12.12.07

Schmidt - Zerlegung

$$|\psi\rangle = \sum_{ab} c_{ab} \, |a\rangle \otimes |b\rangle$$

verschränkter Zustand

Matrix

$\{|a\rangle\}$ VOS in $\mathcal{H}_A$

$\{|b\rangle\}$ VOS in $\mathcal{H}_B$

schreiben als

$$= \sum_n \lambda_n |\alpha_n\rangle \otimes |\beta_n\rangle$$

Singulärwertzerlegung

Matrix C, Elemente C_{ab}

$$C = U D V, \quad U, V \text{ unitär}$$

$$D = \mathrm{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$$

$$\lambda_i \geq 0$$

$$N = \dim \mathcal{H}_A = \dim \mathcal{H}_B .$$

$$|\alpha_n\rangle = \sum_a U_{an} |a\rangle$$

Basistrafo

$$|\beta_n\rangle = \sum_b V_{nb} |b\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \sum_{abn} \underbrace{U_{an} D_n V_{nb}}_{C_{ab}} |a\rangle \otimes |b\rangle$$

$$= \sum_n \lambda_n \underbrace{|\alpha_n\rangle \otimes |\beta_n\rangle}_{\text{Schmidt-Zerlegung}}$$

- statt Doppelsumme $\sum_{ab} c_{ab} |a\rangle |b\rangle$
  jetzt Einfachsumme
- reduzierte Dichtematrix, $Tr_B |\psi\rangle\langle\psi|$

$$\rho_A = \sum_n \lambda_n^2 |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n|$$

$$\rho_B = \sum_n \lambda_n^2 |\beta_n\rangle\langle\beta_n|$$

Quadrate der Schmidt-Koeff. als Diagonalelemente von ρ_A und ρ_B.

<u>Def.:</u> (Schmidt-Zahl). Die Anzahl der von Null verschiedenen Eigenwerte λ_n in der Schmidt-Zerlegung heißt <u>Schmidt-Zahl</u>, n_S.

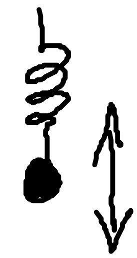
Falls $n_S = 1$, ist der Zustand separabel: $|\psi\rangle = \lambda_1 |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$

Falls $n_S > 1$, ist der Zustand verschränkt.

KAPITEL 5: Störungstheorie

5.1. Zeitunabhängig

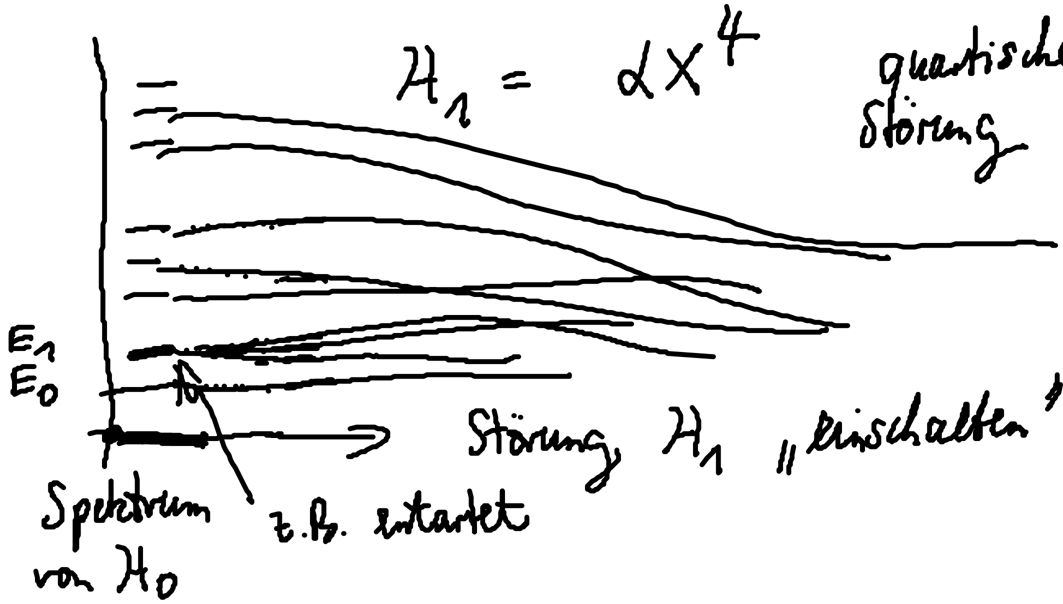
$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{bekannt}} + \lambda \cdot \underbrace{\hat{H}_1}_{\text{kleine Störung}} \qquad 0 \le \lambda \le 1$$



Matrix $\begin{pmatrix} & & \\ & H_0 & \\ & & \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} & & \\ & H_1 & \\ & & \end{pmatrix}$

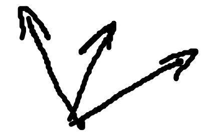
Beispiel: $$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$
$$= \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$$

$$H_1 = \alpha x^4$$ quartische Störung



Idee: Für „kleine" $\hat{H}_1$ ändert sich das Spektrum nur wenig.

Sei $\mathcal{H}_0 |i\nu\rangle = \varepsilon_i |i\nu\rangle$ $\quad i = 1, 2, \ldots$
$\nu = 1, \ldots, d_i$



(d_i : Entartung des i-ten Eigenwertes.)

bekannt.

$|i\nu\rangle$ als VOS in $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \ldots$
(orthogonale Teilräume).

5.1.1. Projektor-Methode

(Lit: Scherz) $\quad$ Betrachte festes ε_b,

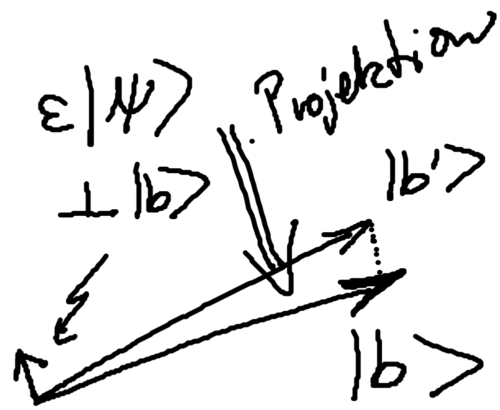
$$\mathcal{H}_0 |b\nu\rangle = \varepsilon_b |b\nu\rangle \qquad (*)$$
$$\nu = 1, \ldots, d$$

1) $h \equiv \mathcal{H} - \varepsilon_b \hat{1}$; $\quad h_0 \equiv \mathcal{H}_0 - \varepsilon_b \hat{1}$;

$$\varepsilon \equiv E - \varepsilon_b$$

Wollen $\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ lösen.

$$\Longrightarrow \quad h|\psi\rangle = (h_0 + H_1)|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle$$



Definiere $\hat{P} \equiv \sum_{\nu=1}^{d} |b\nu\rangle\langle b\nu|$

Projektor, $\hat{P}^2 = \hat{P}$; $\quad \hat{Q} = 1 - \hat{P}$

$$1 = \hat{P} + \hat{Q}$$

$$\hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P} = 0 .$$

Weiterhin: $[\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{P}] = [h_0, P] = [H_0, Q] = [h_0, Q] = 0 .$

$$\left(\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{i\nu} \varepsilon_i |i\nu\rangle\langle i\nu| \right).$$

$$h_0 Q|\psi\rangle = Q h_0|\psi\rangle = Q(\varepsilon - \mathcal{H}_1)|\psi\rangle \qquad (*)$$

Im Teilraum $\mathcal{H} \ominus \mathcal{H}_b$, $\mathcal{H}_b = \mathrm{span}\{|b\nu\rangle\}$

läßt sich h_0 invertieren:

$$h_0^{-1} = \frac{1}{\mathcal{H}_0 - \varepsilon_b} \equiv [\mathcal{H}_0 - \varepsilon_b]^{-1}$$

$$= -\frac{1}{\varepsilon_b} \frac{1}{1 - \frac{H_0}{\varepsilon_b}} = -\frac{1}{\varepsilon_b} \left(1 + \frac{1}{\varepsilon_b} H_0 + \frac{1}{\varepsilon_b^2} H_0^2 + \dots \right)$$

$$\varepsilon_b \neq 0 .$$

Definiert für Kets aus $\mathcal{H} \ominus \mathcal{H}_b$

$$\Rightarrow Q|\psi\rangle = h_0^{-1} Q(\varepsilon - \mathcal{H}_1)|\psi\rangle \qquad / \; Q \text{ von links}$$

$$Q|\psi\rangle = \underbrace{Q h_0^{-1} Q}\, (\varepsilon - \mathcal{H}_1)|\psi\rangle \qquad Q^2 = Q$$

$$R(\varepsilon_b) \equiv Q \frac{1}{H_0 - \varepsilon_b} Q \qquad \text{Resolvente (Pseudo-Inverse)}$$

Umschreibung

$$Q|\psi\rangle = R(\varepsilon_b)(\varepsilon - \mathcal{H}_1)|\psi\rangle \qquad \Leftrightarrow \qquad (Q = 1 - P)$$

$$|\psi\rangle = P|\psi\rangle + R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)|\psi\rangle \qquad (**)$$

$$\overset{(**)}{=} P|\psi\rangle + R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)\left[P|\psi\rangle + R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)\underline{|\psi\rangle}\right]$$

$$\overset{(**)}{=} \sum_{n=0}^{\infty}\left[R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)\right]^n P|\psi\rangle$$

5.1.2. Auswertung für die Eigenwerte

$$(h_0 + \mathcal{H}_1)|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle \qquad \hat{P}$$

$$\varepsilon\hat{P}|\psi\rangle = \hat{P}(h_0 + \mathcal{H}_1)|\psi\rangle = \underbrace{h_0\hat{P}|\psi\rangle}_{0,} + PH_1|\psi\rangle$$

denn $P|\psi\rangle$ liegt in $\mathcal{H}_b$ und $h_0 = H_0 - \varepsilon_b \mathbb{1}$.

$$\Rightarrow \quad \varepsilon\hat{P}|\psi\rangle = \hat{P}\mathcal{H}_1\sum_{n=0}^{\infty}\left(R(\varepsilon_n)(\varepsilon - H_1)\right)^n P|\psi\rangle. \qquad (*)$$

$$\varepsilon = E - \varepsilon_b = \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + \varepsilon^{(3)} + \ldots$$

mit $\varepsilon^{(i)} = O(H_1^i)$

Formal $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1$, $\lambda \in \mathbb{R}$

$$\varepsilon = \lambda\, \varepsilon^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon^{(2)} + \lambda^3 \varepsilon^{(3)} + \dots$$

5.1.2.1. Erste Ordnung (Energien).

In Ordnung $O(\mathcal{H}_1)$ erhält man

(ε in * einsetzen).

$$\varepsilon^{(1)} \underbrace{\hat{P}|\Psi\rangle}_{} = \hat{P} H_1 \underbrace{\hat{P}|\Psi\rangle}_{}$$ 1. Ordn. || Eigenwert-gleichung

$A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$

$$\Leftrightarrow \quad \sum_{\nu=1}^{d} |b\nu\rangle\langle b\nu| \left[\hat{H}_1 \sum_{\nu'=1}^{d} |b\nu'\rangle\langle b\nu'| - \varepsilon^{(1)} \right] |\Psi\rangle = 0$$

$\langle b\mu|$ $\qquad$ $/ \langle b\mu|$

$$\sum_{\nu'=1}^{d} \langle b\mu | \hat{H}_1 | b\nu' \rangle \langle b\nu' | \Psi \rangle - \varepsilon^{(1)} \langle b\mu | \Psi \rangle = 0 \quad *$$

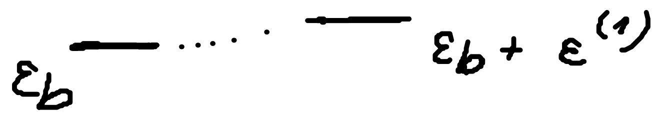
Eigenwertgleichung für d Eigenwerte $\varepsilon^{(1)}$ und Eigenvektoren $|\Psi_i\rangle$ im Teilraum $\mathcal{H}_b$.

PH_1P : $\quad d \times d$ Matrix (hermitsch)

Fall $d=1$: keine Entartung

$$\langle b | H_1 | b \rangle \underbrace{\langle b | \Psi \rangle}_{} - \varepsilon^{(1)} \langle b | \Psi \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\varepsilon^{(1)} = \overbrace{\langle b | H_1 | b \rangle}^{\neq 0}} \qquad \begin{pmatrix} \cdot & & \\ & \cdot & \\ & & \bullet \end{pmatrix}$$

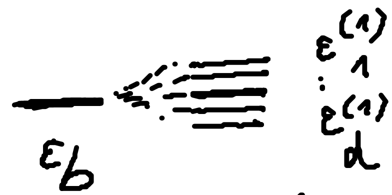


Mittelwert (Erwartungswert) der Störung im Zustand $|b\rangle$

$$\varepsilon^{(1)} = \int d^3x \, \psi_b^*(x) \, H_1 \, \psi_b(x)$$

z.B. $\quad H_1 = \alpha x^4$.

Fall $d > 1$:



i.A. keine vollständige Aufspaltung, falls die $\varepsilon^{(1)}$ entartet sind.