Tutorium 07.07

Bra-Ket-Formalismus und Spin

Spin $\frac{1}{2}$: Drehimpulsmatrizen in Basis, in der $\hat{S}_z$ diagonal ist

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{\sigma}} \cdot \frac{\hbar}{2}$; $\hat{\vec{\sigma}}$: Paulische Spinmatrizen

Diese Matrizen beziehen sich auf die Basis

$|\uparrow\rangle = |S_z = +\frac{1}{2}\rangle$; $|\downarrow\rangle = |S_z = -\frac{1}{2}\rangle$

Ein beliebiger Vektor

$$|\psi\rangle = c_1 |\uparrow\rangle + c_2 |\downarrow\rangle$$

wird dann als Spaltenvektor $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ repräsentiert

Mögliche Meßwerte für S_x

Mögliche Meßwerte einer Observablen sind die Eigenwerte des entsprechenden hermitischen Operators, hier also

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x$$

Wir suchen also Eigenwerte von $\hat{\sigma}_x$:

Char. Polynom:

$$\det(\hat{\sigma}_x - \lambda \mathbb{1}) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 1 \stackrel{!}{=} 0$$

$\Rightarrow \lambda = \pm 1 \Rightarrow$ mögliche Meßwerte $S_x = \pm \frac{\hbar}{2}$

Eigenvektoren und Wsk. für Messung von S_x

Eigenvektoren:

$$\lambda = 1: \underbrace{\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}}_{\hat{\sigma}_x - \lambda \mathbb{1}} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow A = B \Rightarrow |S_x = +\tfrac{\hbar}{2}\rangle = A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Normierung:

$$\langle \sigma_x = \tfrac{1}{2} | \sigma_x = 1 \rangle = |A|^2 (1^2 + 1^2) = 2|A|^2 \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow A = \sqrt{\tfrac{1}{2}}$$

Normierter Eigenvektor:

$$|S_x = +\tfrac{\hbar}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle$$

Genauso folgt

$$|S_x = -\tfrac{\hbar}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle$$

Wenn Teilchen in Zustand $|\psi\rangle$ ist, ist die Wsk. einen bestimmten Wert S_x zu messen durch

$$P(S_x) = |\langle S_x|\psi\rangle|^2$$

gegeben.

Beispiel

Teilchen in Zustand $|\uparrow\rangle$ präpariert.
Wsk. bei Messung von S_x die möglichen Werte $\pm\hbar/2$ zu erhalten, ist:

$S_x = +\frac{\hbar}{2}$:
$$P(S_x = \tfrac{\hbar}{2}) = |\langle S_x = \tfrac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle|^2$$
$$= \left|\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\1/\sqrt{2}\end{pmatrix}^+ \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right|^2$$
$$= \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$$

Wsk. $S_x = -\frac{\hbar}{2}$ zu messen:
$$P(S_x = -\tfrac{\hbar}{2}) = |\langle S_x = -\tfrac{1}{2}|\uparrow\rangle|^2$$
$$= \left|\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\-1/\sqrt{2}\end{pmatrix}^+ \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right|^2$$
$$= \frac{1}{2}$$

Check: Gesamtwahrscheinlichkeit

$$P(S_x = \tfrac{1}{2}) + P(S_x = -\tfrac{1}{2}) = \tfrac{1}{2} + \tfrac{1}{2} = 1$$ ✓ ☺

Algebraische Rechnung mit kontinuierlichen Observablen

Wichtige allgemeine Beziehungen

Vollständige Orthonormalbasis (VONS)

$|n\rangle$ $(n \in \mathbb{N})$ Eigenvektoren zu Observablen mit diskretem Eigenwertspektrum

Bsp. Harmonischer Oszillator

Orthonormiertheit

$$\langle n_1 | n_2 \rangle = \delta_{n_1 n_2}$$

Vollständigkeit

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$$

Entwicklung beliebiger Vektoren nach VONS

$$|\psi\rangle = \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|}_{\mathbb{1}} \psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$$

mit $c_n = \langle n|\psi\rangle$; $c_n^* = \langle \psi | n\rangle$

Skalarprodukt

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\langle \psi | n\rangle}_{c_n^*} \underbrace{\langle n | \phi\rangle}_{d_n} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^* d_n$$

$\Rightarrow$ mit Spaltenvektoren $\underline{c} = (c_n)$ usw. geschrieben:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \underline{c}^\dagger \underline{d} \;, \quad \underline{c}^\dagger = \underbrace{(c_0^*, c_1^*, \dots)}_{\text{Zeilenvektoren}}$$

Matrixelemente von Operatoren

$\hat{A}$: Linearer Operator

Anwendung auf Vektor

$$\underbrace{\langle n|\hat{A}\psi\rangle}_{(\hat{A}\psi)_n} = \sum_{r=0}^{\infty} \underbrace{\langle n|\hat{A}\, r\rangle}_{A_{nr}} \underbrace{\langle r|\psi\rangle}_{c_r}$$

$$\Rightarrow \quad \underline{\hat{A}\psi} = \underline{A}\,\underline{c} = \begin{pmatrix} A_{00} & A_{01} & A_{02} & \cdots \\ A_{10} & A_{11} & A_{12} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Adjungierter Operator:

$$\langle \psi|\hat{A}\phi\rangle = \langle \hat{A}^{+}\psi|\phi\rangle \text{ für alle } |\psi\rangle, |\phi\rangle$$

dann ist $\hat{A}^+$ der zu $\hat{A}$ adjungierte Operator.

Matrixelemente

$$(\hat{A}^+)_{nr} = \langle n|\hat{A}^+ r\rangle = \langle \hat{A}^{++} n|r\rangle$$

$$= \left(\langle \hat{A}^+ r|n\rangle\right)^* = \left(\langle r|\hat{A}\, n\rangle\right)^* = A^*_{rn}$$

$$= \langle \hat{A}\, n|r\rangle$$

Daraus folgt zum einen

$$\hat{A}^{++} \equiv \hat{A} \quad \text{und} \quad (\hat{A}^+)_{nr} = A^*_{rn}$$

bzw: $\underline{A}^+ = (\underline{A})^+ = (\underline{A})^{T*}$

Hermitescher Operator

$$\hat{A}^+ = \hat{A}$$

Unitärer Operator

$$\hat{A}^+ = \hat{A}^{-1} \Leftrightarrow \hat{A}^+\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^+ = \mathbb{1}$$

Analoge Formeln für VONS von Observablen mit kont. Spektrum

z.B. Ortsdarstellung:

$$\langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$\langle \vec{x} | \psi \rangle = \psi(\vec{x}) \text{ (Wellenfunktion!)}$$

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, \langle \psi | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \phi \rangle$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, \psi^*(\vec{x}) \phi(\vec{x})$$

$$\boxed{P(\vec{x}) = \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi \rangle = |\psi(x)|^2}$$ Wsk.-Dichte

Vollständiger Satz kompatibler Observabler

$\hat{A}_1, \hat{A}_2 \ldots \hat{A}_n$: Hermitesch $\Rightarrow$ repräsentieren Observablen

$[\hat{A}_j, \hat{A}_k] = 0 \iff$ System stets in Zuständen präparierbar, wo diese Observablen simultane Eigenvektoren $|a_1, a_2, \ldots, a_n\rangle = |(a_j)\rangle$ besitzen. Dann

$$\langle (a_j) | (b_j) \rangle = \delta(a_1 - b_1)\, \delta(a_2 - b_2) \ldots \delta(a_n - b_n)$$

Die Spektren können dabei beliebig diskret und/oder kontinuierlich sein.

Bsp. Teilchen (ohne Spin): - Ortskomponenten: $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$

- Impulskomponenten: $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$
- Radialkoordinate + Drehimpuls: $\hat{r}, \hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z$

$|r, l, m\rangle$:

$$\hat{r}\, |r, l, m\rangle = r\, |r, l, m\rangle \quad ; \; r \geq 0$$

$$\hat{\vec{L}}^2 |r, l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |r, l, m\rangle$$

$$l \in \{0, 1, 2, \ldots\}$$

$$\hat{L}_z |r, l, m\rangle = m\hbar\, |r, l, m\rangle$$

$$m \in \{-l, -l+1, \ldots, l-1, l\}$$

Zeitabhängigkeit, Hamiltonoperator etc

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + V(\hat{\vec{x}})$$ (ohne Magnetfeld)

Schrödingerbild: Zustandskets zeitabhängig
Operatoren für Observablen zeitunabhängig
Zeitentwicklung: Schrödingergleichung (SGL)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Energie-Eigenzustände:

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$\hat{H}$ zeitunabh. ⇒ zeitunabh.

(hier diskret, z.B. harm. Osz.; kann aber verallgemeinert werden auf kont. Spektrum)

Entwicklung nach Energie-Eigenzuständen

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$$

SGL:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \sum_n i\hbar\dot{c}_n(t)|n\rangle$$

$$\stackrel{!}{=} \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

$$= \sum_n c_n(t)E_n|n\rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar\dot{c}_n(t) = E_n c_n(t).$$

$$\Rightarrow c_n(t) = c_n(0)\exp\left(-\frac{iE_nt}{\hbar}\right)$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0)\exp\left(-\frac{iE_nt}{\hbar}\right)|n\rangle$$

Orts- und Impulsdarstellung

Fortsetzung zu HB auf Blatt 10

Von HB wissen wir, daß

$$u_p(x) = \langle u_x | v_p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$$

und

$$u_x(p) = \langle v_p | u_x \rangle = u_p^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)$$

ist.

Daraus lassen sich nun Matrixelemente berechnen, z.B.

Darans lassen sich nun Matrixelemente in der Ortsdarstellung

Vollständigkeit

$$\int_{\mathbb{R}} dp\, |v_p\rangle\langle v_p| = \mathbb{1}$$

$$\int_{\mathbb{R}} dx\, |u_x\rangle\langle u_x| = \mathbb{1}$$

(a) Impulsoperator in der Ortsdarstellung

$$\underline{p}\,\psi(x) = \langle u_x | \hat{p}\, \psi \rangle$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dp\, \langle u_x | \hat{p}\, v_p \rangle \langle v_p | \psi \rangle$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dp\, p\, \langle u_x | v_p \rangle \langle v_p | \psi \rangle$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dp\, p\, \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \langle v_p | \psi \rangle$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dp\, \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} (-i\hbar\partial_x) \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \langle v_p | \psi \rangle$$

$$= -i\hbar\partial_x \int_{\mathbb{R}} dp\, \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \langle v_p | \psi \rangle$$

$$= -i\hbar\partial_x \int_{\mathbb{R}} dp\, \langle u_x | v_p \rangle \langle v_p | \psi \rangle$$

$$= -i\hbar\partial_x \langle u_x | \psi \rangle = -i\hbar\partial_x \psi(x)$$

(b) Ortsoperator in der Ortsdarstellung

$$\underline{x}\,\psi(x) = \langle \nu_x | \hat{x}\,\psi\rangle = \langle \hat{x}^{+} \nu_x | \psi\rangle$$

$\hat{x}$ hermitesch

$$\overset{\downarrow}{=} \langle \hat{x}\, \nu_x | \psi\rangle = \langle x\, \nu_x | \psi\rangle = x \langle \nu_x | \psi\rangle = x\,\psi(x)$$

(c) Impulsoperator in der Impulsdarstellung

$$\underline{p}\,\tilde{\psi}(p) = \langle \nu_p | \hat{p}\,\psi\rangle$$

$$= \langle \hat{p}^{+} \nu_p | \psi\rangle = \langle \hat{p}\, \nu_p | \psi\rangle = \langle p\, \nu_p | \psi\rangle$$

$$= p \langle \nu_p | \psi\rangle$$

(d) Ortsoperator in der Impulsdarstellung

$$\underline{x}\,\tilde{\psi}(p) = \langle \nu_p | \hat{x}\,\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, \langle \nu_p | \hat{x} | \nu_x\rangle \langle \nu_x | \psi\rangle$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dx\, x \langle \nu_p | \nu_x\rangle \langle \nu_x | \psi\rangle$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dx\, x \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-i \frac{px}{\hbar}\right) \langle \nu_x | \psi\rangle$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, i\hbar \partial_p \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \langle \nu_x | \psi\rangle$$

$$= i\hbar\partial_p \int_{\mathbb{R}} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \langle \nu_x | \psi\rangle$$

$$= i\hbar\partial_p \int_{\mathbb{R}} dx\, \langle \nu_p | \nu_x\rangle \langle \nu_x | \psi\rangle = i\hbar\partial_p \langle \nu_p | \psi\rangle$$

$$= i\hbar\partial_p\, \tilde{\psi}(p)$$