Übungen zur Quantenmechanik (T2)

Übungsblatt 10, Besprechung vom 20.12 – 7.01

Aufgabe 1 – Kurzfragen

Betrachten Sie für eine Wellenfunktion $\Psi_t \in \mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ die Wahrscheinlichkeit das beschriebene Punktteilchen zum Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}$ an einem beliebigen Ort $q \in M$ anzutreffen:

$$\text{Wahr}_{\Psi_t}\{q \in M\} := \int_M \mathrm{d}^3q |\Psi_t(q)|^2_{\mathbb{C}}$$

(i) Inwiefern ändert sich diese Wahrscheinlichkeit für $M = \mathbb{R}^3$ unter folgenden Operationen:

a) Translation: $\Psi_t(q) \to \Psi_t(q + a)$

b) Rotation: $\Psi_t(q) \to \Psi_t(Rq)$

c) Globale Phase: $\Psi_t(q) \to \Psi_t(q)e^{i\phi}$ mit $\phi \in \mathbb{R}$

(ii) Wählen Sie nun $M = \mathbb{R}$ und $\Psi_t(q) = Ne^{-\frac{(q-q_0)^2}{2\sigma^2}}$ mit $\sigma \in \mathbb{R}$.

a) Normieren Sie die Wellenfunktion, sodass die Wahrscheinlichkeit das Teilchen irgendwo zu finden 1 ist.

b) Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in M bzw. in $N = \{q \in \mathbb{R}| -1 < q < 1\}$ zu finden.

c) Berechnen Sie die Varianz des Ortsoperators der Wellenfunktion.

d) Wiederholen Sie a)-c) für $\Psi_t(q)$ unter Anwendung einer Translation und globalen Phase.

(iii) Zeigen Sie mithilfe der Kurzfragen von Blatt 9 folgende Identitäten

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{[A,B]}{2}}$$
$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]}$$

für die Operatoren A und B falls $\big[A, [A, B]\big] = \big[B, [B, A]\big] = 0$ gelte.

Solution

(i) a) Under translations $\psi_t(q) \to \psi_t(q+a)$, we can shift the integration variable $q \to q-a$, and since the measure is translationally invariant, and we integrate over all of $\mathbb{R}^3$, the integral stays unchanged, i.e. we have

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3q \,|\psi_t(q+a)|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3(q-a)\,|\psi_t(q-a+a)|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3q\,|\psi_t(q)|^2 .$$

b) Rotations $q \to Rq$ with a matrix $R \in SO(3)$ have determinant 1, and the measure transforms as $\mathrm{d}q' = \mathrm{d}q \det R$, so it is also rotationally invariant and the probability stays the same.

c) Since the probability depends on the absolute value of ψ_t, it does not change under a global phase.

(ii) a) We compute

$$\langle \psi_t \,|\, \psi_t \rangle = \int \mathrm{d}q \; |N|^2 \, e^{-\frac{(q-q_0)^2}{\sigma^2}} = |N|^2 \sqrt{\pi}\sigma,$$

so we can choose $N = \pi^{-\frac{1}{4}} \sigma^{-\frac{1}{2}}$.

b) The probability is given by

$$P(N) = \int_{-1}^{1} \mathrm{d}q \; \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} e^{-\frac{(q-q_0)^2}{\sigma^2}}.$$

c) We first compute

$$\langle Q \rangle = \int \mathrm{d}q \; \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} q e^{-\frac{(q-q_0)^2}{\sigma^2}} = \int \mathrm{d}q \; \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} (q + q_0) e^{-\frac{(q-q_0)^2}{\sigma^2}} = q_0.$$

The expectation value of Q^2 is given by

$$\langle Q^2 \rangle = \int \mathrm{d}q \; \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} q^2 e^{-\frac{(q-q_0)^2}{\sigma^2}} = \int \mathrm{d}q \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} (q^2 + 2qq_0 + q_0^2) e^{-\frac{(q-q_0)^2}{\sigma^2}} = \frac{1}{2}\sigma^2 + q_0^2.$$

The variance is thus given by

$$\mathrm{Var}(Q) = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2 = \frac{1}{2}\sigma^2 + q_0^2 - q_0^2 = \frac{1}{2}\sigma^2.$$

d) The phase does not change any result. The translation changes b) and c), we can see the effect by changing $q_0 \to q_0 + a$.

(iii) We start with the first identity. To show this, we define a function

$$F(\alpha) = e^{\alpha A} e^{\alpha B},$$

and compute the derivative with respect to α. We find

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha} F(\alpha) = AF(\alpha) + e^{\alpha A} B e^{\alpha B} = AF(\alpha) + BF(\alpha) + [e^{\alpha A}, B] e^{\alpha B} = (A + B + \alpha[A, B]) F(\alpha),$$

where we used the identity from last sheet, $e^A B e^{-A} = B + [A, B]$ (since the higher orders vanish by assumption), so that

$$e^{\alpha A} B = B e^{\alpha A} + [\alpha A, B] e^{\alpha A} \Rightarrow [e^A, B] = \alpha [A, B].$$

Integrating the first equation for $F'(\alpha)$, we find that

$$F(\alpha) = e^{\alpha A + \alpha B + \frac{1}{2}\alpha^2 [A,B]},$$

so in particular

$$e^A e^B = e^{A + B + \frac{1}{2}[A,B]}.$$

Note that this implies that for $[A, B] = 0$, we have $e^A e^B = e^{A+B}$, so since $[A, [A, B]] = [B, [B, A]] = 0$, we can write this again as a product, namely

$$e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]} = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]}.$$

To show the second identity, we use the first one. We have

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]} = e^{B+A+\frac{1}{2}[B,A]} e^{-\frac{1}{2}[B,A]} e^{\frac{1}{2}[A,B]} = e^B e^A e^{[A,B]},$$

where we used again that $[A, [A, B]] = [B, [B, A]] = 0$.

Aufgabe 2 – Infinitesimale Rotationen

Versuchen Sie, diese Aufgabe soweit wie möglich in Indexnotation zu lösen, d.h. ohne eine Darstellung als Spaltenvektor zu wählen.
Betrachten Sie im Folgenden die infinitesimale Rotation eines Einheitsvektors $e_i \to e'_i = R_{ij} e_j$ um einen Winkel $\delta\phi$ um eine Achse $\boldsymbol{n}$.

(i) Zeigen Sie, dass die Rotationsmatrix durch

$$R_{ij} = \delta_{ij} + \delta\phi \varepsilon_{ijk} n_k \tag{1}$$

gegeben ist.
Hinweis: Nutzen Sie, dass für rechtshändige Koordinatensysteme $e_i \times e_j = \varepsilon_{ijk} e_k$ gilt.

Wir wissen aus dem letzten Blatt, dass diese Rotationen durch drei unabhängige Generatoren erzeugt werden, welche wir im Folgenden mit T^a, $a = 1, 2, 3$ bezeichnen. Wir wählen diese als die infinitesimalen Rotationen um die x-, y- und z-Achse. Wir wählen im Folgenden hermitesche Generatoren, d.h. wir definieren die infinitesimale Rotation um die Achse a als

$$R_{ij} = \delta_{ij} + i\delta\phi_a (T^a)_{ij},$$

wobei $\delta\phi_a = \delta\phi n_a$ und $(T^a)_{ij}$ die ij-Komponente von T^a ist.

(ii) Bestimmen Sie die Form von $(T^a)_{ij}$ in dieser Konvention durch Vergleichen mit (1).

(iii) Berechnen Sie die Kommutatorrelation $[T^a, T^b]$.

Als nächstes möchten wir infinitesimale Rotationen verknüpfen, um endliche Rotationen zu erhalten.

(iv) Zeigen Sie, dass für die Verknüpfung zweier infinitesimaler Rotationen mit $\delta\phi_a^1$ und $\delta\phi_a^2$ gilt

$$R_{ij} = \delta_{ij} + i\left(\delta\phi_a^1 + \delta\phi_a^2\right)(T^a)_{ij}.$$

Die Verknüpfung infinitesimaler Rotationen entspricht also einfach der Addition beider infinitesimaler Transformationen. Dies gilt im Allgemeinen **nicht** für endliche Rotationen.
Nun werden wir eine Rotation um einen endlichen Winkel ϕ_a durch Verknüpfung infinitesimaler Rotationen beschreiben. Betrachten Sie hierfür zunächst eine Rotation um die x-Achse um Winkel ϕ. Diese Rotation entspricht dem Produkt infinitesimaler Rotationen mit Winkel $\delta\phi$ um die x-Achse, gegeben durch

$$R(\phi) = \lim_{N\to\infty} \left(\mathbb{1} + \frac{i}{N}\phi T^1\right)^N, \tag{2}$$

wobei $\delta\phi = \lim\limits_{N\to\infty} \frac{1}{N}\phi$.

(v) Zeigen Sie, dass die in (2) definierte Darstellung äquivalent zur Exponentialdarstellung auf dem letzten Blatt ist, d.h.

$$R(\phi) = \exp(i\phi T^1).$$

(vi) Zeigen Sie auf diesem Weg, dass die Rotation um Winkel θ um eine beliebige Achse $\boldsymbol{n}$ beschrieben wird durch

$$R_{\boldsymbol{n}}(\theta) = \exp(i\theta_a T^a), \text{wobei } \theta_a = \theta n_a.$$

(vii) Zeigen Sie, dass die so definierten Rotationsmatrizen orthogonal sind.

(viii) Gilt für endliche Rotationen immer noch

$$\exp(i\phi_a T^a)\exp(i\theta_b T^b) = \exp(i(\phi_a + \theta_a)T^a)?$$

Solution

(i) The new vector is given by $e'_i = e_i + \delta e_i$. Geometrically, we see that $\delta e_i \sim \boldsymbol{n} \times e_i$ with length $|\delta e_i| = L\delta\phi$ in small angle approximation, $L = \|e_i - \boldsymbol{n} \cdot e_i\|$. Thus we see that $\delta e_i = \delta\phi \boldsymbol{n} \times e_i$. A small computation shows

$$\delta e_i = \delta\phi n_k e_k \times e_i = \delta\phi n_k \varepsilon_{kij} e_j.$$

We see that we can rewrite the transformation as

$$e'_i = \left(\delta_{ij} + \delta\phi n_k \varepsilon_{ijk}\right) e_j,$$

from which we read off the infinitesimal rotation as

$$R_{ij} = \delta_{ij} + \delta\phi_k \varepsilon_{ijk},$$

where we defined $\delta\phi_k = \delta\phi n_k$.

(ii) We see that $T^a_{ij} = -i\varepsilon_{ija}$.

(iii) The commutation relation is given by

$$[T^a, T^b] = i\varepsilon_{abc} T^c,$$

as can be seen from

$$\begin{aligned}
[T_a, T_b] &= -\varepsilon_{ika}\varepsilon_{kjb} + \varepsilon_{ikb}\varepsilon_{kja} \\
&= \delta_{ij}\delta_{ab} - \delta_{ib}\delta_{ja} - \delta_{ij}\delta_{ab} + \delta_{ia}\delta_{jb} \\
&= \delta_{ia}\delta_{jb} - \delta_{ib}\delta_{ja} \\
&= \varepsilon_{cij}\varepsilon_{cab} \\
&= i\varepsilon_{abc}(T_c)_{ij}.
\end{aligned}$$

(iv) We compute to first order in $\delta\phi^i$

$$\begin{aligned}
R_{ik}R_{kj} &= (\delta_{ik} + \delta\phi^1_a T^a_{ik})(\delta_{kj} + \delta\phi^2_a T^a_{kj}) \\
&= \delta_{ij} + \delta\phi^1_a T^a ij + \delta\phi^2_a T^a_{ij} + \mathcal{O}\left((\delta\phi^i)^2\right).
\end{aligned}$$

(v) This is simply the limit definition of $e^{i\phi T^1}$. We can check this explicitly, be first showing this for a real number x and e^x.
We start from the definition of e as a limit, $e = \lim_{n\to\infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n$. This implies

$$e^x = \lim_{n\to\infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{nx}.$$

We want to show that this is equivalent to the series representation, by using the binomial theorem. To justify using the theorem, we must make sure that the exponent is an integer, so we will use the floor of nx, defined as $\lfloor nx \rfloor = \max\{m \in \mathbb{Z}\colon m \leq nx\}$. Note that for the floor, we have $0 \leq nx - \lfloor nx \rfloor < 1$, so we can write

$$\lim_{n\to\infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{nx} = \lim_{n\to\infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{\lfloor nx \rfloor} \lim_{n\to\infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{nx - \lfloor nx \rfloor} = \lim_{n\to\infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{\lfloor nx \rfloor},$$

since the exponent in the last term converges to 0. We now use the binomial theorem, which states

$$\left(1 + \frac{1}{n}\right)^{\lfloor nx \rfloor} = \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \binom{\lfloor nx \rfloor}{k} \frac{1}{n^k} = \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \frac{1}{k!} \frac{P(\lfloor nx \rfloor, k)}{n^k},$$

where we defined $P(\lfloor nx \rfloor, k) = \frac{(\lfloor nx \rfloor)!}{(\lfloor nx \rfloor - k)!}$. Note that by construction, we have

$$0 \leq \frac{P(\lfloor nx \rfloor, k)}{n^k} \leq x^k,$$

since $P(\lfloor nx \rfloor, k) = \frac{(\lfloor nx \rfloor)^k}{n^k} - \frac{(\lfloor nx \rfloor^{k-1})}{n^k} - \dots$.
We now want to show that this converges to $\sum_k \frac{x^k}{k!} = \exp(x)$. Note that $\frac{P(\lfloor nx \rfloor, k)}{n^k} \to x^k$ as $n \to \infty$, so we can find $N \in \mathbb{N}$ such that for all $n > N$ we have

$$0 \leq \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{k!} \left(x^k - \frac{P(\lfloor nx \rfloor, k)}{n^k} \right) < \frac{\varepsilon}{2}.$$

Since the series $\sum_k \frac{x^k}{k!}$ is absolutely convergent, we can also find

$$0 \leq \sum_{k=N}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(x^k - \frac{P(\lfloor nx \rfloor, k)}{n^k} \right) < \frac{\varepsilon}{2}.$$

Combining this, we find

$$0 \leq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(x^k - \frac{P(\lfloor nx \rfloor, k)}{n^k} \right) < \varepsilon.$$

In other words,

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{P(\lfloor nx \rfloor, k)}{n^k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}.$$

So indeed,

$$e^x = \lim_{n\to\infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{nx} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{k!} \frac{P(\lfloor nx \rfloor, k)}{n^k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = \exp(x).$$

To extend this for matrices is now non-trivial, but we can diagonalise T_1 and use this result for the entries.

(vi) Since infinitesimal rotations are simply added, this follows immediately.

(vii) The combination iT^a_{ij} is antisymmetric, so $e^{i\phi_a T^a} = e^{\phi A}$ with some antisymmetric A, and we see immediately that this matrix satsifies $\left(e^{\phi A}\right)^T = e^{-\phi A}$, which is the inverse matrix. So it is, in fact, orthogonal.

(viii) It does not hold in general, also cf. Ex. 1 (iii).

Aufgabe 3 – Spin-Algebra Teil I

In der folgenden Aufgabe werden wir die im Stern-Gerlach Experiment verwendeten Eigenzustände von S_z weiter analysieren. Wir betrachten die Spin-Operatoren S_x, S_y und S_z mit $[S_i, S_j] = i\varepsilon_{ijk}S_k$. Zusätzlich betrachten wir den Operator $\boldsymbol{S}^2$, welcher mit allen Spin-Operatoren kommutiert, d.h. $[\boldsymbol{S}^2, S_i] = 0$ (vgl. Blatt 4), sowie die Operatoren S_+ und S_-, definiert als (vgl. Blatt 3)

$$S_+ = S_x + iS_y, \qquad S_- = S_x - iS_y.$$

(i) Berechnen Sie die Kommutatoren $[S_+, S_-]$, $[\boldsymbol{S}^2, S_\pm]$ sowie $[S_z, S_\pm]$.

(ii) Schreiben Sie den Operator $\boldsymbol{S}^2$ mittels $S_\pm$, S_z.

Da die Operatoren $\boldsymbol{S}^2$ und S_z kommutieren, besitzen sie eine simultane Eigenbasis. Wir bezeichnen diese Eigenvektoren als $|\,\lambda, \mu\rangle$, so dass

$$\begin{aligned} \boldsymbol{S}^2\,|\,\lambda,\mu\rangle &= \lambda\,|\,\lambda,\mu\rangle\,, \\ S_z\,|\,\lambda,\mu\rangle &= \mu\,|\,\lambda,\mu\rangle\,. \end{aligned}$$

(iii) Zeigen Sie, dass es zu $\lambda \in \mathbb{R}^+$ ein maximales und ein minimales $\mu_{\max}$ bzw. $\mu_{\min}$ gibt, da $\mu^2 \leq \lambda$. Betrachten Sie hierfür $\langle \lambda, \mu\,|\,\boldsymbol{S}^2 - S_z^2\,|\,\lambda,\mu\rangle$.

Im Folgenden bezeichnen wir den maximalen Eigenwert $\mu_{\max} = s$ und den minimalen $\mu_{\min} = s'$.

(iv) Bestimmen Sie die Wirkung von $S_\pm$ auf einen Zustand $|\,\lambda,\mu\rangle$. Wie verändert sich der Eigenwert λ, wie der Eigenwert μ?

(v) Zeigen Sie, dass die Anwendung von S_+ auf den Zustand mit maximalem $\mu = s$, bzw. S_- auf den mit minimalem $\mu = s'$ den Nullvektor ergeben muss, d.h.

$$S_+\,|\,\lambda, s\rangle = 0, \quad S_-\,|\,\lambda, s'\rangle = 0.$$

(vi) Überzeugen Sie sich, dass die Differenz $s - s'$ ganzzahlig ist.

(vii) Bestimmen Sie die Wirkung von $\boldsymbol{S}^2$ in der Darstellung durch $S_\pm$, S_z aus (ii) auf die Zustände mit maximalem $\mu = s$ bzw. minimalem $\mu = s'$, und zeigen Sie, dass $\lambda = s(s+1) = s'(s'-1)$.

(viii) Nutzen Sie diese Gleichung, um eine Relation zwischen s und s' herzuleiten. Wie viele verschiedene Eigenwerte von S_z gibt es für ein gegebenes s?

(ix) Folgern Sie daraus, dass s ganz- oder halbzahlig sein muss.

Es ist Konvention, die S_z Eigenwerte durch m, sowie die Eigenzustände von $\boldsymbol{S}^2$ durch das maximale s und die Relation $\lambda(s)$ zu bezeichnen, d.h.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{S}^2\,|\,s,m\rangle &= s(s+1)\,|\,s,m\rangle\,, \\ S_z\,|\,s,m\rangle &= m\,|\,s,m\rangle\,. \end{aligned}$$

Solution

(i) We compute

$$\begin{aligned} [S_+, S_-] &= [S_x + iS_y, S_x - iS_y] = -i[S_x, S_y] + i[S_y, S_x] = -2i[S_x, S_y] = 2S_z \\ [\boldsymbol{S}^2, S_\pm] &= [\boldsymbol{S}^2, S_x \pm iS_y] = 0 \\ [S_z, S_\pm] &= [S_z, S_x \pm iS_y] = [S_z, S_x] \pm i[S_z, S_y] = iS_y \pm S_x = \pm S_\pm. \end{aligned}$$

(ii) Using

$$S_+S_- = S_x^2 + S_y^2 - i[S_x, S_y] = \boldsymbol{S}^2 - S_z^2 + S_z,$$

the operator $\boldsymbol{S}^2$ can be written as

$$\boldsymbol{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = S_+S_- - S_z + S_z^2.$$

(iii) We know

$$\langle \lambda, \mu \,|\, \boldsymbol{S}^2 - S_z^2 \,|\, \lambda, \mu \rangle = \langle \lambda, \mu \,|\, S_x^2 + S_y^2 \,|\, \lambda, \mu \rangle \geq 0,$$

since this is a positive operator (we can write it as $A^\dagger A$, since both operators are Hermitian). This immediately implies

$$\lambda - \mu^2 \geq 0 \;\Rightarrow \mu^2 \leq \lambda.$$

(iv) From the commutation relations, we know that the eigenvalue λ is not affected by $S_\pm$, as they commute with $\boldsymbol{S}^2$. We compute for the S_z eigenvalue

$$S_z S_\pm \,|\, \lambda, \mu \rangle = S_\pm S_z \,|\, \lambda, \mu \rangle + [S_z, S_\pm] \,|\, \lambda, \mu \rangle = (\mu \pm 1) S_\pm \,|\, \lambda, \mu \rangle \,,$$

so $S_\pm$ raise/lower the eigenvalue of S_z by 1. This is why they are called raising and lowering operators.

(v) We know that $\mu^2 < \lambda$. Consider the state with maximal eigenvalue $\mu = s$. Then

$$S_+ \,|\, \lambda, s \rangle \sim \,|\, \lambda, s+1 \rangle \,,$$

which cannot be, since $(s+1)^2 > \lambda^2$ (if it is not larger, then s is not maximal). So the only option is for S_+ to annihilate this state. Similarly we must have $S_- \,|\, \lambda, s' \rangle = 0$ for the minimal eigenvalue.

(vi) Since the states $|\, \lambda, s \rangle$ and $|\, \lambda, s' \rangle$ are related by applying the lowering a number of times, we conclude that $s - s'$ is an integer.

(vii) We first compute

$$\begin{aligned} 0 &= S_- S_+ \,|\, \lambda, s \rangle = (\boldsymbol{S}^2 - S_z^2 - S_z) \,|\, \lambda, s \rangle = (\lambda - s^2 - s) \,|\, \lambda, s \rangle \,, \\ 0 &= S_+ S_- \,|\, \lambda, s' \rangle = (\boldsymbol{S}^2 - S_z^2 + S_z) \,|\, \lambda, s' \rangle = (\lambda - (s')^2 + s') \,|\, \lambda, s' \rangle \,, \end{aligned}$$

from which we see that $\lambda = s(s+1)$ and $\lambda = s'(s'-1)$.

(viii) Since the above relations are for the same eigenvalue λ, we find the relation

$$s(s+1) = s'(s'-1),$$

which has the solutions $s' = -s$ and $s' = s+1$. Since $s > s'$, the second one cannot be, and we find $s' = -s$. For a given s, we thus have $2s+1$ different m. (In the conventions defined at the end).

(ix) Since $s - s'$ is integer, we have $2s \in \mathbb{N}_0$, so s must be integer or half-integer.