Beispiel 1: Mathematischer Formalismus, Erwartungswerte, Wahrscheinlichkeiten

Im Hilbertraum $\mathbb{C}^3$ (3–dimensionaler unitärer Raum) ist eine **Orthonormalbasis** $\mathsf{E}_e = \{ \mid e_1\rangle, \mid e_2\rangle, \mid e_3\rangle\}$ mit $\langle e_j \mid e_k\rangle = \delta_{jk}$ gegeben. Der Hamiltonoperator $\mathbf{H}$ ist durch seine Wirkung auf die Elemente der Basis E_e definiert.

$$\begin{aligned}
\mathbf{H} \mid e_1\rangle &= \hbar\omega \left(\mid e_1\rangle + \tfrac{1+i}{\sqrt{3}} \mid e_2\rangle\right) \\
\mathbf{H} \mid e_2\rangle &= \hbar\omega \left(\tfrac{1-i}{\sqrt{3}} \mid e_1\rangle + \mid e_2\rangle\right) \\
\mathbf{H} \mid e_3\rangle &= \hbar\omega \, (1 + \sqrt{\tfrac{2}{3}}) \mid e_3\rangle
\end{aligned}$$

1. Berechne die Matrixdarstellung von $\mathbf{H}$ bezüglich der Basis E_e.
2. Zeige, dass $\mathbf{H}$ hermitesch ist.
3. Löse das Eigenwertproblem für $\mathbf{H}$, dh. gib seine Eigenwerte E_n und zugehörige orthonormierte Eigenzustände $\mid u_{nj}\rangle$ für $n = 1, 2, \ldots$ an, wobei der zusätzliche Index $j = 1, \ldots \mathrm{Ent}(E_n)$ die Entartung des Eigenwerts E_n berücksichtigt.
4. Ordne die Eigenwerte $E_n < E_{n+1}$ beginnend mit dem niedrigsten Eigenwert (E_1 = Grundzustandsenergie) und damit auch die zugehörigen Eigenzustände.
5. Berechne den Erwartungswert des Hamiltonoperators $\mathbf{H}$, wenn sich das System zum Zeitpunkt $t = 0$ im folgenden Zustand befindet:

$$\mid \boldsymbol{\Phi}\rangle = \mid e_2\rangle + i\sqrt{2} \mid e_3\rangle$$

6. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit den Eigenwert $\hbar\omega(1 + \sqrt{\frac{2}{3}})$ des Hamiltonoperators $\mathbf{H}$ zu messen, wenn sich das System zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $\mid \boldsymbol{\Phi}\rangle$ befindet?

Beispiel 2: Störungstheorie, Erwartungswerte

Im Hilbertraum $\mathbb{C}^3$ (3–dimensionaler unitärer Raum) ist eine **Orthonormalbasis** $\mathsf{E}_e = \{ \,|\, e_1\rangle, \,|\, e_2\rangle, \,|\, e_3\rangle\}$ mit $\langle e_j \,|\, e_k\rangle = \delta_{jk}$ gegeben. Der Hamiltonoperator $\mathbf{H}$ und die Störung dargestellt durch den Operator $\mathbf{W}$ sind durch ihre Wirkung auf die Elemente der Basis E_e definiert.

$$
\begin{aligned}
\mathbf{H} \,|\, e_1\rangle &= 3\hbar\omega \left(+4 \,|\, e_1\rangle + 3i \,|\, e_3\rangle \right) \\
\mathbf{H} \,|\, e_2\rangle &= 9\hbar\omega \,|\, e_2\rangle \\
\mathbf{H} \,|\, e_3\rangle &= 3\hbar\omega \left(-3i \,|\, e_1\rangle + 4 \,|\, e_3\rangle \right) \\
\hline
\mathbf{W} \,|\, e_1\rangle &= 0 \\
\mathbf{W} \,|\, e_2\rangle &= \hbar\omega \left(+3 \,|\, e_2\rangle - i \,|\, e_3\rangle \right) \\
\mathbf{W} \,|\, e_3\rangle &= \hbar\omega \left(+i \,|\, e_2\rangle + 3 \,|\, e_3\rangle \right)
\end{aligned}
$$

1. Berechne die Matrixdarstellung von $\mathbf{H}(\xi) = \mathbf{H} + \mathbf{W}(\xi)$ bezüglich der Basis E_e, wobei $\xi \in [0,1]$ und $\mathbf{W}(\xi) = \xi\,\mathbf{W}$ angenommen ist.

2. Löse das Eigenwertproblem für den ungestörten Hamiltonoperator $\mathbf{H}$, dh. gib seine Eigenwerte E_n und zugehörige orthonormierte Eigenzustände $|\, u_n\rangle$ für $n = 1, 2, 3$ an.

3. Berechne für die Grundzustandsenergie E_1 von $\mathbf{H}$ in 1.ter Ordnung zeitunabhängiger Störungstheorie die Energiekorrektur $\varepsilon_1^{(1)}(\xi)$. Verwende dabei

$$\varepsilon_n^{(1)}(\xi) = \langle u_n \,|\, \mathbf{W}(\xi) \,|\, u_n\rangle$$

4. Berechne für die Grundzustandsenergie E_1 von $\mathbf{H}$ in 2.ter Ordnung zeitunabhängiger Störungstheorie die Energiekorrektur $\varepsilon_1^{(2)}(\xi)$. Verwende dabei

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_n^{(2)}(\xi) &= \langle u_n \,|\, \mathbf{W}(\xi) \,|\, \chi_n^{(1)}\rangle \\
|\, \chi_n^{(1)}(\xi)\rangle &= \sum_{m\neq n} \frac{\langle u_m \,|\, \mathbf{W}(\xi) \,|\, u_n\rangle}{E_n(0) - E_m(0)} \,|\, u_m\rangle
\end{aligned}
$$

5. Berechne den Erwartungswert von $\mathbf{H}$, wenn sich das System zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $|\, \mathbf{\Phi}(a)\rangle = |\, e_2\rangle + a \,|\, e_3\rangle$ befindet, wobei $a \in \mathbb{C}$ ein beliebiger komplexer Parameter ist.

6. Wie muss der Parameter $a \in \mathbb{C}$ von $|\, \mathbf{\Phi}(a)\rangle$ gewählt werden, damit der Erwartungswert des ungestörten Hamiltonoperators $\mathbf{H}$ den Wert $9\hbar\omega$ ergibt?