Beispiel 1: Mathematischer Formalismus, Erwartungswerte, Wahrscheinlichkeiten

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 $\mathbf{H}$ ist durch seine Wirkung auf die Elemente der Basis E_e definiert.

$$\boxed{\begin{aligned} \mathbf{H} \,|\, e_1 \rangle &= \tfrac{\hbar\omega}{3} (1+2i) \,|\, e_2 \rangle \\ \mathbf{H} \,|\, e_2 \rangle &= \tfrac{\hbar\omega}{3} \big((1-2i) \,|\, e_1 \rangle - 2i \,|\, e_3 \rangle \big) \\ \mathbf{H} \,|\, e_3 \rangle &= \tfrac{\hbar\omega}{3} \, 2i \,|\, e_2 \rangle \end{aligned}}$$

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 $\,|\, u_n \rangle$ für $n = 1, 2, 3$ an.
4. Ordne die Eigenwerte $E_1 < E_2 < E_3$ beginnend mit dem niedrigsten Eigenwert (E_1 = Grundzustandsenergie) und damit auch die zugehörigen Eigenzustände $\,|\, u_n \rangle$ mit $n = 1, 2, 3$.
5. Gib die Matrixdarstellung von $\mathbf{H}$ bezüglich der Basis $\mathsf{E}_u = \{ \,|\, u_1 \rangle, \,|\, u_2 \rangle, \,|\, u_3 \rangle \}$, wobei $\,|\, u_n \rangle$ mit $n = 1, 2, 3$ die orthonormierten Eigenvektoren von $\mathbf{H}$ sind.
6. Berechne die Matrixdarstellung des Operators der zeitlichen Entwicklung $\mathbf{U}(t) = \exp\{ -i\frac{t}{\hbar}\mathbf{H} \}$ für $t > 0$ bezüglich der Basis $\mathsf{E}_u = \{ \,|\, u_1 \rangle, \,|\, u_2 \rangle, \,|\, u_3 \rangle \}$.
7. Berechne den Erwartungswert des Hamiltonoperators $\mathbf{H}$, wenn sich das System zum Zeitpunkt $t = 0$ im folgenden Zustand befindet:

$$\boxed{\,|\, \mathbf{\Phi}(0) \rangle = 2 \,|\, u_1 \rangle + (1-2i) \,|\, u_2 \rangle}$$

8. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit den Eigenwert $-\hbar\omega$ des Hamiltonoperators $\mathbf{H}$ zu messen, wenn sich das System zum Zeitpunkt $t > 0$ im Zustand $\,|\, \mathbf{\Phi}(t) \rangle = \mathbf{U}(t) \,|\, \mathbf{\Phi}(0) \rangle$ 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.

$$
\begin{aligned}
\mathbf{H} \, |e_1\rangle &= \hbar\omega \, (2+i) \, |e_2\rangle \\
\mathbf{H} \, |e_2\rangle &= \hbar\omega \, \big((2-i) \, |e_1\rangle + 2i \, |e_3\rangle\big) \\
\mathbf{H} \, |e_3\rangle &= \hbar\omega \, (-2i) \, |e_2\rangle \\
\hline
\mathbf{W} \, |e_1\rangle &= \hbar\omega \, \big(|e_1\rangle - \sqrt{2}i \, |e_3\rangle \big) \\
\mathbf{W} \, |e_2\rangle &= \hbar\omega \, \big(2 \, |e_2\rangle \big) \\
\mathbf{W} \, |e_3\rangle &= \hbar\omega \, \big(\sqrt{2}i \, |e_1\rangle - |e_3\rangle \big)
\end{aligned}
$$

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 den Erwartungswert von $\mathbf{H}(\xi)$ mit $\xi = \frac{1}{2}$, wenn sich das System zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $|\mathbf{\Phi}\rangle = |e_2\rangle + \sqrt{3} \, |e_3\rangle$ befindet,