Übung Quantenmechanik 2, Übung 2

Sven Buder

16. April 2013

Fortsetzung Wiederholung

Wirkung eines Operators $\hat{A}$ auf einen Bra-Vektor $\langle\varphi|$

$$\langle\varphi| \qquad \rightarrow \qquad \langle\varphi'| = \langle\varphi| \hat{A} \tag{1}$$

definiert durch:

$$\left(\langle\varphi| \hat{A}\right) |\psi\rangle := \langle\varphi| \left(\hat{A} |\psi\rangle\right) \qquad \forall |\psi\rangle \in D(\hat{A}) \tag{2}$$

Ab jetzt werden wir nur noch die Kurzschreibweise $\underline{\langle\varphi| \hat{A} |\psi\rangle}$ verwenden.

Adjungierter Operator

$$\boxed{\langle\varphi| \hat{A}^\dagger |\psi\rangle = \langle\psi| \hat{A} |\varphi\rangle^*} \qquad \forall |\varphi\rangle \in D(\hat{A}) \tag{3}$$

$$D(\hat{A}^\dagger) := \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} : \exists |\gamma\rangle \in \mathcal{H} mit \langle\varphi| \psi\rangle = \langle\psi| \hat{A} |\varphi\rangle^* \qquad \forall |\varphi\rangle \in D(\hat{A})\} \tag{4}$$

$$\gamma = \hat{A}^\dagger |\psi\rangle \tag{5}$$

Hermitesche Operatoren

$$\langle\varphi| \hat{A} |\psi\rangle = \langle\psi| \hat{A} |\varphi\rangle^* \qquad \forall |\psi\rangle , |\varphi\rangle \in D(\hat{A}) \tag{6}$$

Selbstadjungierte Operatoren

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \qquad \text{d.h. auch } D(\hat{A}^\dagger) = D(\hat{A}) \tag{7}$$

Sei

$$\hat{A} |\varphi\rangle = |\varphi'\rangle \tag{8}$$

$$\underbrace{\langle\phi| \hat{A}^\dagger}_{} |\psi\rangle = \langle\psi| \hat{A} |\varphi\rangle^* = \langle\psi| \varphi\rangle^* = \langle\varphi'| \psi\rangle \tag{9}$$

$$\langle\varphi| \hat{A}^\dagger = \langle\varphi'| \tag{10}$$

Wichtige Rechenregeln

$$(c\hat{A})^\dagger = c^* \hat{A}^\dagger, \qquad (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \tag{11}$$

$$(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger, \qquad (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \tag{12}$$

$$(\hat{A}^{-1})^\dagger = (\hat{A}^\dagger)^{-1} \qquad \text{(Definitionsbereiche beachten!)} \tag{13}$$

Das „Adjungierte Produkt“ eines „Produktes“ aus Operatoren, Bra-Vektoren, Ket-Vektoen sowie komplexen Zahlen erhält man, indem man

I: eine Umformung vornimmt von

1. jedem Operator $\rightarrow$ adjungierten Operator
2. jedem Ket-Vektor $\rightarrow$ adjungierten Bra-Vektor
3. jedem Bra-Vektor $\rightarrow$ adjungierten Ket-Vektor
4. komplexen Zahlen $\rightarrow$ komplex konjungierte Zahlen

II: Reihenfolge der vorkommenden Vektoren und Operatoren umkehrt.

Bsp.:

- $\left(c\hat{A}\hat{B}\left|\psi\right\rangle\right)^\dagger = c^* \left\langle\psi\right| \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$
- $\left\langle\psi\right| \hat{A} \left|\varphi\right\rangle = \left\langle\varphi\right| \hat{A}^\dagger \left|\psi\right\rangle = \left\langle\psi\right| \hat{A} \left|\varphi\right\rangle^*$

Spezielle Operatoren

dyadisches Produkt: $\left|\psi\right\rangle\left\langle\varphi\right|$

$$\left(\left|\psi\right\rangle\left\langle\varphi\right|\right)^\dagger = \left|\varphi\right\rangle\left\langle\psi\right| \tag{14}$$

$$\left(\left|\psi\right\rangle\left\langle\varphi\right|\right)\left|\gamma\right\rangle = \left|\psi\right\rangle\left\langle\varphi\right|\left|\gamma\right\rangle \qquad \text{Ket-Vektor} \tag{15}$$

$$\left\langle\gamma\right|\left(\left|\psi\right\rangle\left\langle\varphi\right|\right) = \left\langle\gamma\right|\left|\psi\right\rangle\left\langle\varphi\right| \qquad \text{Bra-Vektor} \tag{16}$$

Wir betrachten nun ein VONS $\{\left|\psi_j\right\rangle\}$. Dabei können wir jeden beliebigen Vektor darstellen als Linearkombination der Basis:

$$\left|\alpha\right\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \left|\psi_i\right\rangle = \sum_i \left|\psi_i\right\rangle\left\langle\psi_i\middle|\,\alpha\right\rangle \tag{17}$$

$$\Rightarrow \hat{1} = \sum_{i=1}^{\infty} \left|\psi_i\right\rangle\left\langle\psi_i\right| \qquad \text{Vollständigkeitsrelation} \tag{18}$$

Projektionsoperatoren:

$\hat{P}_j = \left|\psi_j\right\rangle\left\langle\psi_j\right|$

Komponente von $\left|\alpha\right\rangle$ in Projektionsrichtung: $\hat{P}_j = a_j \left|\psi_j\right\rangle$

Charakterisierung des Projektionsoperators $\left|\psi_j\right\rangle$

1. $D(\hat{P}) = \mathcal{H}$
2. $\hat{P}^2 = \hat{P}$ (idempotent)
3. $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$ (selbstadjungiert)

Matrix-Darstellung von Operatoren

$$\{\left|\psi_i\right\rangle\}_{i=1}^{\infty}\ \text{VONS}, \qquad \left|\psi_i\right\rangle \in D(\hat{A}), \qquad \hat{1} = \sum_{i=1}^{\infty} \left|\psi_i\right\rangle\left\langle\psi_i\right| \tag{19}$$

Ket-Vektoren: $\left|\psi\right\rangle = \hat{1}\left|\psi\right\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \left|\psi_i\right\rangle \underbrace{\left\langle\psi_i\middle|\,\psi\right\rangle}_{c_i} \qquad \Rightarrow \left|\psi\right\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$

Bra-Vektoren: $\left\langle\psi\right| = \left\langle\psi\right|\hat{1} = \sum_{i=1}^{\infty} \underbrace{\left\langle\psi\middle|\,\psi_i\right\rangle}_{d_i} \left\langle\psi_i\right| \qquad \Rightarrow \left\langle\psi\right| = \left(d_1, d2, \ldots\right)$

Damit wollen wir nun eine Matrix von $\hat{A}$ beschreiben:

$$\hat{A} = \hat{1}\hat{A}\hat{1} = \sum_{i,j} |\psi_i\rangle \underbrace{\langle\psi_i| \hat{A} |\psi_j\rangle}_{A_{ij}} \langle\psi_j| \tag{20}$$

$$\Rightarrow \qquad \hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \qquad \text{mit Matrixelement } A_{ij} = \langle\psi_i| \hat{A} |\psi_j\rangle \tag{21}$$

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} c_i |\psi\rangle \qquad \langle\psi| = \sum_{i=1}^{\infty} d_i \langle\psi| \tag{22}$$

$$\hat{A} = \sum_i \sum_j A_{ij} \underbrace{|\psi_i\rangle \langle\psi_j|} \tag{23}$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i \sum_j A_{ij} |\psi_i\rangle \underbrace{\langle\psi_j|\,\psi\rangle}_{c_j} = \sum_{i=1}^{\infty} c_i' |\psi_i\rangle \qquad \text{mit} \qquad c_i' = \sum_j A_{ij} c_j \tag{24}$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{25}$$

Matrix-Darstellung des adjungierten Operators

$$\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} |\psi_i\rangle \langle\psi_j| \tag{26}$$

$$\hat{A}^\dagger = \sum_{i,j} A_{ij}^* |\psi_j\rangle \langle\psi_i| = \sum_{i,j} \hat{A}_{ji}^* |\psi_i\rangle \langle\psi_j| \tag{27}$$

andererseits:

$$\hat{A}^\dagger = \sum_{i,j} (A^\dagger)_{ij} |\psi_i\rangle \langle\psi_j| \tag{28}$$

$$\Rightarrow \qquad A_{ij}^\dagger = A_{ji}^* \tag{29}$$

Drehimpulsoperatoren

$$\hat{\vec{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z) \tag{30}$$

$$\hat{\vec{J}}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle \tag{31}$$

$$\hat{J}_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle \tag{32}$$

j hat für alle Situationen festen Wert $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ denen $2j+1$ Werte $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ zugeordnet werden

Beispiel: Spin $\frac{1}{2}$ $\qquad j = \frac{1}{2} \qquad \Rightarrow \qquad m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$$\hat{\vec{s}} = (\hat{s}_1, \hat{s}_2, \hat{s}_3) = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z) \tag{33}$$

$$\hat{s}_\pm = \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y = \hat{s}_1 \pm i\hat{s}_2 \tag{34}$$

Wenden wir dies nun auf den Drehimpulsoperator an, um zu zeigen, dass

$$J_\pm |jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\, |j, m \pm 1\rangle \tag{35}$$

$$\left|j = \frac{1}{2}, m\right\rangle \equiv |m\rangle \qquad \left|m = \frac{1}{2} =\right\rangle \equiv |\uparrow\rangle \qquad \left|m = -\frac{1}{2} =\right\rangle \equiv |\downarrow\rangle \tag{36}$$

$$\hat{s}_+ |\uparrow\rangle = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}\,|\,\rangle = |0_V\rangle \tag{37}$$

$$\hat{s}_- |\uparrow\rangle = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - (-\frac{1}{2})(-\frac{1}{2}+1)}\,|\downarrow\rangle = \hbar\,|\downarrow\rangle \tag{38}$$

Also:

$$\hat{s}_+ |\uparrow\rangle \equiv |0_V\rangle \qquad \hat{s}_- |\uparrow\rangle \equiv \hbar\,|\downarrow\rangle \tag{39}$$

$$\hat{s}_+ |\downarrow\rangle \equiv \hbar\,|\uparrow\rangle \qquad \hat{s}_- |\downarrow\rangle \equiv |0_V\rangle \tag{40}$$

$$\hat{s}_i \equiv \begin{pmatrix} \langle\uparrow|\,\hat{s}_i\,|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\,\hat{s}_i\,|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|\,\hat{s}_i\,|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\,\hat{s}_i\,|\downarrow\rangle \end{pmatrix} \tag{41}$$

Start ist

$$\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \hat{s}_3 \tag{42}$$

$$\text{wobei} \qquad \hat{s}_z\,|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|\uparrow\rangle\,, \qquad \hat{s}_z\,|\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|\downarrow\rangle \tag{43}$$

Damit folgt durch addieren bzw. subtrahieren von 34 mit jeweils vertauschten Vorzeichen

$$\hat{s}_1 = \frac{1}{2}(\hat{s}_+ + \hat{s}_-) \tag{44}$$

$$\hat{s}_2 = \frac{1}{2}(\hat{s}_+ + \hat{s}_-) \tag{45}$$

$$\text{mit 39 und 40} \qquad \Rightarrow \qquad \hat{s}_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{s}_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{46}$$

Greifen wir 44 und 45 auf und nutzen 46, so ergibt sich

$$\hat{s}_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{47}$$

$$\hat{s}_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{48}$$

$$\text{sowie siehe 42} \qquad \hat{s}_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{49}$$

$$\tag{50}$$

Hier können wir die sogenannten Pauli-Matrizen sehen. Somit können wir auch schreiben

$$\hat{\vec{s}} = (\hat{s}_1, \hat{s}_2, \hat{s}_3) \qquad \Rightarrow \qquad \vec{s} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma} \tag{51}$$

$$\underbrace{\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\text{Pauli-Matrizen}} \tag{52}$$

Für $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ sind nun noch weitere Eigenschaften zu beschreiben.

- Orthogonalität von $\{|\uparrow\rangle\ , |\downarrow\rangle\}$:

$$\langle\uparrow\,|\,\downarrow\,\rangle = 0, \qquad \langle\uparrow\,|\,\uparrow\,\rangle = 1, \qquad \langle\downarrow\,|\,\downarrow\,\rangle = 1 \tag{53}$$

- durch $\{|\uparrow\rangle\ , |\downarrow\rangle\}$ wird ein zweidimensionaler Hilbertraum aufgespannt

$$|\psi\rangle = \psi_\uparrow\,|\uparrow\rangle + \psi_\downarrow\,|\downarrow\rangle \tag{54}$$

$$\langle\psi| = \psi_\uparrow^*\,\langle\uparrow| + \psi_\downarrow^*\,\langle\downarrow| \tag{55}$$

$$\langle\psi|\ \psi\rangle = \psi_\uparrow\psi_\uparrow^* + \psi_\downarrow\psi_\downarrow^* = |\psi_\uparrow|^2 + |\psi_\downarrow|^2 = 1 \tag{56}$$