_{kn} = \delta_{jk}$ folgt also

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{1}; \text{ d.h. } \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1} \tag{38}$$

Ferner gilt:

$$\begin{aligned}\langle E_j|\mathbf{H}E_k\rangle &= E_k\delta_{jk} = \sum_{m,n}\langle E_j|f_m\rangle\langle f_m|\mathbf{H}f_n\rangle\langle f_n|E_k\rangle && (39)\\ &= \sum_{m,n} U^*_{mj}H_{mn}U_{nk} = (\mathbf{U}^\dagger\mathbf{H}\mathbf{U})_{jk} && (40)\end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\left(\mathbf{U}^\dagger\,\mathbf{H}\mathbf{U}\right) = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E_2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & E_n \end{pmatrix} \equiv \mathbf{H}^D \qquad (41)$$

Operatoren

Wir hätten auch davon ausgehen können, dass jede hermitische Matrix $\mathbf{H}$ durch eine unitäre Matrix wie in (41) diagonalisiert werden kann und das Pferd so vom Schwanz aufzäumen können.

:-(

Viele Operatoren der real existierenden Quantenphysik sind nicht beschränkt.

z. B. Impulsoperator $i\hbar\partial_x$

Konsequenz: Kontinuierliches (oder kontinuierlicher Anteil) von Spektrum.Hat wichtige Konsequenzen für Stabilität.

Vorteil von Spin: Immer diskret!

Eigenwerte und die Determinante

Die Determinante $||\mathbf{A}||$ einer $N \times N$ Matrix $\mathbf{A}$ ist

$$||\mathbf{A}|| = \sum_{\sigma \in S_n} sgn(\sigma) A_{i\sigma(i)} \qquad \text{(Leibniz-Formel)}$$

wobei S_n die Gruppe $\sigma(1) \cdots \cdots \sigma(N)$ aller Permutationen der Zahlen $1, \cdots N$ (symmetrische Gruppe) ist und *sgn* das Signum der Permutation.

Bsp:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \quad S_2 = (1,2)\,(2,1); \rightarrow ||\mathbf{A}|| = A_{11}\,A_{22} - A_{12}\,A_{21}$$

$$||\mathbf{H}^D|| = \prod_j E_j \tag{42}$$

Einige Eigenschaften:

$||\mathbf{AB}|| = ||\mathbf{A}||\,||\mathbf{B}||$

hat viele Konsequenzen.

z.B. $||\mathbf{A}^{-1}|| = 1/||\mathbf{A}||$; d.h. wenn $||\mathbf{A}|| \neq 0 \leftrightarrow \exists\ \mathbf{A}^{-1}$

Es gilt für unitäre $\mathbf{U}$: $||\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}|| = 1, \Big|||\mathbf{U}||\Big| = 1$

$||\mathbf{H} - x\mathbf{1}|| = ||\mathbf{U}^\dagger(\mathbf{H} - x\mathbf{1})\mathbf{U}|| = ||\mathbf{H}^D - x\mathbf{1}|| = \prod_j (E_j - x)$

Aus der letzten Gleichung kann man die Eigenwerte bestimmen (algebraisch nur bis $N = 4$)

Eminent wichtiges Problem z.B. in theoretische Chemie (Anwendung für QC?).

Funktionen von linearen Operatoren

Man kann die Funktion eines linearen Operators und insbesondere einer Matrix über die Reihenentwicklung der Funktion definieren.

Sei $f(x) = \sum_n f_n x^n$ dann ist:

$$f(\mathbf{A}) \equiv \sum_n f_n bA^n \tag{43}$$

Das ist besonders einfach für die Exponentialfunktion.

$$e^{\alpha \boldsymbol{A}} = \mathbf{1} + \alpha \mathbf{A} + \frac{\alpha^2}{2!} \mathbf{A}\mathbf{A} + \cdots = \mathbf{1} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\alpha^k}{k!} \mathbf{A}^k \tag{44}$$

Es gilt insbedondere

$$\partial_t e^{\boldsymbol{i} t \boldsymbol{A}} = \boldsymbol{i}\mathbf{A}\, e^{\boldsymbol{i} t \boldsymbol{A}} \tag{45}$$

und umgekehrt:

Operatoren

wenn für einen zeitabhängigen Zustand gilt:

$$\boldsymbol{i}\partial_t|t\rangle = \mathbf{H}|t\rangle \tag{46}$$

so folgt

$$|t\rangle = e^{-i(t-t_0)\boldsymbol{H}}|t_0\rangle \tag{47}$$

Ist $\mathbf{U} = e^{it\boldsymbol{H}} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty}$, $\mathbf{H} = \mathbf{H}^\dagger$ (hermitisch), $t \in \mathcal{R}$, dann gilt:

$$\mathbf{U}^\dagger = e^{-it\boldsymbol{H}^\dagger} = \mathbf{U}^{-1} \tag{48}$$

, d.h. $\mathbf{U}$ ist unitär.

Die Funktion eines Operators angewandt auf einen Eigenvektor ist besonders einfach:

Sei $|a\rangle$ Eigenvektor zu $\mathbf{A}$ mit Eigenwert a: $\mathbf{A}|a\rangle = a|a\rangle$, $\mathbf{A}^2|a\rangle = a^2|a\rangle, \ldots$
Dann folgt aus der Reihenentwicklung der Funktion

$$f(\mathbf{A})|a\rangle = f(a)|a\rangle \tag{49}$$

Da für hermitische Operatoren die Spektraldarstellung (36) gilt folgt allgemein:

$$f(\mathbf{H})|\psi\rangle = \sum_j f(E_j)|E_j\rangle\langle E_j|\psi\rangle \tag{50}$$

Aber Vorsicht: Eine schöne Eigenschaft der Exponentialfunktion geht bei Operatoren als Argumnte verloren:
Nur wenn $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{A}\,\mathbf{B} - \mathbf{B}\,\mathbf{A} = 0$ dann $e^{\boldsymbol{A}}\, e^{\boldsymbol{B}} = e^{\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}}$

Die Spur (Trace)

Die Spur eines linearen Operators **A** is ist die Summe über die Diagonalelemente seiner Matrix (A_{ik})

$$Tr\mathbf{A} = \sum_i A_{jj} = \sum_j \langle f_j | \mathbf{A} f_j \rangle \tag{51}$$

Bei einem allgemeinen Operator muss man also ein bestimmtes voS wählen, allerdings zeigen wir unten, dass die Spur **nicht von der Wahl des voS** abhängt.

Doch zunächst: Wichtige Eigenschaft der Spur:

$$Tr\Big(\mathbf{A}\,\mathbf{B}\Big) = Tr\Big(\mathbf{B}\,\mathbf{A}\Big) \tag{52}$$

$$\begin{aligned} Tr\Big(\mathbf{A}\,\mathbf{B}\Big) &= \sum_{jk} \langle f_j | \mathbf{A} f_k \rangle \langle k | \mathbf{B} f_j \rangle = \sum_{ik} A_{jk}\, B_{kj} = \sum_{jk} B_{kj}\, A_{jk} \\ &= \mathrm{Tr}\Big(\mathbf{B}\,\mathbf{A}\Big) \end{aligned}$$

Daraus folgt sofort die zyklische Vertauschbarkeit der Spur:

$$\mathrm{Tr}\Big(\mathbf{A}\,\mathbf{B}\,\mathbf{C}\Big) = \mathrm{Tr}\Big(\mathbf{C}\,\mathbf{A}\,\mathbf{B}\Big) \tag{53}$$

Speziell für unitäre Operatoren gilt:

$$Tr\Big(\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U}\Big) = Tr\Big(\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\Big) = Tr\Big(\mathbf{A}\Big) \tag{54}$$

Damit ergibt sich wiederum sehr die Unabhängigkeit von der gewählten Basis. Zwei voS können stets durch eine unitäre Abbildung auseinander erzeugt werden

$$|\tilde{f}_j\rangle = |\mathbf{U}f_j\rangle \tag{55}$$

darus folgt:

$$\sum_j \langle\tilde{f}_j|\mathbf{A}\tilde{f}_j\rangle = \sum_j \langle f_j|\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U}f_j\rangle = \sum_j \langle f_j|\mathbf{A}f_j\rangle \tag{56}$$

Partialspur Ist $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ mit den v o S $|f_j\rangle_A, \ldots,$ und $|g_k\rangle_B, \ldots$ so ist die Partialspur eines Operators M der in $\mathcal{H}$ wirkt bezüglich des Produktes $\mathcal{H}_B$ definiert als

$$\mathrm{Tr}_B \mathbf{M} = \sum_k {}_B\langle g_k|\mathbf{M} g_k\rangle \tag{57}$$

$\mathrm{Tr}_B \mathbf{M}$ ist ein Operator in $\mathcal{H}_A$

Ist speziell $\mathbf{M} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$ dann ist $\mathrm{Tr}_B \mathbf{M} = \sum_k {}_B\langle g_k|\mathbf{B} g_k\rangle \mathbf{A}$

Skalarprodukt von Operatoren

Lineare Operatoren, für die die Spur existiert ($< \infty$) heissen trace-class Operatoren. Matrizen sind trace class Operatoren.

Über die Spur lässt sich auch ein Skalarprodukt von trace-class Operatoren definieren (Frobenius, Schur, Hilbert und Schmidt)

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle_{HS} = \operatorname{Tr}\left(\mathbf{A}^\dagger \, \mathbf{B} \right) \tag{58}$$

Diese Skalarprodukt hat alle Eigenschaften des Skalarproduktes.

insbesondere $\langle \mathbf{A} | \mathbf{A} \rangle_{HS} \geq 0, \; = 0$ nur für $\mathbf{A} = 0$.

Damit lässt sich jedem Raum von trace-class Operatoren eine Metrik zuordnen und er bildet damit wieder einen Hilbertraum.

Auf diesem lassen sich wiederum lineare Operatoren definieren, im QC **Superoperatoren** genannt