Prof. Dr. Stefan Hofmann Wintersemester 2018/19

Übungen zur Quantenmechanik (T2)

Übungsblatt 4, Besprechung vom 08.11. – 15.11.

Aufgabe 1 – Kurzfragen

(i) Seien $\{|\,\alpha^{(i)}\rangle\}$ und $\{|\,\beta^{(i)}\rangle\}$ zwei verschiedene Orthonormalbasen eines endlich-dimensionalen Hilbertraums $\mathscr{H}$ mit $i \in \{1, 2, \dots \dim(\mathscr{H})\}$. Die Matrix U beschreibe den zugehörigen Basiswechsel

$$\left|\,\alpha^{(i)}\right\rangle = U \left|\,\beta^{(i)}\right\rangle .$$

Zeigen Sie, dass U unitär ist.

(ii) Auf dem letzten Übungsblatt haben Sie die sogenannten Pauli-Matrizen σ_i hergeleitet, definiert als

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Zeigen Sie, dass $\sigma_i^2 = \mathbb{1}$ für $i = 1, 2, 3$. Zeigen Sie weiterhin, dass diese Matrizen die Kommutator- und Antikommutatorrelationen

$$[\sigma_i, \sigma_j] = \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$$
$$[\sigma_i, \sigma_j]_+ = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}\mathbb{1}$$

erfüllen. Die Spin-Operatoren auf dem letzten Blatt waren gegeben durch $S_i = \frac{1}{2}\sigma_i$. Wie lautet die Kommutatoralgebra der Spin-Operatoren? Erklären Sie anhand der Algebra, wieso der Spin als Eigendrehimpuls bezeichnet wird. Zeigen Sie abschließend, dass für $\boldsymbol{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ die Kommutatorrelation

$$[\boldsymbol{S}^2, S_i] = 0,$$

gilt.

Solution

(i) The change of basis is given by the operator $U = \sum_k |\,\alpha^{(k)}\rangle\langle\beta^{(k)}\,|$, as we can verify by computing

$$U\left|\,\beta^{(i)}\right\rangle = \sum_k \left|\,\alpha^{(k)}\right\rangle\left\langle\beta^{(k)}\,|\,\beta^{(i)}\right\rangle = \left|\,\alpha^{(i)}\right\rangle.$$

We can see that this operator is unitary by computing

$$\begin{aligned} U^\dagger U &= \sum_k \sum_l \left|\,\beta^{(k)}\right\rangle\left\langle\alpha^{(k)}\,|\,\alpha^{(l)}\right\rangle\left\langle\beta^{(l)}\,\right| \\ &= \sum_k \left|\,\beta^{(k)}\right\rangle\left\langle\beta^{(k)}\,\right| = \mathbb{1}. \end{aligned}$$

(ii) These identities follow from straightforward computation.
The spin operators $S_i = \frac{1}{2}\sigma_i$ satisfy the algebra (simply insert this into the Pauli algebra)

$$[S_i, S_j] = i\varepsilon_{ijk} S_k,$$

which is the angular momentum algebra (should be known from classical mechanics). We see that the spin operators satisfy the same algebra as classical angular momentum, and they also generate a magnetic moment (from Stern-Gerlach). However, while spin behaves similar to classical angular momentum in these regards, it is fundamentally quite different from a simple $\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ -quantisation, as we will see later in the course. Also, note that we will not be able to explain the origin of spin in non-relativistic quantum mechanics. Finally, we show $[\boldsymbol{S}^2, S_i] = 0$. We have

$$\left[\boldsymbol{S}^2, S_i\right] = [S_a S_a, S_i] = S_a [S_a, S_i] + [S_a, S_i] S_a = i\varepsilon_{aik} [S_a, S_k]_+ = \frac{1}{2} i\varepsilon_{aik}\delta_{ak} = 0.$$

Aufgabe 2 – Spin in beliebiger Raumrichtung

Auf dem letzten Blatt haben wir die quantenmechanische Beschreibung der Spin-Projektion in x-, y- und z-Richtung diskutiert. Nun wollen wir die dort gewonnenen Erkenntnisse auf Spin-Projektionen in eine beliebige Richtung verallgemeinern.
Diese beliebige Richtung werde durch den Einheitsvektor $\hat{\boldsymbol{n}}$ beschrieben, und der Operator, welcher den Spin in diese Richtung ausliest, durch

$$S_{\hat{\boldsymbol{n}}} \coloneqq \hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{S} = \sum_{i=1}^{3} n_i \cdot S_i.$$

Hier bezeichne $\{S_i\}_{i \in \mathscr{I}(3)}$ wie bisher auch die Spinmatrizen. $|\pm_{\hat{\boldsymbol{n}}}\rangle$ bezeichne einen Zustand mit Spin-Projektion $\pm 1/2$ in $S_{\hat{\boldsymbol{n}}}$-Richtung.

(i) Stellen Sie $S_{\hat{\boldsymbol{n}}}$ als Matrix in der Basis der Eigenzustände von S_z dar.
Tipp: Sie können hier Ihre Ergebnisse aus Aufgabe 3 (viii) des letzten Blattes verwenden.

(ii) Bestimmen Sie $|\pm_{\hat{\boldsymbol{n}}}\rangle$ in dieser Basis.

(iii) Finden Sie die Darstellung von $S_{\hat{\boldsymbol{n}}}$ und $|\pm_{\hat{\boldsymbol{n}}}\rangle$ in Bra-Ket-Notation unter Verwendung der Eigenzustände des Spins in x-, y- und z-Richtung.

(iv) Benutzen Sie Teilaufgabe (iii) um die folgenden Skalarprodukte zu berechnen:

$$\langle + \,|\, \pm_{\hat{\boldsymbol{n}}}\rangle\,, \quad \langle - \,|\, \pm_{\hat{\boldsymbol{n}}}\rangle\,, \quad \langle +_x \,|\, \pm_{\hat{\boldsymbol{n}}}\rangle\,, \quad \langle -_x \,|\, \pm_{\hat{\boldsymbol{n}}}\rangle\,.$$

(v) Überprüfen Sie Ihre Ergebnisse aus Teilaufgabe (iv) indem Sie die Spezialfälle $\hat{\boldsymbol{n}} = \hat{\boldsymbol{x}}$ und $\hat{\boldsymbol{n}} = \hat{\boldsymbol{z}}$ betrachten.

(vi) Nun sei $\hat{\boldsymbol{n}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\boldsymbol{x}} + \hat{\boldsymbol{z}})$. Welche Verteilung der Intensitäten erwarten Sie für die Spinprojektion $\pm 1/2$ in x- bzw. z-Richtung? Beziehen Sie in Ihre Argumentation auch die Ergebnisse aus Teilaufgabe (iv) mit ein.

Solution

(i) We use the representation $|+_z\rangle = (1, 0)$ and $|-_z\rangle = (0, 1)$. The operator $S_{\hat{\boldsymbol{n}}}$ is given by

$$S_{\hat{\boldsymbol{n}}} = n_x S_x + n_y S_y + n_z S_z,$$

i.e. we can write

$$S_{\hat{\boldsymbol{n}}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix}.$$

(ii) It is useful to define two angles θ, ϕ to parametrise the unit vector $\hat{\boldsymbol{n}}$ as

$$\hat{\boldsymbol{n}} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$$

as well as $e^{i\phi} = \cos\phi + i\sin\phi$ to obtain the operator

$$S_{\hat{\boldsymbol{n}}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}.$$

This is a general unitary matrix times $\frac{1}{2}$ and thus has eigenvalues $\lambda_\pm = \pm\frac{1}{2}$. From the definition of the eigenvector, we obtain the relation between the coefficients

$$(\cos\theta - 1)v_+^1 + \sin\theta e^{i\phi} v_+^2 = 0 \Rightarrow v_+^2 = \frac{1-\cos\theta}{\sin\theta} e^{i\phi} v_+^1 = e^{i\phi}\frac{\sin\frac{\theta}{2}}{\cos\frac{\theta}{2}},$$

where in the last step we used the trigonometric identities

$$\cos\theta = \cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}$$
$$\sin\theta = 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}.$$

The normalised eigenvector of $\lambda = \frac{1}{2}$ is thus given by

$$v_+ = (\cos\frac{\theta}{2}, \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}).$$

Analogously, we find the second eigenvector to be

$$v_- = (-\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi}, \cos\frac{\theta}{2}),$$

where we chose the phase such that the result in (v) is independent of ϕ when picking $\hat{\boldsymbol{n}} = \hat{\boldsymbol{z}}$.

(iii) Recall the results from last sheet (or from the Pauli matrices above)

$$S_x = \frac{1}{2}\left(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|\right)$$
$$S_y = \frac{1}{2}\left(-i\,|+\rangle\langle-| + i\,|-\rangle\langle+|\right)$$
$$S_z = \frac{1}{2}\left(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|\right).$$

The operator $S_{\hat{\boldsymbol{n}}}$ is then given by

$$S_{\hat{\boldsymbol{n}}} = \frac{1}{2}\left(n_z\,|+\rangle\langle+| + (n_x - in_y)(|+\rangle\langle-| + (n_x + in_y)(|-\rangle\langle+| - n_z(|-\rangle\langle-|\right).$$

or in the angular parametrisation

$$S_{\hat{\boldsymbol{n}}} = \frac{1}{2}\left(\cos\theta\,|+\rangle\langle+| + \sin\theta e^{-i\phi}(|+\rangle\langle-| + \sin\theta e^{i\phi}(|-\rangle\langle+| - \cos\theta\,|-\rangle\langle-|\right).$$

The eigenvectors are given by

$$|+_n\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\,|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}\,|-\rangle,$$
$$|-_n\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi}\,|+\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\,|-\rangle.$$

(iv) Recall that $|\pm_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle)$. We compute

$$\langle+|+_n\rangle = \cos\frac{\theta}{2} \qquad \langle+|-_n\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi}$$
$$\langle-|+_n\rangle = \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi} \qquad \langle-|-_n\rangle = \cos\frac{\theta}{2}$$
$$\langle+_x|+_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2} + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}\right) \qquad \langle+_x|-_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi} + \cos\frac{\theta}{2}\right)$$
$$\langle-_x|+_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2} - \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}\right) \qquad \langle-_x|-_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi} - \cos\frac{\theta}{2}\right)$$

(v) The case $\hat{\boldsymbol{n}} = \hat{\boldsymbol{x}}$ corresponds to $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\phi = 0$. We obtain

$$
\begin{aligned}
\langle + \,|\, +_n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} & \langle + \,|\, -_n \rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \\
\langle - \,|\, +_n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} & \langle - \,|\, -_n \rangle &= +\frac{1}{\sqrt{2}} \\
\langle +_x \,|\, +_n \rangle &= 1 & \langle +_x \,|\, -_n \rangle &= 0 \\
\langle -_x \,|\, +_n \rangle &= 0 & \langle -_x \,|\, -_n \rangle &= -1
\end{aligned}
$$

as we would expect. We see that we acquire a minus sign in the last product, i.e. the state $|\,-_n\rangle$ corresponds to $-\,|\,-_x\rangle$, but overall phases are not important. The case $\hat{\boldsymbol{n}} = \hat{\boldsymbol{z}}$ corresponds to $\theta = 0$, with ambiguous ϕ, and we get

$$
\begin{aligned}
\langle + \,|\, +_n \rangle &= 1 & \langle + \,|\, -_n \rangle &= 0 \\
\langle - \,|\, +_n \rangle &= 0 & \langle - \,|\, -_n \rangle &= 1 \\
\langle +_x \,|\, +_n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} & \langle +_x \,|\, -_n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\
\langle -_x \,|\, +_n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} & \langle -_x \,|\, -_n \rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}}
\end{aligned}
$$

as we would expect.

(vi) We consider $\hat{\boldsymbol{n}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\boldsymbol{x}} + \hat{\boldsymbol{z}})$ corresponding to angles $\theta = \frac{\pi}{4}$, $\phi = 0$. We compute the inner products (will get $\sin\frac{\pi}{8}$ and $\cos\frac{\pi}{8}$ contributions)

$$
\begin{aligned}
\langle + \,|\, +_n \rangle &= \frac{1}{2}\sqrt{2+\sqrt{2}} & \langle + \,|\, -_n \rangle &= -\frac{1}{2}\sqrt{2-\sqrt{2}} \\
\langle - \,|\, +_n \rangle &= \frac{1}{2}\sqrt{2-\sqrt{2}} & \langle - \,|\, -_n \rangle &= +\frac{1}{2}\sqrt{2+\sqrt{2}} \\
\langle +_x \,|\, +_n \rangle &= \frac{1}{2}\sqrt{2+\sqrt{2}} & \langle +_x \,|\, -_n \rangle &= -\frac{1}{2}\sqrt{2-\sqrt{2}} \\
\langle -_x \,|\, +_n \rangle &= \frac{1}{2}\sqrt{2-\sqrt{2}} & \langle -_x \,|\, -_n \rangle &= -\frac{1}{2}\sqrt{2+\sqrt{2}}
\end{aligned}
$$

as one would expect, the squared amplitudes add up to one, and there is a preference towards the positive x- and z-direction, but the results are symmetric in the exchange of x and z (up to the overall $-$ sign for $|\,-_x\rangle$, but this is not important).

Aufgabe 3 – Lineare Algebra, Teil III: Spektralsatz für Matrizen

Auf den letzten Blättern haben wir Grundbegriffe aus der linearen Algebra wiederholt, sowie lineare Operatoren, d.h. Vektorraum-Endomorphismen $\mathscr{O}\colon V \to V$ eingeführt. Von großer Wichtigkeit sind für uns die selbst-adjungierten Operatoren, welche durch hermitesche Matrizen T dargestellt werden können. Diese haben einige nützliche Eigenschaften, insbesondere können sie diagonalisiert werden. Wir möchten nun die Idee der Diagonalisierung auf die zugrunde liegende lineare Abbildung $\mathscr{T}$ erweitern. Wir können die Diagonalisierbarkeit mittels dem Spektralsatz für hermitesche Matrizen begründen.

Satz (Spektralsatz für hermitesche Matrizen)**.** *Sei T eine hermitesche Matrix auf einem n-dimensionalen komplexen Hilbertraum V. Dann gilt*

a) alle Eigenwerte von T sind reell, *b) Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal zueinander,*

c) es existiert eine Orthonormalbasis von V bestehend aus Eigenvektoren von T.

(i) Zeigen Sie a) und b) des Spektralsatzes. Betrachten Sie hierfür $\langle w, Tv\rangle$ für Eigenvektoren v, w.

(ii) Um c) zu zeigen, ist es hilfreich, wie folgt vorzugehen:

- Zeigen Sie, dass für einen Vektor v_1 aus dem Eigenraum $\mathrm{Eig}(\lambda_1)$ zum Eigenwert λ_1 gilt

$$Tv_1 \in \mathrm{Eig}(\lambda_1),$$

  sowie für einen Vektor v_2 aus dem orthogonalen Komplement $V_2 = \mathrm{Eig}(\lambda_1)^\perp$

$$Tv_2 \in V_2.$$

  Beides sind also invariante Unterräume.
- Zeigen Sie, dass die auf den Unterraum V_2 reduzierte Matrix immernoch hermitesch ist.
- Gehen Sie nun induktiv vor, um zu zeigen, dass V von einer orthonormalen Basis aus Eigenvektoren von T aufgespannt wird.

Wir stellen erfreut fest, dass wir in diesem Beweis nicht notwendigerweise von der genauen Darstellung der linearen Abbildung $\mathscr{T}$ Gebrauch machen mussten. Mit einer kurzen Definition können wir den Spektralsatz sofort für selbst-adjungierte Operatoren beweisen. Wir definieren das *Spektrum* $\sigma(\mathscr{T})$ von $\mathscr{T}$ als die Menge der Eigenwerte. Dann gilt

Satz (Spektralsatz für selbst-adjungierte Operatoren)**.** *Es sei $\mathscr{T}$ ein selbst-adjungierter Operator auf einem endlich-dimensionalen komplexen Hilbertraum V. Dann gilt*

a) das Spektrum von $\mathscr{T}$ ist reell,

b) es existiert eine Orthonormalbasis $\{v_1, v_2, \ldots, v_{\dim(V)}\}$ von V, die aus Eigenvektoren von $\mathscr{T}$ besteht,

c) es existiert eine Spektraldarstellung des Operators $\mathscr{T}$, d.h. es existieren orthogonale Projektoren $\mathscr{P}(\lambda)$ auf die Eigenräume $\mathrm{Eig}(\lambda)$, so dass

$$\mathscr{T} = \sum_{\lambda \in \sigma(\mathscr{T})} \lambda \mathscr{P}(\lambda).$$

Um dies zu zeigen, werden wir die Projektoren $\mathscr{P}(\lambda)$ explizit konstruieren. Der Rest folgt dann aus dem Spektralsatz für hermitesche Matrizen.

(iii) Zeigen Sie a) und b) des Spektralsatzes für lineare Operatoren.

(iv) Nutzen Sie die Orthonormalbasis, um Projektoren auf die Eigenräume zu konstruieren und c) des Spektralsatzes zu zeigen. Beachten Sie, dass Eigenwerte auch entartet sein können.

(v) Nutzen Sie die Spektraldarstellung, um Funktionen von Operatoren $f(\mathscr{T})$ analog zu Funktionen von Matrizen zu definieren.

Solution

(i) To show that the eigenvalues are real, we consider for a normalised eigenvector v of T with $Tv = \lambda v$

$$0 = \langle v, Tv\rangle - \langle v, Tv\rangle = \lambda\langle v, v\rangle - \bar{\lambda}\langle v, v\rangle = \lambda - \bar{\lambda},$$

and we conclude that $\lambda = \bar{\lambda}$, i.e. λ is real. We used that T is Hermitian in the second step, where we evaluated

$$\langle v, Tv\rangle = \langle Tv, v\rangle = \bar{\lambda}\langle v, v\rangle.$$

To show that eigenvectors of different eigenvalues are orthogonal, we consider two eigenvectors v, w with corresponding eigenvalues λ, μ, $\lambda \neq \mu$, and compute

$$0 = \langle w, Tv\rangle - \langle w, Tv\rangle = (\lambda - \mu)\langle w, v\rangle,$$

and since $\mu \neq \lambda$, we conclude $\langle w, v\rangle = 0$, i.e. v and w are orthogonal.

(ii) **Step 1:** A Hermitian matrix has n eigenvalues.
A Hermitian $n \times n$ matrix has n eigenvalues (not necessarily different), since the characteristic polynomial is a complex polynomial of degree n and has n roots. (By a), we know that these roots are all real.)
Step 2: If we do not have degenerate eigenvalues, the result follows from a) and b).
Step 3: The degenrate case.
We need to show that for eigenvalues, the algebraic multiplicity m_a (the multiplicity of the eigenvector as a root of the characteristic polynomial) is equal to the geometric multiplicity m_g (the dimension of the corresponding eigenspace).
Step 4: The eigenspace is an invariant subspace.
Step 5: The orthogonal complement of an invariant subspace is invariant.
Let us fix notations. Let $W \subset V$ be an invariant subspace under T, and call its orthogonal complement $W^\perp$. To see that this is an invariant subspace, consider for $v \in W$ and $w \in W^\perp$ the inner product

$$\langle Tw, v\rangle = \langle w, Tv\rangle = 0$$

since $Tv \in W$ and $w \perp W$. So also $Tw \perp W$ and thus $W^\perp$ is invariant under T.
Step 6: Apply this argument to a degenerate eigenvalue to show that we can choose linearly independent eigenvectors $m_a(\lambda)$ times.
Step 6.1: Find an eigenvector of λ.
Consider the case of a degenerate eigenvalue λ. Then there is one corresponding eigenvector v, and we define the orthogonal complement O to this one-dimensional subspace.
Step 6.2: Restrict T to the orthogonal subspace and apply 6.1 again.
Next, we show that the restriction of T onto O is still Hermitian. This can be seen by choosing a convenient basis which consists of the eigenvector v and a basis of O. Then the representing matrix in this basis will be block-diagonal, with λ in the first slot and a remaining Hermitian block. Hence the restriction of T on this subspace is still Hermitian.
But now we are dealing with a Hermitian matrix with an eigenvalue λ. Hence there is a corresponding normalised eigenvector v' that is by definition orthogonal to v. We can continue this construction $m_a(\lambda)$ times, and we conclude that $m_a(\lambda) = m_g(\lambda)$, i.e. the dimension of the eigenspace is precisely the multiplicity of λ.
Knowing this, we can immediately conclude that we can construct an orthonormal basis for V from the eigenvectors of T.

(iii) a) and b) follow immediately from the matrix case, the only part that is not immediately obvious is that the restriction on an invariant subspace is still self-adjoint. However, note that we have for vectors $u, v \in W \subset V$

$$\langle T|_W u, v\rangle = \langle Tu, v\rangle = \langle u, Tv\rangle = \langle u, T|_W v\rangle.$$

so the restriction is self-adjoint.

(iv) We define the orthogonal projections as the linear maps

$$v \mapsto \mathscr{P}(\lambda)v = \sum_{i=1}^{m_a(\lambda)} \langle e_i, v\rangle e_i,$$

where $\{e_i\}$ are an orthonormal basis of $\mathrm{Eig}(\lambda)$. This operator can be conveniently written in Bra-Ket notation as

$$\mathscr{P}(\lambda) = \sum_i |\, i\rangle\langle i\,| \, .$$

Since the eigenvectors of T form an orthonormal basis of V, we see immediately that these $\mathscr{P}$ are indeed orthogonal projections. By decomposing a vector v in this eigenbasis, i.e. writing

$$v = c^j e_j$$

and noting that each e_j is an eigenvector, i.e. $Te_j = \lambda_j e_j$, we see that

$$Tv = \sum_\lambda \lambda \mathscr{P}(\lambda) v,$$

i.e. project onto the eigenbasis and multiply each eigenvector with its corresponding eigenvalue.

(v) We can now define functions of operators as

$$f(\mathscr{T}) := \sum_{\lambda \in \sigma(\mathscr{T})} f(\lambda)\mathscr{P}(\lambda).$$