

Taschenbuch der Mathematik

I.N. Bronstein
K.A. Semendjajew
G. Musiol
H. Mühlig

Zusatzkapitel
zur Ausgabe mit CD-ROM
der 7., vollständig überarbeiteten und ergänzten Auflage

Verlag
Harri
Deutsch



Wissenschaftlicher Verlag Harri Deutsch GmbH
Gräfststraße 47
60486 Frankfurt am Main
verlag@harri-deutsch.de
www.harri-deutsch.de

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt.

Alle Rechte, auch die der Übersetzung, des Nachdrucks und der Vervielfältigung des Buches – oder von Teilen daraus – sind vorbehalten. Kein Teil des Werkes darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form (Fotokopie, Mikrofilm oder ein anderes Verfahren), auch nicht für Zwecke der Unterrichtsgestaltung, reproduziert oder unter Verwendung elektronischer Systeme verarbeitet werden.

Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

Der Inhalt des Werkes wurde sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Autoren und Verlag für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie für eventuelle Druckfehler keine Haftung.

©Wissenschaftlicher Verlag Harri Deutsch GmbH, Frankfurt am Main, 2008

Inhaltsverzeichnis

1	Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik	4
1.1	Mathematischer Rahmen	4
1.1.1	Hilbert-Raum	4
1.1.2	Lineare Operatoren	6
1.2	Physikalische Postulate	11
1.2.1	Zustände und Observable	11
1.2.2	Meßprozeß	13
1.2.3	Zeitentwicklung	15
1.2.4	Zusammengesetzte Quantensysteme	18
1.2.5	Offene Quantensysteme, Dekohärenz	21
2	Quantencomputer	23
2.1	Einleitung	23
2.2	Qubits	23
2.2.1	Pauli-Matrizen	23
2.2.2	Bloch-Darstellung	24
2.2.3	Quantenregister	24
2.3	Operationen mit Qubits	25
2.3.1	1-Qubit-Gatter	25
2.3.2	2-Qubit-Gatter	26
2.3.3	Quanten-Fourier-Transformation	28
2.4	Quanten-Algorithmen	28
2.4.1	Deutsch's Algorithmus	28
2.4.2	Grover-Suchalgorithmus	30
2.4.3	Shor-Algorithmus zur Primfaktorzerlegung	31
	Literaturverzeichnis	35
	Index	36

21 Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik

21.1 Mathematischer Rahmen

21.1.1 Hilbert-Raum

Der HILBERT-Raum ist ein zentrales Objekt in der mathematischen Beschreibung von Quantensystemen. Seine Vektoren repräsentieren reine Quantenzustände, während die physikalischen Observablen als lineare Operatoren im HILBERT-Raum beschrieben werden (s. 1.2.1).

Vektorraum

Gemäß 12.4.1 ist ein HILBERT-Raum \mathcal{H} als vollständiger, unitärer Vektorraum über dem Körper der komplexen Zahlen erklärt. Im folgenden werden einige seiner wichtigsten Eigenschaften rekapituliert, wobei die in der Quantenmechanik gebräuchliche DIRAC-Schreibweise eingeführt wird. Nach dieser werden Vektoren des HILBERT-Raumes mit dem Symbol $|\dots\rangle$ bezeichnet. Auf \mathcal{H} sind zwei Operationen, die Addition von Vektoren und die Multiplikation mit komplexen Zahlen, wie folgt definiert:

1. Zu je zwei Vektoren $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ gibt es genau einen Vektor $|\psi_1 + \psi_2\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$.
2. Zu jedem $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ und $\lambda \in \mathbb{C}$ gibt es genau einen Vektor $|\lambda\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, so daß folgende Vektorraumaxiome für alle $\lambda, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ und $|\psi\rangle, |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle \in \mathcal{H}$ erfüllt sind (vgl. 12.1.1, Begriff des Vektorraumes):
3. $(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) + |\psi_3\rangle = |\psi_1\rangle + (|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle)$.
4. Es existiert ein Vektor $0 \in \mathcal{H}$, so dass $|\psi\rangle + 0 = |\psi\rangle$.
5. Zu jedem Vektor $|\psi\rangle$ existiert ein Vektor $|- \psi\rangle$, so dass $|\psi\rangle + |- \psi\rangle = 0$.
6. $|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle$.
7. $1|\psi\rangle = |\psi\rangle, 0|\psi\rangle = 0$.
8. $\lambda_1(\lambda_2|\psi\rangle) = (\lambda_1\lambda_2)|\psi\rangle$.
9. $(\lambda_1 + \lambda_2)|\psi\rangle = \lambda_1|\psi\rangle + \lambda_2|\psi\rangle$.
10. $\lambda(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \lambda|\psi_1\rangle + \lambda|\psi_2\rangle$.

Die Eigenschaften 1. und 2. sind in der Quantenmechanik als *Superpositionsprinzip* bekannt: Jede Linearkombination von Quantenzuständen bildet erneut einen Quantenzustand.

Beispiel A: Teilchen im eindimensionalen Ortsraum

Der HILBERT-Raum eines Teilchens mit der Ortskoordinate $x \in \mathbb{R}$ ist der Raum $L^2(\mathbb{R})$ der quadratisch integrierbaren Funktionen auf \mathbb{R} (s. auch Beispiele in 12.4.2.2, Orthogonale Systeme). Die Funktionen $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ von $L^2(\mathbb{R})$ bezeichnet man in der Quantenmechanik häufig als *Wellenfunktionen*. Die komplexe Zahl $\psi(x)$ wird physikalisch als *Wahrscheinlichkeitsamplitude* für den Aufenthalt des Teilchens am Ort x interpretiert (s. 9.2.4.4, Statistische Interpretation der Wellenfunktion).

Beispiel B: Diskrete Freiheitsgrade

Bei Problemen mit endlich vielen diskreten Freiheitsgraden, z.B. der Beschreibung eines Atoms mit n verschiedenen Energieniveaus, wird \mathbb{C}^n als HILBERT-Raum verwendet. Seine Vektoren haben also die Form (c_1, \dots, c_n) , wobei c_i als *Wahrscheinlichkeitsamplitude* für die Besetzung des i -ten Niveaus interpretiert wird.

Skalarprodukt

Jedem Paar $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ von Vektoren ist eine Zahl $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}$ zugeordnet, genannt das *Skalarprodukt*, so daß folgende Axiome erfüllt sind:

$$\text{Positive Definitheit: } \langle\psi|\psi\rangle \geq 0 \text{ für alle } |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \text{ und } \langle\psi|\psi\rangle = 0 \text{ nur für } |\psi\rangle = 0. \quad (21.1)$$

$$\text{Linearität: } \langle\chi|\lambda\psi_1 + \mu\psi_2\rangle = \lambda\langle\chi|\psi_1\rangle + \mu\langle\chi|\psi_2\rangle \text{ für alle } |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H} \text{ und } \lambda, \mu \in \mathbb{C}. \quad (21.2)$$

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^* \text{ für alle } |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}. \quad (21.3)$$

Hieraus folgt insbesondere die Antilinearität im ersten Glied:¹

$$\langle\lambda\chi_1 + \mu\chi_2|\psi\rangle = \lambda^*\langle\chi_1|\psi\rangle + \mu^*\langle\chi_2|\psi\rangle \quad (21.4)$$

Beispiel A: Skalarprodukt von Zeilen- und Spaltenvektoren

Für $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ gilt das bekannte Skalarprodukt für Zeilen- und Spaltenvektor mittels der Koeffizienten der Vektoren:

$$\langle x|y\rangle = \sum_{i=1}^n x_i^* y_i, \quad |x\rangle, |y\rangle \in \mathbb{C}^n. \quad (21.5)$$

Beispiel B: Skalarprodukt von Elementen kontinuierlicher Hilbert-Räume

Im Fall $\mathcal{H} = L^2([a, b])$, also des Raumes der auf dem Intervall $[a, b]$ quadratintegriblen Funktionen, ist das Skalarprodukt durch

$$\langle f|g\rangle = \int_a^b f^*(x)g(x)dx, \quad |f\rangle, |g\rangle \in L^2([a, b]) \quad (21.6)$$

gegeben (s. 12.4.1, HILBERT-Raum).

Übergangswahrscheinlichkeit

Das Betragsquadrat $|\langle\chi|\psi\rangle|^2$ des Skalarprodukts zweier Vektoren $|\chi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ bezeichnet man als *Übergangswahrscheinlichkeit* von $|\psi\rangle$ nach $|\chi\rangle$ (s. auch Beispiel Meßprozeß bei reinen Zuständen in 1.2.2).

Norm

Die Norm eines Vektors $|\psi\rangle$ (s. auch 5.3.8, Vektorräume) ist definiert als

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}. \quad (21.7)$$

Physikalische Zustandsvektoren (s. 1.2.1) haben stets Norm 1.

Es gelten folgende Ungleichungen für alle $|\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$:

$$\text{Dreiecksungleichung: } \|\psi + \chi\| \leq \|\psi\| + \|\chi\| \quad (21.8)$$

$$\text{SCHWARZsche Ungleichung: } |\langle\psi|\chi\rangle| \leq \|\psi\| \|\chi\| \quad (21.9)$$

Dualraum, Bra- und Ket-Vektoren

Der *Dualraum* \mathcal{H}^* von \mathcal{H} ist der Raum aller stetigen linearen Funktionale von \mathcal{H} nach \mathbb{C} (s. 12.5.4). Ein Element $f \in \mathcal{H}^*$ des Dualraumes ordnet jedem Vektor $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$ eine komplexe Zahl $f(\chi) \in \mathbb{C}$ zu. Nach dem Satz von RIESZ über stetige lineare Funktionale im HILBERT-Raum (s. 12.5.4.2) gibt es zu jedem Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ genau ein $f \in \mathcal{H}^*$, so daß $f(\chi) = \langle\psi|\chi\rangle$ für alle $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt. In der DIRAC-Schreibweise wird dieses zu $|\psi\rangle$ duale Element als $\langle\psi|$ bezeichnet und *Bra-Vektor* genannt. Die Elemente $|\psi\rangle$ von \mathcal{H} heißen demgegenüber auch *Ket-Vektoren*.² In Matrixschreibweise werden Ket-Vektoren als Spaltenvektoren und

¹ Die komplexe Konjugation wird durch einen hochgestellten Stern * gekennzeichnet.

² Die Bezeichnungen „bra“ und „ket“ stammen vom englischen Wort „bracket“ (Klammer).

Bra-Vektoren als Zeilenvektoren notiert.

Die Tatsache, daß gemäß der DIRAC-Schreibweise das Skalarprodukt $\langle\psi|\chi\rangle$ als Wirkung eines Bra-Vektors $\langle\psi|$ auf einen Ket-Vektor $|\chi\rangle$ aufgefaßt wird, erscheint zunächst nicht weiter bemerkenswert, erlaubt jedoch durch die Möglichkeit der Verkettung von Bra- und Ket-Vektoren mit linearen Operatoren, wie z.B. in Ausdrücken der Form $\langle\psi|A|\psi\rangle$ (s. 1.1.2), ein hohes Maß an Flexibilität. Dies macht die DIRAC-Schreibweise sehr geeignet zur praktischen Durchführung von Berechnungen.

Beispiel: Bra- und Ket-Vektoren eines zweidimensionalen Hilbert-Raumes

Gegeben sei ein zweidimensionaler HILBERT-Raum \mathcal{H} mit Orthonormalbasis $|0\rangle$ und $|1\rangle$. Die Ket-Vektoren $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ sind von der Form: $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$, und werden in Matrixschreibweise als Spaltenvektor $\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$ notiert.

Die Bra-Vektoren $\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$ sind als lineare Abbildungen von \mathcal{H} nach \mathbb{C} durch die Bilder der beiden Basisvektoren $|0\rangle$ und $|1\rangle$ eindeutig bestimmt. Der zu einem Ket-Vektor $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ duale Bra-Vektor $\langle\psi|$ ist wie folgt definiert: $\langle\psi|$ bildet $|0\rangle$ auf $\langle\psi|0\rangle = c_0^*$ und $|1\rangle$ auf $\langle\psi|1\rangle = c_1^*$ ab. In Matrixschreibweise wird $\langle\psi|$ als Zeilenvektor $(c_0^* \ c_1^*)$ mit konjugiert komplexen Koeffizienten notiert. Ein beliebiger Ket-Vektor $|\chi\rangle = d_0|0\rangle + d_1|1\rangle$ wird durch $\langle\psi|$ auf das Skalarprodukt $\langle\psi|\chi\rangle = (c_0^* \ c_1^*) \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \end{pmatrix} = c_0^*d_0 + c_1^*d_1$ abgebildet.

21.1.2 Lineare Operatoren

Ein *linearer Operator* A auf \mathcal{H} ordnet jedem Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ einen Vektor $|A\psi\rangle = A|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ zu, so daß

$$A|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1A|\psi_1\rangle + \lambda_2A|\psi_2\rangle \quad (21.10)$$

für alle $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ und $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ gilt.

Dyadisches Produkt

Das *dyadische Produkt* (s. auch 4.1.4, Rechenoperationen mit Matrizen) $|\psi\rangle\langle\chi|$ eines (Ket-)Vektors $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ mit einem Bra-Vektor $\langle\chi| \in \mathcal{H}^*$ ist derjenige lineare Operator, der $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}$ auf $\lambda|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ mit $\lambda = \langle\chi|\psi_1\rangle \in \mathbb{C}$ abbildet.

Beispiel: Basisprojektion als dyadisches Produkt

Gegeben sei ein zweidimensionaler HILBERT-Raum mit Orthonormalbasis $|0\rangle$ und $|1\rangle$. Das dyadische Produkt $|0\rangle\langle 0|$ bildet einen beliebigen Vektor $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \in \mathcal{H}$ auf folgenden Vektor ab: $|0\rangle\langle 0|\psi\rangle = |0\rangle(c_0\langle 0|0\rangle + c_1\langle 0|1\rangle) = c_0|0\rangle$, also die Projektion von $|\psi\rangle$ auf den Zustand $|0\rangle$.

In Matrixschreibweise lauten die Basisvektoren $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, das dyadische Produkt $|0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ und die Projektion $|0\rangle\langle 0|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Matrizen

Sei $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$ ein endlichdimensionaler HILBERT-Raum mit den Basisvektoren $|1\rangle, \dots, |N\rangle$, welche der Orthonormalitätsbedingung $\langle n|m\rangle = \langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ genügen. Hierbei bezeichnet δ_{nm} das KRONECKER-Symbol, welches durch $\delta_{nm} = 1$ für $n = m$ und $\delta_{nm} = 0$ für $n \neq m$ definiert ist. Ein linearer Operator A ist dann durch die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix} = \sum_{m,n=1}^N A_{nm} |n\rangle\langle m| \quad (21.11)$$

mit den Matrixelementen

$$A_{nm} = \langle n|A|m\rangle \in \mathbb{C} \quad (21.12)$$

eindeutig festgelegt. Insbesondere gilt für den Einheitsoperator:

$$\mathbb{1} = \sum_{n=1}^N |n\rangle\langle n|. \quad (21.13)$$

Die Regel für die Multiplikation zweier Matrizen A und B folgt einfach durch *Einfügen der Eins* (einer auch anderweitig häufig verwendeten Rechenoperation):

$$\langle n|AB|m\rangle = \langle n|A \mathbb{1} B|m\rangle = \sum_{k=1}^N \langle n|A|k\rangle \langle k|B|m\rangle. \quad (21.14)$$

Adjungierter Operator

Der zu A *adjungierte Operator* wird mit A^\dagger bezeichnet und ist durch

$$\langle \chi|A|\psi\rangle = \langle \psi|A^\dagger|\chi\rangle^* \quad (21.15)$$

oder äquivalent

$$\langle \psi|A^\dagger = \langle A\psi| \quad (21.16)$$

für alle $|\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$ definiert. Für die Matrixelemente von A^\dagger gilt:

$$A_{nm}^\dagger = A_{mn}^* \quad (21.17)$$

Ferner gelten folgende Beziehungen:

$$(A^\dagger)^\dagger = A, (\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger, (A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger, (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad (21.18)$$

für lineare Operatoren A und B und $\lambda \in \mathbb{C}$.

Selbstadjungierter Operator

Ein linearer Operator A heißt *selbstadjungiert* oder *hermitesch*³, falls gilt

$$A = A^\dagger. \quad (21.19)$$

Genau dann gilt auch

$$\langle \psi|A|\psi\rangle \in \mathbb{R} \quad (21.20)$$

für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

Positiver Operator

Ein linearer Operator A heißt *positiv* (oder *positiv semidefinit*), kurz $A \geq 0$, falls gilt

$$\langle \psi|A|\psi\rangle \geq 0 \quad (21.21)$$

für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Ein positiver Operator ist stets selbstadjungiert.

³ In unendlichdimensionalen HILBERT-Räumen können sich die Begriffe selbstadjungiert und hermitesch im Definitionsbereich von A bzw. A^\dagger unterscheiden [1].

Projektor

Ein *Projektor* $P = P^\dagger$ ist ein selbstadjungierter Operator, der idempotent ist, für den also gilt:

$$P^2 = P. \quad (21.22)$$

Beispiel: Projektor auf einen eindimensionalen Unterraum

Für einen normierten Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ heißt das dyadische Produkt

$$P = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (21.23)$$

Projektor auf den Vektor $|\psi\rangle$ (genauer: auf den durch $|\psi\rangle$ aufgespannten Unterraum).

Unitärer Operator

Ein linearer Operator U heißt *unitär*, falls gilt

$$UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}. \quad (21.24)$$

Wignersches Theorem: Unitäre Operatoren U sind genau diejenigen linearen Operatoren, die das Skalarprodukt erhalten, also $\langle\chi'|\psi'\rangle = \langle\chi|\psi\rangle$ für alle $|\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$, $|\chi'\rangle = U|\chi\rangle$ und $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$.

Hinweis: Insbesondere sind unitäre Operatoren normerhaltend: $\|U\psi\| = \|\psi\|$ für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

Spur

Ist $\{|n\rangle, n = 1, \dots, N\}$ eine Orthonormalbasis von \mathcal{H} , so ist durch

$$\text{Sp}A = \sum_{n=1}^N \langle n|A|n\rangle \quad (21.25)$$

die (von der Wahl der Basis unabhängige) *Spur* des linearen Operators A auf \mathcal{H} definiert. Es gilt

$$\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA) \quad \text{und} \quad (21.26)$$

$$\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(BCA) = \text{Tr}(CAB) \quad (21.27)$$

für alle linearen Operatoren A, B und C (*zyklische Invarianz der Spur*). Ist einer der Operatoren ein Projektor auf einen Vektor $|\psi\rangle$, so gilt insbesondere

$$\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|A) = \langle\psi|A|\psi\rangle. \quad (21.28)$$

Spektralzerlegung

Jeder selbstadjungierte Operator $A = A^\dagger$ besitzt eine *Spektralzerlegung* [1]. Im endlichdimensionalen Fall lautet sie:

$$A = \sum_i \lambda_i P_i, \quad (21.29)$$

wobei $\lambda_i \in \mathbb{R}$ die Eigenwerte, und P_i die Projektoren auf die dazugehörigen Eigenräume von A bezeichnen. Es gilt:

$$AP_i = \lambda_i P_i, \quad P_i P_j = \delta_{ij} P_i, \quad \text{und} \quad \sum_i P_i = \mathbb{1}. \quad (21.30)$$

Beispiel: Spektralzerlegung eines Hamilton-Operators für ein Drei-Niveau-System

Ein Quantensystem besitze drei Energieniveaus der Energien $E_1 = 0$, $E_2 = \hbar\omega$ und $E_3 = 2\hbar\omega$, wobei ω eine für dieses System charakteristische Kreisfrequenz und \hbar das PLANCKSche Wirkungsquantum ist. Die zu den Energien gehörigen Zustandsvektoren (s. 1.2.1) $|E_1\rangle$, $|E_2\rangle$ und $|E_3\rangle$ bilden eine Orthonormalbasis des HILBERT-Raumes \mathcal{H} . Der Projektor auf den i -ten Energieeigenzustand ist folglich gegeben durch $P_i = |E_i\rangle\langle E_i|$. Die Spektraldarstellung des Energie- bzw. HAMILTON-Operators (s. 1.2.2, Beispiel B) lautet damit:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^3 E_i P_i = E_1 |E_1\rangle\langle E_1| + E_2 |E_2\rangle\langle E_2| + E_3 |E_3\rangle\langle E_3| \\ &= \hbar\omega |E_2\rangle\langle E_2| + 2\hbar\omega |E_3\rangle\langle E_3|. \end{aligned} \quad (21.31)$$

Die Darstellung der Eigenvektoren als Spaltenvektoren $|E_1\rangle = (1, 0, 0)^T$, $|E_2\rangle = (0, 1, 0)^T$ bzw. $|E_3\rangle = (0, 0, 1)^T$ ergibt für die Projektoren P_i

$$P_1 = |E_1\rangle\langle E_1| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (21.32)$$

und analog

$$P_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{sowie} \quad P_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (21.33)$$

Für die Spektralzerlegung von H in Matrixdarstellung bezüglich der Orthonormalbasis der Eigenvektoren $\{|E_i\rangle\}$ folgt schließlich dessen Diagonalform:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hbar\omega & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar\omega \end{pmatrix}. \quad (21.34)$$

Tensorprodukt

Das Tensorprodukt ist eine Methode, aus zwei HILBERT-Räumen \mathcal{H}_A und \mathcal{H}_B einen größeren HILBERT-Raum $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ zu konstruieren. In der Quantenmechanik wird es verwendet, wenn aus mehreren Quantenobjekten ein zusammengesetztes Gesamtobjekt betrachtet wird (s. 1.2.4).

Definition Sind $\{|m\rangle\}$ und $\{|n\rangle\}$ Orthonormalbasen von \mathcal{H}_A und \mathcal{H}_B , so bildet $\{|m\rangle \otimes |n\rangle\}$ eine Orthonormalbasis von $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Im Fall endlicher Dimensionen ist also die Dimension von $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ das Produkt der Dimensionen von \mathcal{H}_A und \mathcal{H}_B . Für beliebige Vektoren $|u\rangle, |u_1\rangle, |u_2\rangle \in \mathcal{H}_A$, $|v\rangle, |v_1\rangle, |v_2\rangle \in \mathcal{H}_B$ und $\lambda \in \mathbb{C}$ gilt definitionsgemäß:

$$|\lambda u\rangle \otimes |v\rangle = |u\rangle \otimes |\lambda v\rangle = \lambda |u\rangle \otimes |v\rangle \quad (21.35)$$

$$|u_1 + u_2\rangle \otimes |v\rangle = |u_1\rangle \otimes |v\rangle + |u_2\rangle \otimes |v\rangle \quad (21.36)$$

$$|u\rangle \otimes |v_1 + v_2\rangle = |u\rangle \otimes |v_1\rangle + |u\rangle \otimes |v_2\rangle \quad (21.37)$$

Den zu $|u\rangle \otimes |v\rangle$ konjugierten Bra-Vektor schreibt man als $\langle u| \otimes \langle v|$.

Hinweis: Man beachte, daß das Tensorproduktsymbol \otimes aus Bequemlichkeit nicht immer explizit angegeben wird. Statt $|u\rangle \otimes |v\rangle$ schreibt man dann $|u, v\rangle$ oder $|uv\rangle$.

Verschränkung

Falls ein Vektor $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ als Produkt

$$|\Psi\rangle = |u\rangle \otimes |v\rangle \quad (21.38)$$

zweier Vektoren $|u\rangle \in \mathcal{H}_A$ und $|v\rangle \in \mathcal{H}_B$ geschrieben werden kann, heißt $|\Psi\rangle$ *Produktvektor*. Ist dies nicht möglich, dann heißt $|\Psi\rangle$ *verschränkt*.

Beispiel: Verschränkung zwischen zwei zweidimensionalen Hilbert-Räumen

Gegeben seien zwei zweidimensionale HILBERT-Räume mit Basis $\{|0_A\rangle, |1_A\rangle\}$ und $\{|0_B\rangle, |1_B\rangle\}$. Der Vektor

$$|\Psi\rangle = |0_A\rangle \otimes |0_B\rangle + |1_A\rangle \otimes |1_B\rangle \quad (21.39)$$

ist verschränkt, während

$$|0_A\rangle \otimes |0_B\rangle + |0_A\rangle \otimes |1_B\rangle + |1_A\rangle \otimes |0_B\rangle + |1_A\rangle \otimes |1_B\rangle = |0_A + 1_A\rangle \otimes |0_B + 1_B\rangle \quad (21.40)$$

ein Produktvektor ist. In Kurzschreibweise lauten (1.39) und (1.40) wie folgt:

$$|\Psi\rangle = |00 + 11\rangle \quad \text{und} \quad |00 + 01 + 10 + 11\rangle = |0 + 1, 0 + 1\rangle. \quad (21.41)$$

Tensorprodukt von Operatoren

Sind A und B lineare Operatoren auf \mathcal{H}_A und \mathcal{H}_B , so bezeichnet $A \otimes B$ einen linearen Operator auf $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, der durch

$$(A \otimes B) (|n\rangle \otimes |m\rangle) = A|n\rangle \otimes B|m\rangle \quad (21.42)$$

für $|n\rangle \in \mathcal{H}_A$ und $|m\rangle \in \mathcal{H}_B$ definiert ist.

Das Tensorprodukt von Operatoren wird gewöhnlich mit dem gleichen Symbol \otimes wie das Tensorprodukt von HILBERT-Räumen notiert.

Beispiel A: Einheitsoperator

Der Einheitsoperator in $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ ist demnach durch das Tensorprodukt der Einheitsoperatoren auf \mathcal{H}_A bzw. \mathcal{H}_B gegeben:

$$\mathbb{1}_{AB} = \mathbb{1}_A \otimes \mathbb{1}_B. \quad (21.43)$$

Beispiel B: Operator auf einem Teilsystem

Durch einen Operator A , der auf Vektoren in \mathcal{H}_A wirkt, ist durch $A \otimes \mathbb{1}_B$ gleichzeitig ein Operator auf $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ gegeben.

Partielle Spur

Aus einem linearen Operator C auf $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ ergibt sich durch partielle Spurbildung über \mathcal{H}_A ein linearer Operator $\text{Sp}_A C$ auf \mathcal{H}_B . Bezeichnet $\{|n\rangle, n = 1, \dots, N\}$ eine Orthonormalbasis von \mathcal{H}_A , so ist $\text{Sp}_A C$ eindeutig (und unabhängig von der Wahl der Basis) durch folgende Matrixelemente bzgl. beliebigen $|m\rangle, |k\rangle \in \mathcal{H}_B$ definiert:

$$\langle m | \text{Sp}_A C | k \rangle = \sum_{n=1}^N \langle n | \otimes \langle m | C | n \rangle \otimes | k \rangle. \quad (21.44)$$

In analoger Weise wird die partielle Spur über \mathcal{H}_B definiert, die einen Operator $\text{Sp}_B C$ auf \mathcal{H}_A liefert. Für die partielle Spur des Tensorprodukts zweier Operatoren folgt daraus:

$$\text{Sp}_A (A \otimes B) = (\text{Sp}_A A) B, \quad \text{Sp}_B (A \otimes B) = (\text{Sp}_B B) A, \quad (21.45)$$

wobei $\text{Sp}_A, \text{Sp}_B \in \mathbb{C}$ die übliche Spur über \mathcal{H}_A bzw. \mathcal{H}_B nach (1.25) bezeichnet.

21.2 Physikalische Postulate

21.2.1 Zustände und Observable

Observable

Jedes physikalische Experiment kann im Endeffekt als Messung einer bestimmten Größe aufgefaßt werden, die *Observable* genannt wird. In der Quantentheorie sind die Observablen durch selbstadjungierte Operatoren $A = A^\dagger$ auf dem HILBERT-Raum \mathcal{H} gegeben.

Die möglichen Ergebnisse einer Messung sind die *Eigenwerte* (bzw. Elemente des Spektrums) von A . Wie in 1.2.2 gezeigt wird, kann die Quantentheorie die Meßergebnisse zweier nicht kommutierender Observabler A und B (d.h. $AB \neq BA$) niemals beide mit Sicherheit vorhersagen. Stattdessen liefert sie eine statistische Verteilung von Meßwerten, die mit dem Experiment verglichen werden kann.

Beispiel A: Spin 1/2

Elektronen sind Elementarteilchen mit Spin 1/2, d.h. eine Messung des Spins entlang einer beliebigen Achse \vec{r} liefert immer die Messwerte $+\hbar/2$ oder $-\hbar/2$, wobei \hbar das PLANCKSche Wirkungsquantum bezeichnet. In einer Basis aus Eigenvektoren hat der entsprechende Operator damit die Form

$$s_{\vec{r}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (21.46)$$

Beispiel B: Ort und Impuls

Die Orts- und Impulsobservablen X und P eines Teilchens im eindimensionalen Raum wirken auf eine Wellenfunktion $\psi(x)$ wie folgt:

$$X : \psi \rightarrow x\psi, \quad P : \psi \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx}$$

Es sind unbeschränkte Operatoren (s. 12.6.2), die nicht auf dem ganzen HILBERT-Raum $L_2(\mathbb{R})$ definiert sind. Ihr Spektrum ist rein kontinuierlich und gleich \mathbb{R} .

Definition und Erwartungswert des Zustandes

Definiton Ein quantenmechanischer *Zustand* ist ein positiver (insbesondere also selbstadjungierter) Operator $\rho = \rho^\dagger$ auf \mathcal{H} mit Spur 1, d.h.,

$$\rho \geq 0 \quad \text{und} \quad \text{Sp}\rho = 1. \quad (21.47)$$

Der Zustandsoperator ρ ist auch unter dem Namen *Dichteoperator* oder *statistischer Operator* bekannt.

Erwartungswert Alternativ kann ein quantenmechanischer Zustand auch als lineare Abbildung definiert werden, die jeder Observablen A eine reelle Zahl $\langle A \rangle \in \mathbb{R}$ zuordnet. Nach dem RIESZschen Darstellungssatz [1] ist eine solche Abbildung stets von der Form $\langle A \rangle = \text{Sp}(\rho A)$ mit eindeutig bestimmtem linearen Operator ρ . Die Bedingungen $\rho \geq 0$ und $\text{Sp}\rho = 1$ folgen dann aus elementaren Gesetzen der Wahrscheinlichkeitstheorie, um $\langle A \rangle$ in konsistenter Weise als statistischen Mittelwert über alle möglichen Meßergebnisse (Eigenwerte von A) auffassen zu können. $\langle A \rangle = \text{Sp}(\rho A)$ heißt deshalb *Erwartungswert* der Observablen A bezüglich des Zustands ρ .

Reiner Zustand

Ein *reiner Zustand* ist gleichzeitig Dichteoperator und Projektor, erfüllt also neben (1.47) die Bedingung $\rho^2 = \rho$. Ein solcher Zustand ist stets von der Form

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (21.48)$$

für ein $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ mit $\|\psi\| = 1$.

Hinweis: Der Einfachheit halber wird häufig $|\psi\rangle$ anstelle von $|\psi\rangle\langle\psi|$ als reiner Zustand oder *Zustandsvektor* bezeichnet. Man beachte jedoch, daß zwei Vektoren $|\psi\rangle, |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$, die sich um einen komplexen Phasenfaktor unterscheiden (d.h. $|\psi'\rangle = e^{i\phi}|\psi\rangle$ mit $\phi \in \mathbb{R}$) denselben Zustand ρ repräsentieren.

Beispiel: Reiner Spinzustand eines Elektrons

Ein Elektron befinde sich im Zustand $|\uparrow\rangle$, der bei einer Spinmessung entlang der z -Achse das Meßergebnis $+\hbar/2$ liefert. Damit folgt für den Zustandsvektor und Dichteoperator

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \rho = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (21.49)$$

wobei für die Matrixdarstellung die Basis der Spin-Eigenzustände in z -Richtung gewählt wurde. Der Zustand $|\rightarrow\rangle$ liefert das Meßergebnis $+\hbar/2$ bei einer Messung der x -Komponente des Spins. In z -Basis hat er die Form

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (21.50)$$

womit der Dichteoperator die Form

$$\rho = |\rightarrow\rangle\langle\rightarrow| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (21.51)$$

annimmt.

Gemischter Zustand

Ein nicht reiner Zustand $\rho \neq \rho^2$ heißt *gemischter Zustand*. Für ihn gilt: $\text{Sp}\rho^2 < \text{Sp}\rho$. Ein gemischter Zustand kann stets als konvexe Summe reiner Zustände geschrieben werden:

$$\rho = \sum_{i=1}^N p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (21.52)$$

wobei $\|\psi_i\| = 1$, $p_i > 0$, und $\sum p_i = 1$ und $N > 1$ mindestens so groß wie der Rang von ρ (d.h. die Zahl der Eigenwerte von ρ) gewählt werden muß. Der Zustand ρ kann also als statistisches Gemisch interpretiert werden, in welchem mit der Wahrscheinlichkeit p_i der reine Zustand $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ vorliegt. Diese Interpretation ist aber nicht eindeutig, da zu jedem ρ unendlich viele verschiedene Darstellungen als konvexe Summe reiner Zustände existieren.

Beispiel A: Thermisches Gleichgewicht

Ein typischer gemischter Zustand ist der *thermische Zustand* ρ_{th} . Im thermodynamischen Gleichgewicht nimmt ein Quantensystem mit diskreten Energieniveaus E_n den Zustand

$$\rho_{th} = \sum_n \frac{e^{-E_n/(k_B T)}}{Z} |E_n\rangle\langle E_n| \quad (21.53)$$

an, wobei T die Temperatur, k_B die BOLTZMANN-Konstante, $Z = \sum_n \exp[-E_n/(k_B T)]$ die Zustandssumme und $|E_n\rangle$ den Eigenzustand des Energieoperators (s. unten) zum Eigenwert E_n bezeichnet.

Beispiel B: Vollständig gemischter Zustand

Der *vollständig gemischte Zustand* eines HILBERT-Raumes $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ ist durch $\rho = \mathbb{1}/n$ beschrieben. Eine Darstellung als konvexe Summe ist hier durch jede Orthonormalbasis mit Gewichten $p_i = 1/n$ gegeben. Dieser Zustand liefert jedes mögliche Meßergebnis mit gleicher Wahrscheinlichkeit (s. 1.2.2).

21.2.2 Meßprozeß

Wie in 1.2.1 beschrieben, sind Quantenzustände auf formale Weise als Operatoren in einem abstrakten HILBERT-Raum definiert. Anders als z.B. in der klassischen Mechanik, wo der Zustand des Systems durch Festlegung des Ortes und des Impulses aller beteiligten Teilchen gegeben ist, entziehen sich die quantenmechanischen Zustände zunächst einer intuitiven und unmittelbaren physikalischen Interpretation.

Es muß daher explizit definiert werden, auf welche Weise sich die in den Quantenzuständen enthaltene Information in eindeutige und experimentell überprüfbare Begriffe (wie z.B.: „das Elektron hat eine Energie von 4.5 eV“) übersetzen lassen. Dies geschieht durch den Prozeß der Messung, dem daher in der Quantenmechanik eine besondere Bedeutung zukommt, und der durch die folgenden Postulate beschrieben wird.

Postulate für den Meßprozeß

Sei $A = A^\dagger$ eine Observable mit Spektralzerlegung $A = \sum_i a_i P_i$.⁴ Eine Messung von A an einem Quantenobjekt, das sich im Zustand ρ befindet, wird in der Quantenmechanik wie folgt beschrieben:

1. Mögliche Meßergebnisse: Das Ergebnis einer Messung von A ist einer der *Eigenwerte* a_i von A .
2. Wahrscheinlichkeitsverteilung: Die Wahrscheinlichkeit, das Meßergebnis a_i zu erhalten, beträgt

$$p_i = \text{Sp}(P_i \rho), \quad (21.54)$$

wobei P_i den Projektor auf den zu a_i gehörigen Eigenraum von A bezeichnet.

3. Zustandsreduktion: Nach einer Messung mit Ergebnis a_i befindet sich das System im Zustand

$$\rho_i = P_i \rho P_i / p_i. \quad (21.55)$$

Beispiel A: Wahrscheinlichkeit eines Meßergebnisses und Zustandsreduktion nach der Messung

Ein Quantensystem mit Spin 1 befinde sich bezüglich der Messung der z -Komponente des Spins S_z mit den möglichen Meßwerten $+\hbar$, $0\hbar$ und $-\hbar$ und den dazugehörigen Zustandsvektoren $|+1\rangle = (1, 0, 0)^T$, $|0\rangle = (0, 1, 0)^T$ bzw. $|-1\rangle = (0, 0, 1)^T$ in dem Zustand

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & -1/4 \\ 0 & -1/4 & 1/4 \end{pmatrix}. \quad (21.56)$$

Eine Messung der z -Komponente des Spins liefere das Messergebnis $-\hbar$ „Spin nach unten“. Der Projektor auf den dazugehörigen Eigenzustand $|-1\rangle$ lautet

$$P_{-1} = |-1\rangle \langle -1| = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (21.57)$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß dieses Meßergebnis auftritt, ist laut Postulat 2 durch

$$\begin{aligned} p_{-1} &= \text{Tr}(P_{-1} \rho) = \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & -1/4 \\ 0 & -1/4 & 1/4 \end{pmatrix} \right] \\ &= \text{Tr} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/4 & 1/4 \end{pmatrix} = 0 + 0 + 1/4 = 1/4 \end{aligned} \quad (21.58)$$

⁴ Zur Verallgemeinerung des Meßprozesses auf Observable mit kontinuierlichem Spektrum s. z.B. [2].

gegeben. Der Zustand nach der Messung, ρ_{-1} , wird durch Postulat 3 wie folgt berechnet:

$$\rho_{-1} = P_{-1}\rho P_{-1}/p_{-1} = 4 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & -1/4 \\ 0 & -1/4 & 1/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (21.59)$$

Nach der Messung befindet sich das Quantensystem im Zustand $\rho_{-1} = |-1\rangle\langle -1|$, dem (reinen) Eigenzustand zum gemessenen Meßwert $-1\hbar$.

Beispiel B: Meßprozeß bei reinen Zuständen

Ein Quantensystem mit N diskreten Energieniveaus befinde sich in einem reinen Zustand mit dem allgemeinen Zustandsvektor

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |E_n\rangle, \quad (21.60)$$

wobei die Vektoren $\{|E_n\rangle\}$ ein orthonormales System aus Eigenvektoren des HAMILTON-Operators (Energieoperatoren) H zu den jeweiligen Eigenwerten E_n bilden. Bezüglich dieser Basis nimmt der Energieoperator eine Diagonalf orm mit $H = \text{Diag}(E_1, E_2, \dots, E_N)$ an. Die Wahrscheinlichkeit p_n , Energie E_n zu messen beträgt:

$$p_n = \text{Tr}(|E_n\rangle\langle E_n|\psi\rangle\langle\psi|) = \langle E_n|\psi\rangle\langle\psi|E_n\rangle = |\langle E_n|\psi\rangle|^2 = |c_n|^2. \quad (21.61)$$

Die Koeffizienten c_n nennt man daher auch *Wahrscheinlichkeitsamplituden*, und deren Betragsquadrat $p_n = |c_n|^2$ *Übergangswahrscheinlichkeiten*.

Nach erfolgter Messung mit dem Meßergebnis E_n befindet sich das System weiterhin in einem reinen Zustand, jedoch mit dem Zustandsvektor $|\psi'\rangle = |E_n\rangle$.

Folgerungen aus den Postulaten

1. Wiederholte Messung: Die Zustandsreduktion gemäß Postulat 3 stellt sicher, daß zwei unmittelbar aufeinanderfolgende Messungen derselben Observablen stets dasselbe Meßergebnis liefern, also

$$\text{Sp}(P_i\rho_i) = 1. \quad (21.62)$$

2. Erwartungswert und Standardabweichung : Aus Postulat 1 und 2 ergeben sich Erwartungswert $\langle A \rangle$ und Standardabweichung $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$ einer Messung von A aus

$$\langle A \rangle = \text{Sp}(A\rho), \quad \langle A^2 \rangle = \text{Sp}(A^2\rho). \quad (21.63)$$

3. Eigenzustände: Die Messung von A im Zustand ρ liefert genau dann mit Sicherheit (also $p_i = 1$) das Ergebnis a_i , falls

$$A\rho = a_i\rho. \quad (21.64)$$

In diesem Fall heißt ρ *Eigenzustand* von A zum *Eigenwert* a_i . Insbesondere ist der reduzierte Zustand ρ_i stets ein Eigenzustand zum gemessenen Eigenwert (vgl. Folgerung 1).

4. Unschärferelation: Seien A und B zwei Observable und $C = i[A, B]$, wobei $[A, B] = AB - BA$ den Kommutator von A und B bezeichnet. Für das Produkt der Standardabweichungen von A und B gilt:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle C \rangle|. \quad (21.65)$$

Beispiel A: Statistik der Spinnmessung

Eine Messung der Spinkomponente eines Spin- $1/2$ -Teilchens ergebe den Meßwert $+\hbar/2$. Das Teilchen befindet sich deshalb nach der Messung im Zustand $|\uparrow\rangle$ (Postulat 3). Eine wiederholte Messung der z -Komponente liefert gemäß Folgerung 1 denselben Meßwert mit der Wahrscheinlichkeit 1 und der Standardabweichung 0 und ist somit scharf. Darauf folgt eine Messung der Spinkomponente in x -Richtung mit der dazugehörigen Observablen s_x . In Matrixdarstellung bezüglich der z -Basis haben diese Objekte die Form

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad s_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (21.66)$$

Damit ergeben sich Erwartungswert und Standardabweichung der s_x -Messung wie folgt:

$$\langle s_x \rangle = \langle \uparrow | s_x | \uparrow \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \quad (21.67)$$

$$\langle s_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \langle \mathbb{1} \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \langle \uparrow | \uparrow \rangle = \frac{\hbar^2}{4}, \quad (21.68)$$

$$\Delta s_x = \sqrt{\langle s_x^2 \rangle - \langle s_x \rangle^2} = \frac{\hbar}{2}. \quad (21.69)$$

Die Messung der x -Komponente des Spins ist also nicht scharf.

Beispiel B: Orts-Impuls-Unschärfe

Der Kommutator der Orts- und Impulsobservablen eines Teilchens im eindimensionalen Ortsraum (s. Beispiel B in 1.2.1) lautet:

$$[P, X] = \frac{\hbar}{i} \mathbb{1}. \quad (21.70)$$

Die nach W. HEISENBERG benannte Unschärferelation berechnet sich damit gemäß Folgerung 4 zu:

$$\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (21.71)$$

21.2.3 Zeitentwicklung

Die zeitliche Entwicklung $\rho(t)$ eines abgeschlossenen Quantensystems wird durch die Energieobservable $H = H^\dagger$, auch HAMILTON-Operator genannt, wie folgt gesteuert:

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho(t)] \quad (\text{VON-NEUMANN-Gleichung}). \quad (21.72)$$

Ist $\rho(t)$ ein Eigenzustand von $H(t)$, also ein Zustand mit scharfer Energie, so folgt hieraus: $d\rho/dt = 0$. Falls H nicht von der Zeit abhängt, bleibt in diesem Fall auch ρ zeitlich konstant.

Beispiel: Von-Neumann-Gleichung für einen Spin im Magnetfeld

Ein ruhendes Teilchen mit Spin $1/2$ befinde sich in einem Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$. Die Wechselwirkung eines Spins mit einem Magnetfeld erfolgt über das vom Spin erzeugte magnetische Moment $\vec{\mu} = \mu\vec{s}$. Die Energie eines Spins im gegebenen Magnetfeld ist folglich

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu\vec{s} \cdot \vec{B} = -\mu s_z B = -\frac{\mu\hbar B}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (21.73)$$

wobei der letzte Ausdruck in Matrixdarstellung bezüglich der s_z -Eigenbasis erfolgte. Für ein konstantes Magnetfeld ist der HAMILTON-Operator H damit zeitunabhängig. Die Matrixdarstellung des Zustandes $\rho(t)$ (ebenfalls bezüglich der s_z -Eigenbasis)

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) \end{pmatrix} \quad (21.74)$$

liefert zusammen mit dem Ausdruck für H , eingesetzt in die VON-NEUMANN-Gleichung

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{i\mu B}{\hbar}[s_z, \rho(t)], \quad (21.75)$$

das folgende System von Differentialgleichungen für die Komponenten von $\rho(t)$:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{11}(t) &= 0, & \dot{\rho}_{12}(t) &= i\mu B\rho_{12}(t), \\ \dot{\rho}_{21}(t) &= -i\mu B\rho_{12}(t), & \dot{\rho}_{22}(t) &= 0. \end{aligned} \quad (21.76)$$

Zusammen mit den Anfangsbedingungen $\rho(0)$ ergeben die Lösungen (s. 9.1.2, Systeme von Differentialgleichungen) die Zeitentwicklung des Systems:

$$\begin{aligned} \rho_{11}(t) &= \rho_{11}(0), & \rho_{12}(t) &= e^{i\mu Bt}\rho_{12}(0), \\ \rho_{21}(t) &= e^{-i\mu Bt}\rho_{12}(0), & \rho_{22}(t) &= \rho_{22}(0). \end{aligned} \quad (21.77)$$

Schrödinger-Gleichung

Falls $\rho(t_0)$ zum Zeitpunkt t_0 ein reiner Zustand ist, also $\rho(t_0) = |\psi(t_0)\rangle\langle\psi(t_0)|$ für ein $|\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{H}$, so bleibt $\rho(t)$ gemäß Zeitentwicklungsgleichung (1.72) für alle Zeiten $t > t_0$ ein reiner Zustand $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$, dessen Repräsentant $|\psi(t)\rangle$ folgende äquivalente Gleichung erfüllt:

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle \quad (21.78)$$

Sie ist unter dem Namen SCHRÖDINGER-Gleichung bekannt.

Zeitentwicklungsoperator

Da das Skalarprodukt zweier Vektoren $|\chi(t)\rangle, |\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$, die der SCHRÖDINGER-Gleichung genügen, zeitlich unverändert bleibt, gibt es nach dem WIGNERSchen Theorem (s. 1.1.2) einen unitären Operator $U(t, t_0)$, so daß gilt:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (21.79)$$

für alle $t \geq t_0$ und $|\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{H}$. Dieser heißt *Zeitentwicklungsoperator*. Die Lösung von (1.72) lautet entsprechend:

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0). \quad (21.80)$$

Abgeschlossene Quantensysteme folgen also immer einer *unitären Zeitentwicklung*.

Beispiel: Zeitentwicklungsoperator für einen Spin im Magnetfeld

Anstatt die Zeitentwicklung eines Systems wie im Beispiel »VON-NEUMANN-Gleichung für einen Spin im Magnetfeld« (Abschnitt 1.2.3) mit Hilfe der VON-NEUMANN-Gleichung zu bestimmen, kann die Lösung auch mit dem Zeitentwicklungsoperator berechnet werden. Es gelte derselbe HAMILTON-Operator $H = -\frac{\mu\hbar B}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, der keine Zeitabhängigkeit aufweist und bereits Diagonalform besitzt. Der Zeitentwicklungsoperator läßt sich damit gemäß (1.83) bestimmen:

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} = \begin{pmatrix} e^{i\mu B(t-t_0)/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\mu B(t-t_0)/2} \end{pmatrix}. \quad (21.81)$$

Für den Zustand zur Zeit t folgt dann gemäß (1.80)

$$\begin{aligned}\rho(t) &= U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0) \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\mu B(t-t_0)/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\mu B(t-t_0)/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11}(t_0) & \rho_{12}(t_0) \\ \rho_{21}(t_0) & \rho_{22}(t_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\mu B(t-t_0)/2} & 0 \\ 0 & e^{i\mu B(t-t_0)/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \rho_{11}(t_0) & \rho_{12}(t_0)e^{i\mu B(t-t_0)} \\ \rho_{21}(t_0)e^{-i\mu B(t-t_0)} & \rho_{22}(t_0) \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (21.82)$$

Lösung der Schrödinger-Gleichung als Eigenwertproblem

Wenn der HAMILTON-Operator H nicht von der Zeit abhängt, so gilt:

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (21.83)$$

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung ist in diesem Fall äquivalent zur Diagonalisierung von H , also der Berechnung aller Eigenwerte $E_n \in \mathbb{R}$ und aller dazugehörigen Eigenvektoren $|\psi_n\rangle$ von H :

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle. \quad (21.84)$$

Gleichung (1.84) wird auch als *stationäre SCHRÖDINGER-Gleichung* bezeichnet. Für einen beliebigen Zustandsvektor $|\psi(t_0)\rangle$ zum Zeitpunkt t_0 lautet dann die Lösung zum Zeitpunkt t :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi(t_0)\rangle. \quad (21.85)$$

Beispiele für Lösungen der Schrödinger-Gleichung

Für ein Teilchen der Masse m , das sich in einem Potential $V(\vec{\mathbf{r}})$ bewegt, gilt der HAMILTON-Operator $H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V$ bzw. in Ortsdarstellung $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})$, mit dem LAPLACE-Operator Δ (s. 13.2.6.5, LAPLACE-Operator).

Die stationäre SCHRÖDINGER-Gleichung (1.84) stellt sich deshalb als eine im allgemeinen gekoppelte partielle Differentialgleichung dar (s. 9.1.2, Partielle Differentialgleichungen), für eindimensionale Probleme vereinfacht sie sich jedoch zu einer gewöhnlichen Differentialgleichung (s. 9.2.4, SCHRÖDINGER-Gleichung).

Beispiel A: Freies Teilchen in einer Dimension

Potential: $V(x) = 0$

DGL: $\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(x) = 0$

Lösung: ebene Wellen $\psi(x) = \exp(ikx)$ mit $k = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$. Alle Energien $E \geq 0$ sind erlaubt.

Hinweis: Man beachte, daß eine ebene Welle keine Norm hat ($\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx \rightarrow \infty$) und somit kein Vektor im HILBERT-Raum $L^2(\mathbb{R})$ ist. Dieses für Eigenzustände von Operatoren mit kontinuierlichem Spektrum typische Problem läßt sich durch entsprechende Erweiterung des HILBERT-Raumes in den Griff bekommen [1].

Beispiel B: Kastenpotential in einer Dimension

Potential: $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{außerhalb} \end{cases}$

DGL: Wie freies Teilchens für $0 \leq x \leq L$, aber mit Randbedingung $\psi(0) = \psi(L) = 0$.

Lösung: $\psi(x) = C \sin(kx)$ für $0 \leq x \leq L$ mit $k = n\pi/L$ und $n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$. C ist eine Konstante zur Normierung der Wellenfunktion. Nur diskrete Energien $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$ sind erlaubt (s. Abb. 1.1). Außerhalb gilt $\psi(x) = 0$.

Beispiel C: Kastenpotential in drei Dimensionen

Potential: $V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y, 0 \leq z \leq L_z \\ \infty & \text{außerhalb} \end{cases}$

DGL: $\left(\Delta + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) \psi(x) = 0$ innerhalb des Kastens mit Randbedingung $\psi(x, y, z) = 0$ für x, y oder $z = 0$ oder L .

Lösung: $\psi(x, y, z) = C \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)$ mit $k_i = n_i \pi / L_i$ und $n_i \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$, $i = x, y, z$ und der Konstanten C zur Normierung. Nur diskrete Energien $E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$ sind erlaubt.

Beispiel D: Harmonischer Oszillator in einer Dimension

Potential: $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

DGL: $\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \psi(x) = 0$

Lösung: HERMITESche Funktionen

$$\psi(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \right)$$

mit den HERMITESchen Polynomen H_n (s. 9.2.4.7, Linearer harmonischer Oszillator). Nur Energien $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ mit $n \in \mathbb{N}$ sind erlaubt (Abb. 1.2).

21.2.4 Zusammengesetzte Quantensysteme

Ein Quantensystem besteht typischerweise aus mehreren Teilsystemen, welche getrennt voneinander betrachtet werden können. Im folgenden wird der Fall zweier Teilsysteme mit HILBERT-Räumen \mathcal{H}_A und \mathcal{H}_B betrachtet. Dies bedeutet, daß die Messung einer Observablen A , die in \mathcal{H}_A wirkt, nur vom Zustand eines Teilsystems und nicht vom Zustand des anderen Teilsystems beeinflusst wird. Entsprechendes gilt für eine Observable B auf \mathcal{H}_B . Unter dieser Voraussetzung ergibt sich der HILBERT-Raum des Gesamtsystems als *Tensorprodukt* $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ der beiden Teilräume.

Beispiel: Zusammengesetztes Quantensystem aus zwei Zwei-Niveau-Systemen

Für zwei Zwei-Niveau-Systeme mit den assoziierten (zweidimensionalen) HILBERT-Räumen

$$\mathcal{H}_A \quad \text{mit Basis} \quad \{|a_1\rangle, |a_2\rangle\} \quad \text{und Vektoren} \quad |\psi_A\rangle = c_1 |a_1\rangle + c_2 |a_2\rangle, \quad (21.86)$$

$$\mathcal{H}_B \quad \text{mit Basis} \quad \{|b_1\rangle, |b_2\rangle\} \quad \text{und Vektoren} \quad |\psi_B\rangle = d_1 |b_1\rangle + d_2 |b_2\rangle \quad (21.87)$$

mit $c_1, c_2, d_1, d_2 \in \mathbb{C}$ soll das zusammengesetzte System $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ konstruiert werden. Gemäß 1.1.2, Tensorprodukt, hat $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ die Basis

$$\{|a_1\rangle \otimes |b_1\rangle, |a_1\rangle \otimes |b_2\rangle, |a_2\rangle \otimes |b_1\rangle, |a_2\rangle \otimes |b_2\rangle\} \equiv \{|a_1, b_1\rangle, |a_1, b_2\rangle, |a_2, b_1\rangle, |a_2, b_2\rangle\}. \quad (21.88)$$

Ein allgemeiner Vektor $|\psi_{AB}\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ hat die Form

$$|\psi_{AB}\rangle = c_{11} |a_1, b_1\rangle + c_{12} |a_1, b_2\rangle + c_{21} |a_2, b_1\rangle + c_{22} |a_2, b_2\rangle \quad \text{mit} \quad c_{11}, c_{12}, c_{21}, c_{22} \in \mathbb{C}. \quad (21.89)$$

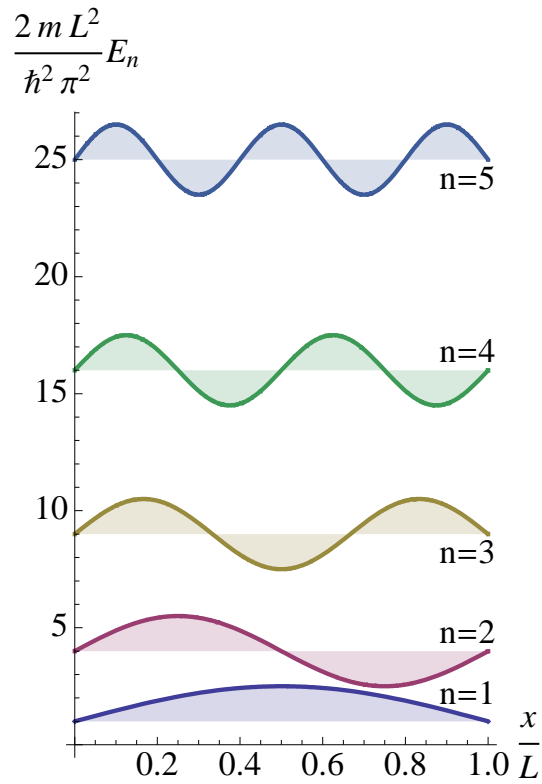


Abbildung 21.1 Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung innerhalb eines Kastenpotentials. Die Eigenfunktionen sind für die ersten fünf Eigenenergien aufgetragen.

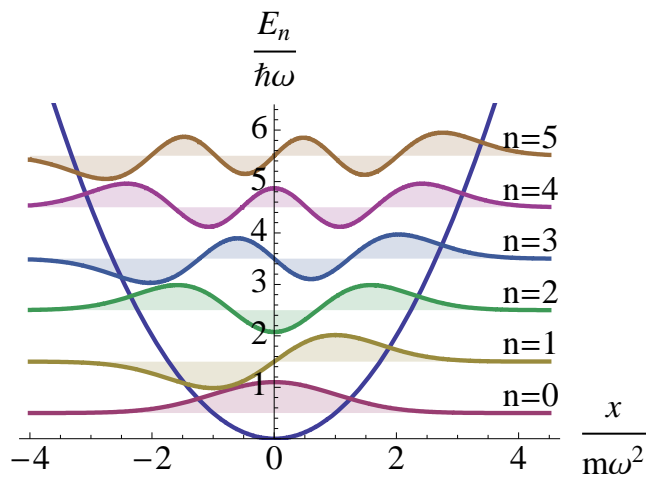


Abbildung 21.2 Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung für ein quadratisches Potential. Die hermiteschen Funktionen sind für die ersten sechs Eigenenergien aufgetragen.

Reduzierte Zustände

Die Observablen für die beiden Teilsysteme haben dann die Form $A \otimes \mathbb{1}_B$ bzw. $\mathbb{1}_A \otimes B$. Ist auf dem gesamten HILBERT-Raum ein Zustand ρ definiert, dann erhält man die entsprechenden Zustände der Teilsysteme durch partielle Spurbildung: $\rho_A = \text{Sp}_B \rho$ bzw. $\rho_B = \text{Sp}_A \rho$. Die Tatsache, daß Messungen an den Teilsystemen nur von den entsprechenden reduzierten Zuständen abhängen, kommt in den folgenden Gleichungen zum Ausdruck:

$$\langle A \otimes \mathbb{1}_B \rangle = \text{Sp}(A \otimes \mathbb{1}_B \rho) = \text{Sp}(A \rho_A), \quad \langle \mathbb{1}_A \otimes B \rangle = \text{Sp}(\mathbb{1}_A \otimes B \rho) = \text{Sp}(B \rho_B) \quad (21.90)$$

Beispiel: Reduzierte Zustände eines aus zwei Zwei-Niveau-Systemen bestehenden Quantensystems

Der Zustand eines aus zwei Zwei-Niveau-Systemen zusammengesetzten Quantensystems $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ mit Basis $\{|a_1, b_1\rangle, |a_1, b_2\rangle, |a_2, b_1\rangle, |a_2, b_2\rangle\}$ sei

$$\rho = \begin{pmatrix} a & e & h & j \\ e^* & b & f & i \\ h^* & f^* & c & g \\ j^* & i^* & g^* & d \end{pmatrix} = \sum_{k,l,m,n=1}^2 \rho_{kl,mn} |a_k, b_l\rangle \langle a_m, b_n|, \quad (21.91)$$

wobei die Matrixelemente noch Nebenbedingungen erfüllen, so daß $\rho = \rho^\dagger$, $\rho > 0$ und $\text{Tr} \rho = 1$ gilt. Die reduzierten Zustände ρ_A für \mathcal{H}_A bzw. ρ_B für \mathcal{H}_B werden wie folgt bestimmt:

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}_B \rho = \sum_{p=1}^2 \langle b_p | \rho | b_p \rangle = \sum_{k,l,m,n,p=1}^2 \rho_{kl,mn} |a_k\rangle \langle a_m| \langle b_p | b_l \rangle \langle b_n | b_p \rangle \\ &= \sum_{k,l,m,n,p=1}^2 \rho_{kl,mn} |a_k\rangle \langle a_m| \delta_{pl} \delta_{np} = \sum_{k,m,p=1}^2 \rho_{kp,mp} |a_k\rangle \langle a_m| = \begin{pmatrix} a+b & h+i \\ h^*+i^* & c+d \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (21.92)$$

$$\begin{aligned} \rho_B &= \text{Tr}_A \rho = \sum_{p=1}^2 \langle a_p | \rho | a_p \rangle = \sum_{k,l,m,n,p=1}^2 \rho_{kl,mn} |b_l\rangle \langle b_n| \langle a_p | a_k \rangle \langle a_m | a_p \rangle \\ &= \sum_{k,l,m,n,p=1}^2 \rho_{kl,mn} |b_l\rangle \langle b_n| \delta_{pk} \delta_{mp} = \sum_{k,m,p=1}^2 \rho_{pl,pn} |b_l\rangle \langle b_n| = \begin{pmatrix} a+c & e+g \\ e^*+g^* & b+d \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (21.93)$$

Korrelationen und Verschränkung

Betrachtet werden die Observablen der Form $A \otimes B$, d.h. eine gleichzeitige Messung von A am einen und B am anderen System. Genau dann, wenn die Messergebnisse voneinander unabhängig sind, d.h. wenn $\langle A \otimes B \rangle = \langle A \otimes \mathbb{1}_B \rangle \langle \mathbb{1}_A \otimes B \rangle$ für alle Observablen A auf \mathcal{H}_A und B auf \mathcal{H}_B gilt, ist ρ ein Produktzustand der Form $\rho = \rho_A \otimes \rho_B$ und heißt *unkorreliert*. Für Zustände ρ , die keine Produktzustände sind, unterscheidet man die folgenden zwei Fälle:

a) ρ ist eine konvexe Summe von Produktzuständen, d.h.:

$$\rho = \sum_i p_i \rho_A^{(i)} \otimes \rho_B^{(i)}, \quad (21.94)$$

wobei $p_i > 0$, $\sum_i p_i = 1$ und $\rho_A^{(i)}$ und $\rho_B^{(i)}$ Zustände auf \mathcal{H}_A und \mathcal{H}_B sind. Der Zustand ρ heißt dann *separabler* oder *klassisch korrelierter* Zustand.

b) andernfalls heißt ρ *verschränkt*.

Im allgemeinen weisen verschränkte Zustände ein höheres Maß an Korrelationen auf als separable, was durch folgendes Beispiel veranschaulicht werden soll.

Beispiel: Korrelationen zwischen zwei zweidimensionalen Hilbert-Räumen

Seien \mathcal{H}_A und \mathcal{H}_B zwei zweidimensionale HILBERT-Räume mit Basis $\{|0_A\rangle, |1_A\rangle\}$ und $\{|0_B\rangle, |1_B\rangle\}$. Mit der Kurzschreibweise $|0_A\rangle \otimes |0_B\rangle = |00\rangle$ usw. werden in beiden HILBERT-Räumen die Zustände $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ und $|-\rangle = (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ definiert. Betrachtet werden die Observablen $Z = |1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 0|$ und $X = |+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|$. Eine Messung von Z bzw. X liefert entweder das Ergebnis ‘+1’ oder ‘-1’ mit den dazugehörigen Eigenzuständen $|1\rangle$ und $|0\rangle$ bzw. $|+\rangle$ und $|-\rangle$. Auf $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ werden nunmehr ein separabler und ein verschränkter Zustand wie folgt definiert:

- Separabel: $\rho = \frac{1}{2}|00\rangle\langle 00| + \frac{1}{2}|11\rangle\langle 11|$. Die reduzierten Zustände lauten $\rho_A = \rho_B = \frac{1}{2}\mathbb{1}$. Messungen an einem einzelnen Teilsystem sind also vollkommen unbestimmt, d.h. $\langle Z \otimes \mathbb{1} \rangle = \langle \mathbb{1} \otimes Z \rangle = \langle X \otimes \mathbb{1} \rangle = \langle \mathbb{1} \otimes X \rangle = 0$. Für die Korrelationen gilt $\langle Z \otimes Z \rangle = 1$ und $\langle X \otimes X \rangle = 0$. Die Observable $Z \otimes Z$ weist also perfekte Korrelationen auf (in beiden Systemen stets dasselbe Ergebnis ‘+1’ oder ‘-1’), während $X \otimes X$ vollständig unkorreliert ist (Ergebnis in einem System hängt nicht vom anderen ab).
- Verschränkt: $\rho = \frac{1}{2}|00 + 11\rangle\langle 00 + 11|$. Die reduzierten Zustände $\rho_A = \rho_B = \frac{1}{2}\mathbb{1}$ sind die gleichen wie in Beispiel a). Für die Korrelationen ergibt sich $\langle Z \otimes Z \rangle = 1$ und $\langle X \otimes X \rangle = 1$, d.h. in beiden Fällen perfekte Korrelation!

21.2.5 Offene Quantensysteme, Dekohärenz

Offene Quantensysteme

Die in 1.2.3 behandelte SCHRÖDINGER-Gleichung beschreibt die Zeitentwicklung für abgeschlossene Quantensysteme. In der Realität ist diese Voraussetzung schwierig zu erfüllen, da sich jedes physikalische System in irgendeiner Weise in Kontakt mit seiner Umgebung befindet.

Um den Einfluss der Umgebung auf die zeitliche Entwicklung des Systems zu berücksichtigen, muß der Zustand der Umgebung und die Wechselwirkung der Umgebung mit dem ursprünglichen System prinzipiell in die quantenmechanische Formulierung einbezogen werden. Gemäß 1.1.2 ist der gesamte HILBERT-Raum dann das Tensorprodukt der HILBERT-Räume des ursprünglichen Systems und der Umgebung. Indem man dieses Gesamtsystem als abgeschlossen betrachtet, kann gemäß (1.72) eine unitäre Zeitentwicklung für den Zustand des Gesamtsystems angesetzt werden, woraus sich schließlich der Zustand des ursprünglichen Teilsystems durch die partielle Spur über die Umgebung ergibt. In der Praxis ist das so skizzierte Programm jedoch nur unter bestimmten Annahmen über die Physik der Umgebung (z.B. schnell zerfallende Korrelationen) durchführbar. Dies ist Gegenstand der Theorie der offenen Quantensysteme [3].

Dekohärenz

Als *Dekohärenz* (bzgl. einer Basis $\{|n\rangle\}$ des HILBERT-Raumes) bezeichnet man die lineare Abbildung eines Zustandes ρ auf einen Zustand ρ' , der aus ρ durch Streichen der Nichtdiagonalelemente (auch *Kohärenzen* genannt) hervorgeht:

$$\rho = \sum_{nm} \rho_{nm} |n\rangle\langle m| \longrightarrow \rho' = \sum_n \rho_{nn} |n\rangle\langle n| \quad (21.95)$$

In Übereinstimmung mit den Postulaten für den Meßprozeß (s. 1.2.2) wird diese Abbildung durch die Zustandsreduktion bei der Messung einer Observablen mit Eigenzuständen $\{|n\rangle\}$ realisiert, sofern das Meßergebnis ignoriert, also über alle möglichen Meßergebnisse gemittelt wird. Andererseits findet man Dekohärenz typischerweise auch bei offenen Quantensystemen als Folge der Wechselwirkung mit der Umgebung, wobei die Abbildung (1.95) meistens näherungsweise auf sehr kurzen Zeitskalen (auf denen andere dynamische Effekte vernachlässigt werden können) realisiert ist. In diesem Fall führt die Umgebung effektiv eine Messung an dem System durch.

Hinweis:

Dekohärenz tritt zwangsläufig auf, sobald eine Information über den Zustand des Systems in irgendeiner Form an die Umgebung weitergegeben wird. Hierfür kann beispielsweise schon die Streuung eines einzelnen Photons aus der thermischen Hintergrundstrahlung oder ein Zusammenstoß mit einem einzigen Atom des Restgases in der Vakuumkammer genügen.

Beispiel: Dekohärenz durch Wechselwirkung mit der Umgebung

Das System befinde sich zunächst in einem beliebigen reinen Zustand $\sum_n c_n |n\rangle$. Dann kommt es zu einer Wechselwirkung mit einem Teilchen aus der Umgebung, das sich anfangs im Zustand $|\chi_0\rangle$ befand. Abhängig vom Zustand $|n\rangle$ des Systems, nimmt das Umgebungsteilchen den Zustand $|\chi_n\rangle$ an, während der Systemzustand $|n\rangle$ dabei unverändert bleibt:

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \otimes |\chi_0\rangle \longrightarrow |\Psi'\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \otimes |\chi_n\rangle. \quad (21.96)$$

Zur Berechnung des reduzierten Zustandes $\rho = \text{Sp}_E |\Psi\rangle\langle\Psi|$ und $\rho' = \text{Sp}_E |\Psi'\rangle\langle\Psi'|$ des Systems vor und nach der Wechselwirkung wird die partielle Spur Sp_E über die Umgebung ausgeführt. Unter der Annahme, dass die verschiedenen Umgebungszustände $|\chi_n\rangle$ orthogonal zueinander sind (also $\langle\chi_n|\chi_m\rangle = \delta_{nm}$) erhält man genau die Gleichung (1.95) mit $\rho_{nm} = c_n c_m^*$.

22 Quantencomputer

22.1 Einleitung

Der Quantencomputer ist eine Rechenmaschine, die auf der Grundlage quantenmechanischer Prozesse abläuft. Die Information ist hierbei in Form von Quantenzuständen gespeichert, Rechenoperationen entsprechen linearen Operatoren im HILBERT-Raum, und das Ablesen des Ergebnisses ist ein quantenmechanischer Meßprozeß.

Der wichtigste Unterschied zum klassischen Computer liegt im Superpositionsprinzip, gemäß dem die Information nicht in diskreter Form z.B. als Folge von Bits vorliegen muß, von denen jedes genau einen von zwei möglichen Zuständen 0 oder 1 annimmt, sondern auch beliebige Linearkombinationen dieser Basiszustände zulässig sind. Dies erlaubt es dem Quantencomputer, in einem gewissen Sinn mehrere Rechnungen parallel durchzuführen und bestimmte Aufgaben (z.B. Primfaktorzerlegung) effizienter als es mit einem klassischen Computer möglich ist.

Wegen der extremen Anfälligkeit von Quantensystemen für Dekohärenz ist jedoch die technische Realisierung einer quantenmechanischen Rechenmaschine äußerst anspruchsvoll und bislang bei weitem noch nicht in dem Maße fortgeschritten, wie es nötig wäre, um klassische Computer zu übertreffen.

22.2 Qubits

Entsprechend dem klassischen Bit, das genau einen der beiden Werte 0 oder 1 annehmen kann, ist in der Quantenmechanik die fundamentale Informationseinheit das Quantenbit oder kurz *Qubit*, dessen HILBERT-Raum \mathbb{C}^2 durch zwei Basiszustände aufgespannt wird, die mit den logischen Zuständen $|0\rangle$ und $|1\rangle$ identifiziert werden können.

22.2.1 Pauli-Matrizen

Operatoren im \mathbb{C}^2 entsprechen 2×2 -Matrizen. Von besonderer Bedeutung sind die PAULI-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (22.1)$$

Sie sind selbstadjungiert und unitär. Falls das Qubit physikalisch als Spin-1/2-Teilchen realisiert ist, sind $\hbar\sigma_{x,y,z}/2$ die Observablen des Spins in den drei Raumrichtungen x , y , und z . Im allgemeinen ist jeder Operator im \mathbb{C}^2 eine Linearkombination der drei PAULI-Matrizen und der 2×2 -Einheitsmatrix $\mathbb{1}$, d.h. die Operatoren $\{\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ bilden eine Basis im Raum der linearen Operatoren auf dem \mathbb{C}^2 . Die Rechenregeln für die PAULI-Matrizen lauten:

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z \quad (22.2)$$

$$\sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x \quad (22.3)$$

$$\sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y \quad (22.4)$$

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1} \quad (22.5)$$

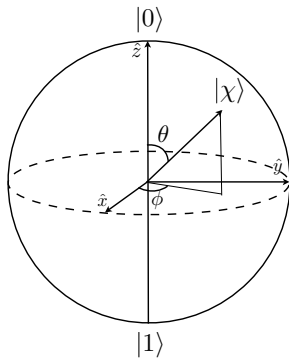


Abbildung 22.1 Blochkugel

22.2.2 Bloch-Darstellung

Für einen Zustandsoperator ρ , der die Bedingungen $\rho \geq 0$ und $\text{Sp}\rho = 1$ erfüllt (s. 1.2.1), lautet die Darstellung als Linearkombination von $\{\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ wie folgt:

$$\rho = \frac{\mathbb{1} + r_x \sigma_x + r_y \sigma_y + r_z \sigma_z}{2} = \frac{\mathbb{1} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}}{2} \quad (22.6)$$

mit $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, und dem BLOCH-Vektor $\vec{r} = (r_x, r_y, r_z) \in \mathbb{R}^3$, der aus den Erwartungswerten der PAULI-Matrizen bzgl. des Zustands ρ besteht: $r_{x,y,z} = \langle \sigma_{x,y,z} \rangle = \text{Sp}(\rho \sigma_{x,y,z})$ oder kurz:

$$\vec{r} = \langle \vec{\sigma} \rangle = \text{Sp}(\rho \vec{\sigma}) \quad (22.7)$$

Für die Länge des BLOCH-Vektors gilt allgemein: $|\vec{r}|^2 = r_x^2 + r_y^2 + r_z^2 \leq 1$. Die maximale Länge $|\vec{r}| = 1$ wird genau dann erreicht, wenn ρ ein reiner Zustand ist, also wenn $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ für ein normiertes $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^2$.

Gemäß den obigen Gleichungen besteht also eine eindeutige Zuordnung zwischen Zuständen ρ im \mathbb{C}^2 und ihren BLOCH-Vektoren \vec{r} . Letztere können in Kugelkoordinaten $\vec{r} = (r \cos \theta \sin \phi, r \cos \theta \cos \phi, r \sin \theta)$ ausgedrückt (s. 3.5.3) und anschaulich in der BLOCH-Kugel dargestellt werden (s. Abb. 2.1). Reine Zustände liegen auf der Oberfläche, gemischte Zustände im Inneren der Kugel.

Beispiel A:

Der Mittelpunkt $\vec{r} = (0, 0, 0)$ der Kugel entspricht dem Zustand $\rho^* = \mathbb{1}/2$, der auch „maximal gemischter Zustand“ genannt wird.

Beispiel B:

Die Zustände $(0, 0, 1)$ und $(0, 0, -1)$ auf den Schnittpunkten der z -Achse mit der Kugeloberfläche entsprechen den reinen Zuständen $|0\rangle\langle 0|$ und $|1\rangle\langle 1|$, also den Eigenzuständen von σ_z zum Eigenwert $+1$ und -1 . Diese beiden Zustände bilden die für klassische Bits erlaubten Werte.

22.2.3 Quantenregister

Ein *Quantenregister* besteht aus n Qubits, $n > 1$. Sein HILBERT-Raum $\underbrace{\mathbb{C}^2 \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^2}_n = (\mathbb{C}^2)^{\otimes n}$ ist das n -fache Tensorprodukt von \mathbb{C}^2 , hat also die Dimension $N = 2^n$. Ein Zustandsvektor im Quantenregister hat die allgemeine Form

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_n=0,1} c_{i_1 \dots i_n} |i_1\rangle \otimes \dots \otimes |i_n\rangle, \quad (22.8)$$

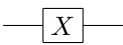
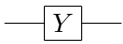
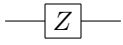
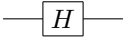
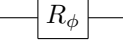
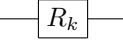
Pauli- X (NOT)		$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
Pauli- Y		$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$
Pauli- Z		$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
Hadamard		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$
Phasengatter		$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix}$
Diskretes Phasengatter		$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{\frac{2\pi i}{2^k}} \end{pmatrix}$

Abbildung 22.2 Tabelle gebräuchlicher 1-Qubit-Operationen und ihrer Schaltkreissymbole

wobei sich die Summe über alle Produktzustände $|i_1\rangle \otimes \dots \otimes |i_n\rangle$ erstreckt, die eine Basis bilden und in denen jedes einzelne Qubit entweder den Zustand $|0\rangle$ oder $|1\rangle$ annimmt. Zur Vereinfachung der Notation kann man diese Produktzustände auch mit einem einzigen Index i numerieren, dessen Binärdarstellung $i_1 i_2 \dots i_n$ ergibt. Der obige allgemeine Zustand lautet dann $|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} c_i |i\rangle$.

Beispiel: Drei Qubits ($n = 3$).

Der HILBERT-Raum hat die Dimension $N = 2^3 = 8$. Die Basiszustände werden entsprechend ihrer binären Darstellung wie folgt nummeriert:

$$\begin{array}{ll} |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \equiv |000\rangle \rightarrow |0\rangle, & |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |1\rangle \equiv |001\rangle \rightarrow |1\rangle \\ |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes |0\rangle \equiv |010\rangle \rightarrow |2\rangle, & |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes |1\rangle \equiv |011\rangle \rightarrow |3\rangle \\ |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \equiv |100\rangle \rightarrow |4\rangle, & |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes |1\rangle \equiv |101\rangle \rightarrow |5\rangle \\ |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes |0\rangle \equiv |110\rangle \rightarrow |6\rangle, & |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes |1\rangle \equiv |111\rangle \rightarrow |7\rangle \end{array}$$

22.3 Operationen mit Qubits

Eine Rechnung des Quantencomputers besteht formal aus einem unitären Operator auf dem N -dimensionalen HILBERT-Raum des Quantenregisters ($N = 2^n$). Dieser unitäre Operator bildet den Anfangszustand der n Qubits auf den Endzustand ab, der schließlich durch Messung ausgelesen wird.

Im Gegensatz zum klassischen Computer sind deshalb Rechnungen in einem Quantencomputer stets reversibel. In klassischen Computern vorkommende, irreversible Operationen wie das Löschen und Kopieren von Bits können jedoch auch auf dem Quantencomputer realisiert werden, indem sie durch Einführung zusätzlicher Hilfs-Qubits in eine reversible Form gebracht werden.

Wie unten beschrieben, läßt sich jeder unitäre Operator für n Qubits aus unitären Operatoren für 1 und 2 Qubits, sogenannten 1-Qubit- und 2-Qubit-Gattern, zusammensetzen – ähnlich wie auch beim klassischen Computer jede Rechenoperation auf einige wenige elementare Operationen (z.B. NOT, AND, OR, etc.) reduziert werden kann.

22.3.1 1-Qubit-Gatter

1-Qubit-Gatter sind unitäre Operatoren im HILBERT-Raum \mathbb{C}^2 eines einzelnen Qubits, lassen sich also als 2×2 -Matrizen darstellen. Abb. 2.2 zeigt eine Liste von 1-Qubit-Operationen, wie sie in Schaltkreisen für Quantencomputer häufig verwendet werden.

Beispiel A: Bitflip, NOT-Gatter

Durch die Anwendung des PAULI-X-Operators σ_x werden die logischen Zustände $|0\rangle$ und $|1\rangle$ aufeinander abgebildet. Dies entspricht einer logischen Negation bzw. einem Nicht-Gatter.

$$\sigma_x |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1\rangle, \quad \sigma_x |1\rangle = |0\rangle \quad (22.9)$$

Beispiel B: Kontrollierter Phasenflip

Der PAULI-Z-Operator σ_z versieht ein Qubit mit einer komplexen Phase π abhängig davon, ob es den Wert 1 hat. Die Operation bildet einen Spezialfall des Phasengatters R_ϕ mit $\phi = \pi$.

$$\sigma_z |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle, \quad \sigma_z |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -|1\rangle \quad (22.10)$$

Beispiel C: Hadamard-Gatter

Das HADAMARD-Gatter bildet die logischen Zustände $|0\rangle$ und $|1\rangle$ und deren Superpositionen $|0\rangle \pm |1\rangle$ aufeinander ab:

$$H |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \quad H |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \quad (22.11)$$

Diese Operation wird in vielen Quantenschaltkreisen benötigt, um vom quantenmechanischen Superpositionsprinzip Gebrauch zu machen.

Rotation der Bloch-Kugel

In der BLOCH-Darstellung entspricht eine unitäre 1-Qubit-Operation einer Rotation um eine durch den Mittelpunkt der BLOCH-Kugel verlaufende Achse. Im Fall der x -, y -, oder z -Achse wird der einer Rotation um den Winkel θ entsprechende unitäre Operator wie folgt durch die PAULI-Matrizen erzeugt:

$$R_x(\theta) = e^{-i\theta\sigma_x/2}, \quad R_y(\theta) = e^{-i\theta\sigma_y/2}, \quad R_z(\theta) = e^{-i\theta\sigma_z/2} \quad (22.12)$$

Y-Z-Darstellung

Eine beliebiger unitärer Operator U kann stets aus Rotationen um zwei feste Achsen, beispielsweise die y - und z -Achse, wie folgt zusammengesetzt werden:

$$U = e^{i\alpha} R_z(\beta) R_y(\gamma) R_z(\delta) \quad (22.13)$$

mit $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{R}$.

Hieraus ergibt sich folgendes Korollar, welches für die Universalität des CNOT-Gatters weiter unten eine wichtige Rolle spielen wird: Für jeden unitären Operator U im \mathbb{C}^2 gibt es eine Darstellung

$$U = e^{i\alpha} A X B X C \quad (22.14)$$

mit $\alpha \in \mathbb{R}$, $X = \sigma_x$, und $ABC = \mathbb{1}$. Die Operatoren A, B, C sind hierbei durch die Koeffizienten $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ obiger Y-Z-Darstellung von U gegeben: $A = R_z(\beta) R_y(\gamma/2)$, $B = R_y(-\gamma/2) R_z(-(\delta + \beta)/2)$, und $C = R_z((\delta - \beta)/2)$.

22.3.2 2-Qubit-Gatter

2-Qubit-Gatter sind unitäre Operatoren im HILBERT-Raum $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ zweier Qubits. Sie lassen sich deshalb als 4×4 -Matrizen darstellen.

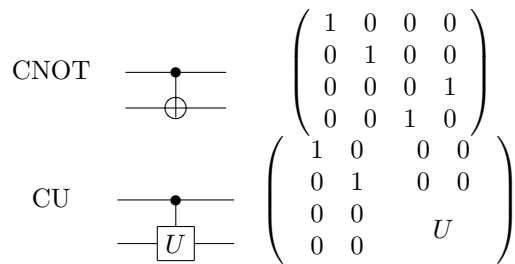


Abbildung 22.3 Schaltkreissymbole und Matrixdarstellungen der CNOT-Operation und einer allgemeinen kontrollierten 2-Qubit-Operation CU.

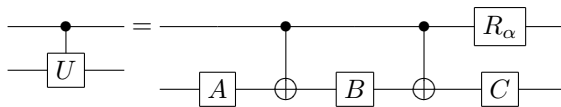


Abbildung 22.4 Darstellung eines allgemeinen kontrollierten 2-Qubit-Gatters CU durch CNOT und 1-Qubit-Gatter.

CNOT-Gatter

Eine der gebräuchlichsten 2-Qubit-Operationen ist die kontrollierte Negation, die CNOT-Operation, die durch ihre Wirkung auf die Basiszustände des HILBERT-Raums wie folgt definiert ist:

$$\begin{aligned} \text{CNOT}|0\rangle \otimes |0\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle \\ \text{CNOT}|0\rangle \otimes |1\rangle &= |0\rangle \otimes |1\rangle \\ \text{CNOT}|1\rangle \otimes |0\rangle &= |1\rangle \otimes |1\rangle \\ \text{CNOT}|1\rangle \otimes |1\rangle &= |1\rangle \otimes |0\rangle. \end{aligned} \quad (22.15)$$

Der gesamte Zustand bleibt also unverändert, falls sich das erste Qubit, das sogenannte „Kontroll-Qubit“, im Zustand $|0\rangle$ befindet. Befindet sich dagegen das Kontroll-Qubit im Zustand $|1\rangle$, wird auf das zweite Qubit („Ziel-Qubit“) die Operation PAULI-X (bzw. NOT) angewandt, die $|0\rangle$ und $|1\rangle$ vertauscht.

Allgemeine kontrollierte 2-Qubit-Gatter

Ersetzt man die NOT-Operation durch ein beliebiges 1-Qubit-Gatter U , so erhält man ausgehend von CNOT die allgemeine Form einer kontrollierten Operation:

$$\begin{aligned} \text{CU}|0\rangle \otimes |\psi\rangle &= |0\rangle \otimes |\psi\rangle \\ \text{CU}|1\rangle \otimes |\psi\rangle &= |1\rangle \otimes U|\psi\rangle, \end{aligned} \quad (22.16)$$

wobei $|\psi\rangle$ ein beliebiger Zustand des Ziel-Qubits ist.

Ein beliebiges kontrolliertes 2-Qubit-Gatter CU kann wie folgt aus CNOT und 1-Qubit-Gattern zusammengesetzt werden (s. Abb. 2.4):

$$\text{CU} = (R_\alpha \otimes C) \text{CNOT} (\mathbb{1} \otimes B) \text{CNOT} (\mathbb{1} \otimes A), \quad (22.17)$$

wobei die 1-Qubit-Gatter A , B , C und der Winkel α aus der Darstellung von U nach obigem Korollar (2.14) resultieren.

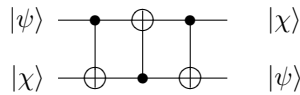


Abbildung 22.5 Darstellung der Austauschoperation $U|\psi\rangle \otimes |\chi\rangle = |\chi\rangle \otimes |\psi\rangle$ durch CNOT-Gatter.

Universalität von CNOT- und 1-Qubit-Gattern

Bei den bisher betrachteten kontrollierten Operationen wie z.B. CNOT bleibt der Zustand eines der beiden Qubits (nämlich des Kontroll-Qubits) stets unverändert. Schaltet man hingegen mehrere kontrollierte Operationen hintereinander, so lassen sich auch allgemeinere 2-Qubit-Gatter realisieren. Tatsächlich kann man jede beliebige 2-Qubit-Operation durch Verkettung von CNOT- und 1-Qubit-Gattern realisieren.

Beispiel: SWAP-Operation

Die Operation

$$U|\chi\rangle \otimes |\psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\chi\rangle, \quad |\chi\rangle, |\psi\rangle \in \mathbb{C}^2, \quad (22.18)$$

die zwei Qubits miteinander vertauscht, ist wie in Abb. 2.5 dargestellt aus drei CNOT-Gattern zusammensetzbar.

Hinweis:

Auf ähnliche Weise lassen sich auch beliebige unitäre Operationen auf Quantenregistern mit mehr als zwei Qubits auf 2-Qubit-Gatter und somit letztendlich auf CNOT- und 1-Qubit-Gatter reduzieren. Für einen Beweis dieser Universalität und ein Verfahren zur expliziten Kontruktion der Zerlegung sei auf [4] verwiesen.

22.3.3 Quanten-Fourier-Transformation

Als Beispiel für eine unitäre Operation auf einem Register von n Qubits wird die *Quanten-FOURIER-Transformation* betrachtet, die im SHOR-Algorithmus zur Primfaktorzerlegung (s. unten) eine zentrale Rolle spielt. Sie ist durch ihre Wirkung auf einen beliebigen Basiszustand $|j\rangle = |j_1\rangle \otimes \dots \otimes |j_n\rangle$ des n -Qubit-Registers wie folgt definiert:

$$U_{FT}|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i j k / N} |k\rangle. \quad (22.19)$$

Dies entspricht folgender Wirkung auf die einzelnen Qubits:

$$U_{FT}|j_1\rangle \otimes \dots \otimes |j_n\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot j_n} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot j_{n-1} j_n} |1\rangle) \otimes \dots \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot j_1 j_2 \dots j_n} |1\rangle), \quad (22.20)$$

wobei $0 \cdot j_l j_{l+1} \dots j_m$ den binären Bruch $j_l/2 + j_{l+1}/4 + \dots + j_m/2^{m-l+1}$ bezeichnet (s. Abb. 2.6). Diese Transformation wird durch den in Abb. 2.7 gezeigten Schaltkreis aus 1-Qubit- und kontrollierten 2-Qubit-Gattern realisiert.

22.4 Quanten-Algorithmen

22.4.1 Deutsch's Algorithmus

DEUSCHs Algorithmus ist der einfachste Quantenalgorithmus, der eine bestimmte Aufgabe effizienter als ein klassischer Algorithmus lösen kann. Daher ist er gut für illustrative Zwecke geeignet, auch wenn die durch ihn gelöste Aufgabe keinen bekannten praktischen Zweck erfüllt.

Binärdarstellung	Dezimaldarstellung
0.1	$\frac{1}{2} = 0.5$
0.01	$\frac{1}{4} = 0.25$
0.11	$\frac{1}{2} + \frac{1}{4} = 0.75$
0.100101	$\frac{1}{2} + \frac{1}{16} + \frac{1}{64} = 0.578125$

Abbildung 22.6 Binärbrüche

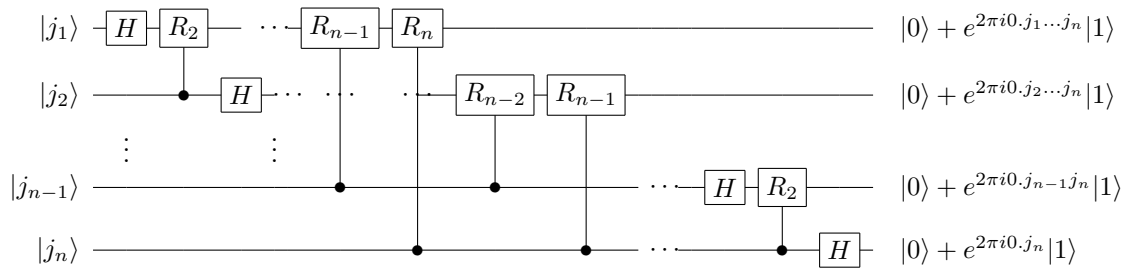


Abbildung 22.7 Schaltkreis für die Quanten-FOURIER-Transformation

Die folgende Aufgabe betrifft eine Funktion $f : \{0, 1\} \rightarrow \{0, 1\}$ mit zweiwertigem Definitionsbereich und Bild. Falls $f(0) = f(1)$, dann heißt f „konstant“, anderenfalls „alternierend“. Für eine beliebige Funktion f , die in Form einer „black box“ vorliegt, z.B. eines in seiner internen Funktion unbekanntem elektronischen Schaltkreises, der f für die beiden möglichen Eingangswerte 0 und 1 berechnet, soll bestimmt werden, ob f konstant oder alternierend ist.

Im klassischen Fall muß der Schaltkreis für f zweimal durchlaufen werden, um sowohl $f(0)$ als auch $f(1)$ zu berechnen. DEUTSCH's Quantenalgorithmus löst das Problem, indem der zu f gehörige Quantenschaltkreis U_f nur einmal durchlaufen wird. Dieser Schaltkreis realisiert folgende unitäre Operation auf einem Register von zwei Qubits:

$$U_f |i\rangle \otimes |j\rangle = |i\rangle \otimes |j \oplus f(i)\rangle, \quad (22.21)$$

wobei \oplus die binäre Addition, also die Addition modulo 2 bezeichnet ($0 \oplus 0 = 0$, $0 \oplus 1 = 1$, $1 \oplus 0 = 1$, und $1 \oplus 1 = 0$.) Auf die Frage, wie die Operation U_f aus 1- und 2-Qubit-Gattern konstruiert werden kann, verweisen wir auf [4]. Dort wird gezeigt, daß zu jedem klassischen Schaltkreis ein Quantenschaltkreis existiert, der mit etwa der gleichen Zahl elementarer Operationen auskommt.

Man beginnt mit dem Quantenregister im Anfangszustand $|0\rangle \otimes |1\rangle$, und wendet eine Verkettung von U_f und 1-Qubit-HADAMARD-Gattern (s. 2.3.1, Beispiel 3) an, um den folgenden Endzustand $|\psi\rangle$ zu berechnen:

$$|\psi\rangle = (H \otimes \mathbb{1}) U_f (H \otimes H) |0\rangle \otimes |1\rangle. \quad (22.22)$$

Der entsprechende Schaltkreis ist in Abb. 2.8 dargestellt.

Schließlich wird am ersten Qubit die Observable $A = |1\rangle\langle 1|$ gemessen. Die möglichen Meßergebnisse (Eigenwerte von A) sind also 1 und 0, mit entsprechenden Eigenzuständen $|1\rangle$ und $|0\rangle$.

Abb. 2.9 zeigt eine Tabelle mit den Endzuständen $|\psi\rangle$ und den entsprechenden Meßergebnissen für alle möglichen Funktionen f . Wie man sieht, befindet sich das erste Qubit in allen Fällen im Eigenzustand $|0\rangle$ oder $|1\rangle$, so daß das entsprechende Meßergebnis 0 oder 1 jeweils mit Sicherheit eintritt. Ferner ist aus Abb. 2.9 ersichtlich, daß der DEUTSCH-Algorithmus die oben gestellte Aufgabe tatsächlich löst: Erhält man nämlich als Meßergebnis 0, so ist f konstant. Mißt man dagegen den Wert 1, so ist f alternierend.

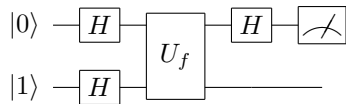


Abbildung 22.8 Schaltkreis für DEUTSCH's Algorithmus.

Funktionswerte	Typ	Endzustand $ \psi\rangle$	Meßergebnis
$f(0) = 0, f(1) = 0$	konstant	$ 0\rangle \otimes \frac{ 0\rangle - 1\rangle}{\sqrt{2}}$	0
$f(0) = 0, f(1) = 1$	alternierend	$ 1\rangle \otimes \frac{ 0\rangle - 1\rangle}{\sqrt{2}}$	1
$f(0) = 1, f(1) = 0$	alternierend	$ 1\rangle \otimes \frac{ 1\rangle - 0\rangle}{\sqrt{2}}$	1
$f(0) = 1, f(1) = 1$	konstant	$ 0\rangle \otimes \frac{ 1\rangle - 0\rangle}{\sqrt{2}}$	0

Abbildung 22.9 Endzustände $|\psi\rangle$ und entsprechende Meßergebnisse für alle möglichen Funktionen f in DEUTSCH's Algorithmus.

22.4.2 Grover–Suchalgorithmus

Es sei $1, \dots, N$ eine Menge von Indizes, und $f : \{1, \dots, N\} \rightarrow \{0, 1\}$ eine Funktion, die überprüft, ob ein gegebener Index i eine gewisse Eigenschaft erfüllt oder nicht, also $f(i) = 1$ oder $f(i) = 0$. Mit Hilfe des GROVER–Suchalgorithmus [5] ist es möglich, mit nur \sqrt{N} -maligem Aufrufen der Funktion f einen Index i zu finden, der die gewünschte Eigenschaft $f(i) = 1$ erfüllt.

Dieser Algorithmus ist für eine gewisse Klasse von Problemen nützlich, nämlich für solche, für die es zwar einfach ist zu überprüfen, ob eine gegebene Antwort das Problem löst, es aber umgekehrt schwierig ist, eine solche Antwort zu finden.

Beispiel A: Suche in einer unstrukturierten Datenbank

In einer Datenbank mit N Einträgen, die keine Ordnung aufweisen, soll ein vorgegebener Eintrag gefunden werden. Zum Beispiel soll in einem Telefonbuch der Eintrag zu einer gegebenen Telefonnummer bestimmt werden. Klassische Algorithmen wie eine Suche der Reihe nach oder das zufällige Wählen von Elementen müssen im Mittel $N/2$ Einträge untersuchen. Mit Hilfe des GROVER–Suchalgorithmus genügt es nur \sqrt{N} Elemente zu untersuchen.

Beispiel B: Handlungsreisender

Der GROVER–Suchalgorithmus kann somit auch die *brute-force-Suche*, das Durchprobieren aller Möglichkeiten, bei Problemen wie dem des Handlungsreisenden beschleunigen (s. auch 18.1.4.4, Rundreiseproblem bzw. 5.8.7, Transportnetze). Für eine Menge von n Städten finde man eine Route, die alle n Städte verbindet, deren Länge aber eine gegebene Grenze L nicht überschreitet. Ein möglicher klassischer Algorithmus ist offenbar, alle $N = (n-1)!/2$ verschiedenen Routen der Reihe nach zu testen, bis man auf eine mit der gewünschten Länge stößt.

Orakel

Die oben beschriebene Funktion f , die jedem Eingangswert eine Antwort „ja“ oder „nein“ zuordnet, wird auch als *Orakel* bezeichnet (da ihr genauer interner Aufbau für den Suchalgorithmus nicht von Interesse ist). Für den Quantenalgorithmus wird eine quantenmechanische Implementierung des Orakels als unitäre Operation O benötigt. Auf dem Quantenregister, das aus n Index–Qubits $|i\rangle$ (um $N = 2^n$ verschiedene Indizes zu codieren) und einem Orakel–Qubit $|q\rangle$ besteht, wirkt das Quantenorakel gemäß

$$O|i\rangle \otimes |q\rangle = |i\rangle \otimes |q \oplus f(i)\rangle. \quad (22.23)$$

Angenommen, das Orakel-Qubit befinde sich im Zustand $|q\rangle = (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$. Dann liefert (2.23)

$$O|i\rangle \otimes \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) = (-1)^{f(i)}|i\rangle \otimes \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right). \quad (22.24)$$

Das Orakel-Qubit bleibt also stets im selben Zustand, und kann im folgenden außer Acht gelassen werden¹.

Such-Algorithmus

Auf alle Index-Qubits wird eine HADAMARD-Transformation angewendet, beginnend beim Indexzustand $|0\rangle$, wodurch der Zustand $|0\rangle$ in eine gleichförmige Überlagerung $|\psi\rangle$ aller Index-Basiszustände $|i\rangle$ umgewandelt wird:

$$H^{\otimes N}|0\rangle = |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle. \quad (22.25)$$

Der Suchalgorithmus löst dann eine wiederholte Anwendung der GROVER-Unteroutine G aus (s. Abb. 2.10), die ihrerseits aus vier Schritten (s. Abb. 2.11) besteht:

1. Anwendung des Orakels O ,
2. HADAMARD-Transformation $H^{\otimes N}$,
3. Phasenverschiebung $|i\rangle \rightarrow -|i\rangle$, falls $i \neq 0$,
4. HADAMARD-Transformation $H^{\otimes N}$.

Diese vier Schritte können in der Gleichung $G = (2|\psi\rangle\langle\psi| - \mathbb{1})O$ zusammengefaßt werden, wobei $|\psi\rangle$ wie oben die gleichförmige Überlagerung aller Index-Basiszustände bezeichnet.

Schließlich wird der Zustand $|i\rangle$ des Indexregisters ausgelesen, was durch Messung der Indexobservablen $A = \sum_i i|i\rangle\langle i|$ geschieht. Das Meßergebnis i liefert mit hoher Wahrscheinlichkeit (s. unten) eine Lösung $f(i) = 1$ des Suchproblems.

Wie oft die GROVER-Unteroutine G anzuwenden ist, um die Wahrscheinlichkeit für das Gelingen des Algorithmus zu maximieren, hängt von der Anzahl der Lösungen ab. Der Einfachheit halber kann angenommen werden, daß nur eine Lösung j existiert.² Wird die gleichförmige Überlagerung aller „falschen“ Indizes $i \neq j$ mit $|\psi_j\rangle = \sum_{i \neq j} |i\rangle / \sqrt{N-1}$ bezeichnet, dann liefert die k -malige Anwendung der Unteroutine G auf den Anfangszustand $|\psi\rangle$

$$G^k|\psi\rangle = \cos\left(\frac{2k+1}{2}\theta\right)|\psi_j\rangle + \sin\left(\frac{2k+1}{2}\theta\right)|j\rangle \quad (22.26)$$

mit $\cos(\theta/2) = \sqrt{1-1/N}$. Damit das richtige Meßergebnis j mit Wahrscheinlichkeit 1 erzielt wird, muß gelten: $G^k|\psi\rangle = |j\rangle$, also $(2k+1)\theta/2 = \pi/2$. Ist $N \gg 1$, dann erhält man für k Iterationen die Näherung

$$k \approx \frac{\pi}{4}\sqrt{N}. \quad (22.27)$$

Da k eine ganze Zahl ist, kann diese Bedingung zwar nicht präzise erfüllt werden, die Irrtumswahrscheinlichkeit beträgt aber nur ungefähr $1/N$, ist also sehr klein.

22.4.3 Shor-Algorithmus zur Primfaktorzerlegung

Problem der Primfaktorzerlegung

Für eine gegebene ganze Zahl N sind zwei ganze Zahlen m und n gesucht, so daß $N = nm$ gilt. Ein effizienter klassischer Algorithmus für diese Aufgabe ist nicht bekannt, insbesondere wenn n und m große Primzahlen

¹ Die konkrete quantenmechanische Implementierung der Funktion f erfordert eventuell die Einführung zusätzlicher Orakel-Hilfsqubits [4], die aber im folgenden ebenfalls außer Acht gelassen werden können.

² Der GROVER-Algorithmus kann jedoch auch auf eine unbekannt Anzahl von Lösungen verallgemeinert werden [4].

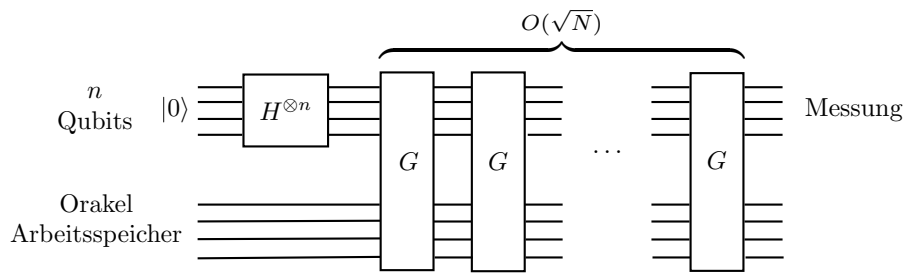


Abbildung 22.10 Schaltkreis für den Grover-Suchalgorithmus. Die Unterroutine G ist in Abb. 2.11 abgebildet.

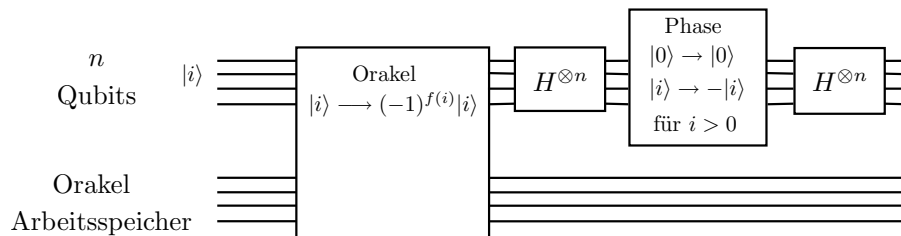


Abbildung 22.11 Schaltkreis für die Grover-Unterroutine G von Abb. 2.10.

sind, so daß die Faktorisierung von mehr als 200-stelligen Zahlen auf klassischen Computern praktisch unmöglich ist, weil alle Primzahlen bis \sqrt{N} überprüft werden müssen. Der Quanten-SHOR-Algorithmus [6] hingegen vermag die Faktorisierung in ungefähr $(\log N)^3$ Operationen zu vollziehen.

Umformung in das Problem der Ordnungsfindung

Zunächst wird das Faktorisierungsproblem in ein äquivalentes Problem umgeformt, das mit einem Quantenalgorithmus effizient gelöst werden kann.

1. Ist N gerade, gib 2 als Faktor zurück.
2. Ist $N = a^b$ für ganze Zahlen $a > 1$ und $b \geq 2$, gib a als Faktor zurück.
3. Wähle zufällig ein x zwischen 1 und $N - 1$. Wenn der größte gemeinsame Teiler $\text{GGT}(x, N)$ von x und N größer ist als 1, gib diese Zahl als Faktor zurück.
4. Finde mit Hilfe des in 2.4.3 beschriebenen Quantenalgorithmus die kleinste ganze Zahl r , so daß $x^r \bmod N = 1$ (also $x^r = 1 + aN$ für eine ganze Zahl a). Diese Zahl r ist die *Ordnung* von x modulo N .
5. Ist r gerade und $x^{r/2} \bmod N \neq N - 1$, so ist entweder $\text{GGT}(x^{r/2} - 1, N)$ oder $\text{GGT}(x^{r/2} + 1, N)$ ein Faktor von N . Falls nicht, gehe zurück zu Schritt 3.

Mit Ausnahme von 4. können alle Schritte in ungefähr $(\log N)^3$ Schritten auf einem klassischen Computer durchgeführt werden. Zum Beweis der zahlentheoretischen Aussage von 5. s. [4]. Wie dort außerdem gezeigt wird, erfüllt r mit der Wahrscheinlichkeit größer $1/2$ die in 5. genannte Bedingung, so daß eine Endlosschleife zwischen 5. und 3. ausgeschlossen ist.

Quantenalgorithmus zur Ordnungsfindung

Die Ordnung von x modulo N bezeichnet die kleinste ganze Zahl r , so daß $x^r \bmod N = 1$. Falls x und N teilerfremd sind, ist die Funktion $x^k \bmod N$ periodisch in k mit Periode r , d.h. $x^{k_1} \bmod N = x^{k_2} \bmod N$

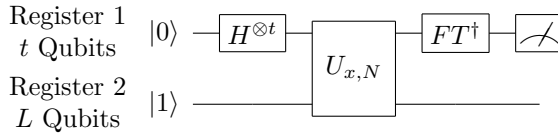


Abbildung 22.12 Schaltkreis für den Quantenalgorithmus zur Ordnungsfindung.

falls $k_1 - k_2$ ein Vielfaches von r ist. Der unten beschriebene Quantenalgorithmus berechnet die Ordnung, indem er durch inverse FOURIER-Transformation die Periode der Funktion $x^k \bmod N$ ermittelt.

Es werden hierfür zwei Quantenregister mit jeweils t bzw. L Qubits benötigt, wobei $2^L \geq N$, so daß das zweite Register Zahlen von 0 bis $N - 1$ darstellen kann, während $t = 2L + 1 + \log(2 + \frac{1}{2^\epsilon})$ mit $\epsilon \ll 1$ (siehe unten). Außerdem benötigt man einen Quantenschaltkreis, der folgende Operation auf den beiden Registern durchführt:

$$U_{x,N}|j\rangle \otimes |k\rangle = |j\rangle \otimes |kx^j \bmod N\rangle \quad (22.28)$$

und während des folgenden Algorithmus nur einmal durchlaufen werden muß.

Der in Abb. 2.12 gezeigte Algorithmus verläuft wie folgt:

1. Initialisiere die Register im Zustand $|\psi_0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$
2. Wende $H^{\otimes t}$ auf Register 1 an. Dies erzeugt den Zustand

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{j=0}^{2^t-1} |j\rangle \otimes |1\rangle. \quad (22.29a)$$

3. Wende die Operation $U_{x,N}$ an. Dies erzeugt den Zustand

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{j=0}^{2^t-1} |j\rangle \otimes |x^j \bmod N\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}2^t} \sum_{s=0}^{r-1} \sum_{j=0}^{2^t-1} e^{2\pi i s j / r} |j\rangle \otimes |u_s\rangle, \quad (22.29b)$$

wobei r die gesuchte Ordnung von x modulo N ist, und

$$|u_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{k=0}^{r-1} \exp(-2\pi i s k / r) |x^k \bmod N\rangle. \quad (22.29c)$$

4. Wende die inverse Quanten-FOURIER-Transformation U_{FT}^\dagger auf Register 1 an. Dies erzeugt den Zustand

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} |\widetilde{s/r}\rangle \otimes |u_s\rangle \quad \text{mit} \quad |\widetilde{s/r}\rangle = \frac{1}{2^t} \sum_{k=0}^{2^t-1} \sum_{j=0}^{2^t-1} e^{2\pi i j (\frac{s}{r} - \frac{k}{2^t})} |k\rangle. \quad (22.29d)$$

Zu $|\widetilde{s/r}\rangle$ tragen nur Zustände $|k\rangle$ signifikant bei, für die $k/2^t \simeq s/r$ gilt.

5. Lies den Zustand $|k\rangle$ des ersten Registers aus. Mit Wahrscheinlichkeit größer als $1 - \epsilon$ gilt nun:

$$\left| \frac{k}{2^t} - \frac{s}{r} \right| < \frac{1}{2^{2L+1}}, \quad (22.29e)$$

wobei s eine durch den Meßprozeß zufällig ausgewählte Zahl zwischen 0 und $r - 1$ ist. Hierdurch ist der Bruch s/r mit $r < 2^L$ eindeutig bestimmt.

6. Bestimme den Nenner r durch Darstellung von $k/2^t$ als Kettenbruch.

Zum Schluß wird geprüft, ob wirklich $x^r \bmod N = 1$ gilt. Ist dies der Fall, dann war der Algorithmus erfolgreich. Der Algorithmus kann aber aus folgenden zwei Gründen auch fehlschlagen:

- ▶ Erstens könnte $k/2^t$ eine schlechte Näherung an s/r sein. Dies geschieht mit der Wahrscheinlichkeit kleiner als ϵ , die durch Wahl eines genügend großen t (siehe oben) vernachlässigt werden kann.

- ▶ Zweitens könnten s und r einen gemeinsamen Teiler a besitzen. In diesem Fall liefert die Kettenbruchdarstellung den Nenner r/a anstelle von r . Die gewünschte Ordnung r kann dann durch mehrmaliges Wiederholen des obigen Algorithmus ermittelt werden [4].

Literaturverzeichnis

- [1] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics* (World Scientific, Singapore, 1998)
- [2] A. Messiah, *Quantenmechanik* (de Gruyter, Berlin, 1991)
- [3] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, 2007)
- [4] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000)
- [5] L. K. Grover, *Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack*, Physical Review Letters **79**, 325–328 (1997)
- [6] P. W. Shor, *Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer*, SIAM Journal on Computing **26**, 1484–1509 (1997)

Index

- Algorithmus
 - Quanten-
 - DEUTSCHS, 28
 - GROVER-Such-, 30
 - Ordnungsfindung, 32
 - Primfaktorzerlegung, 31
 - SHOR-, 31
- BLOCH-Darstellung, 24
- BLOCH-Kugel, 24
 - Rotation, 26
- BLOCH-Vektor, 24
- Bra-Vektor, 5
- Dekohärenz, 21
- Diagonalisierung, 17
- DIRAC-Schreibweise, 4
- Dualraum, 5
- Eigenwert, 11, 13
- Eigenzustand, 12, 14
 - Messung, 14
 - zum Eigenwert, 14
- Erwartungswert, 11
- HAMILTON-Operator, 15
- HILBERT-Raum
 - Quantenmechanik, 4
- Ket-Vektor, 5
- Kohärenzen, 21
- Korollar, 26
- Korrelationen, 20
- KRONECKER-Symbol, 6
- Matrix
 - Matrizelemente, 7
- Matrizen, 6
 - PAULI-, 23
- Meßprozeß, 13
 - Postulate, 13
- Messung
 - Eigenzustand, 14
 - Erwartungswert, 14
 - Standardabweichung, 14
- Unschärferelation, 14
- wiederholte, 14
- Norm, 5
- Observable, 11
- Operator
 - adjungierter, 7
 - Dichte-, 11
 - linearer, 6
 - Matrixdarstellung, 6
 - positiver, 7
 - selbstadjungierter, 7
 - idempotenter, 8
 - Spektralzerlegung, 8
 - Spektralzerlegung, 8
 - statistischer, 11
 - unitärer, 8
 - Zeitentwicklungs-, 16
- Operatoren
 - Tensorprodukt, 10
- Orakel, 30
- Ordnungsfindung, 32
- PAULI-Matrizen, 23
- Postulate
 - Meßprozeß, 13
 - physikalische, 11
- Primfaktorzerlegung, 31
- Produkt
 - dyadisches, 6
 - Skalar-, 5
- Projektor, 8
- Quanten-Algorithmen, 28
- Quanten-Fourier-Transformation, 28
- Quantencomputer, 23
- Quantenregister, 24
- Quantensystem, 4
 - Dimensionen, 9
 - offenes, 21
 - Zeitentwicklung, 15
 - zusammengesetztes, 18
- Qubit-Gatter, 25
 - 1-Qubit-, 25

- 1-Qubit-Gatter
 - Universalität, 28
- 2-Qubit-, 26
- 2-Qubit-Gatter
 - allgemein kontrolliertes, 27
 - beliebig kontrolliertes, 27
- CNOT-Gatter, 27
 - Universalität, 28
- Qubits, 23
 - Operationen, 25
- Raum
 - Dual-, 5
 - HILBERT-, 4
- Schreibweise
 - DIRAC-, 5
 - Matrix-, 5
- SCHRÖDINGER-Gleichung, 16
 - Eigenwertproblem, 17
 - Lösungsbeispiele, 17
 - stationäre, 17
- Skalarprodukt
 - HILBERT-Raum, 5
- Spur, 8
 - partielle, 10
- Superpositionsprinzip, 4
- Tensorprodukt, 9
 - Operatoren, 10
- Theorem
 - WIGNERSches, 8
- Übergangswahrscheinlichkeit, 5, 14
- Vektor
 - Bra-, 5
 - Ket-, 5
- Vektorraum, 4
- Verschränkung, 10, 20
- Wahrscheinlichkeitsamplitude, 4, 14
- Wellenfunktion, 4
- Zeitentwicklung
 - unitäre, 16
- Zustand
 - Definition, 11
 - gemischter, 12
 - klassisch korrelierter, 20
 - reduzierter, 20
 - reiner, 11
 - separabler, 20
- unkorrelierter, 20
- verschränkter, 20