9 Translationen und Rotationen

Übungen, die nach Richtigkeit korrigiert werden:

Aufgabe 9.1: Drehungen

Der quantenmechanische Rotationsoperator $\hat{R}_{\eta,\boldsymbol{e}}$ dreht einen Zustand $|\psi\rangle$ um den Winkel η um die Achse $\boldsymbol{e}$. Der Operator $\hat{R}_{\eta,\boldsymbol{e}}$ ist mit dem Drehimpulsoperator $\hat{\boldsymbol{j}}$ verwandt durch die Beziehung

$$\hat{R}_{\eta,\boldsymbol{e}} = e^{-i\eta\boldsymbol{e}\cdot\hat{\boldsymbol{j}}/\hbar}.$$

Betrachten Sie nun die Wirkung des Rotationsoperators auf einen "Rotator", d.h. ein Teilchen, das ausschließlich Rotationsfreiheitsgrade hat.

(a) Zeigen Sie, dass $\hat{R}_{\eta,\boldsymbol{e}}$ die Größe $\boldsymbol{j}^2$ des Drehimpulses nicht ändert.

Die Größe $\boldsymbol{j}^2$ des Drehimpulses ist ein Skalar. Skalare sind invariant unter Rotationen. Man kann dies auch explizit überprüfen: Die Drehimpulskomponenten $\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$ und $\hat{j}_z$ ändern die Größe $\boldsymbol{j}^2$ des Drehimpulses nicht. Dies geht z.B. aus den allgemeinen Gleichungen

$$\begin{aligned}\hat{j}_z|j,m\rangle &= \hbar m|j,m\rangle,\\ \hat{j}_\pm|j,m\rangle &= \hbar\sqrt{(j\pm m)(j\pm m+1)}|j,m\pm 1\rangle\end{aligned}$$

hervor, wobei $\hat{j}_\pm = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y$. Hieraus folgt, dass auch eine Funktion des Drehimpulses $\hat{\boldsymbol{j}}$ die Größe $\boldsymbol{j}^2$ nicht ändert.

(b) Der allgemeine normierte Zustand eines Rotators mit Drehimpuls $j = 1$ ist

$$|\psi\rangle = \sum_{m=-1}^{1} a_m|1,m\rangle,$$

wobei $|a_{-1}|^2 + |a_0|^2 + |a_1|^2 = 1$. Berechnen Sie den Zustand $\hat{R}_{\eta,\boldsymbol{e}_z}|\psi\rangle$, der sich aus $|\psi\rangle$ durch Drehung um die z-Achse ergibt.

Der Rotationsoperator ist $\hat{R}_{\eta,\boldsymbol{e}_z} = \exp(-i\eta\hat{j}_z/\hbar)$. Aus der Gleichung $\hat{j}_z|j,m\rangle = \hbar m|j,m\rangle$ folgt, dass

$$\hat{R}_{\eta,\boldsymbol{e}_z}|j,m\rangle = e^{-i\eta\hat{j}_z/\hbar}|j,m\rangle = e^{-i\eta m}|j,m\rangle.$$

Hieraus folgt, dass

$$\hat{R}_{\eta,\boldsymbol{e}_z}|\psi\rangle = \sum_{m=-1}^{1} a_m e^{im\eta}|1,m\rangle.$$

Aufgabe 9.2: Spin $1/2$ *in einem Magnetfeld*

Betrachten Sie einen "Spin 1/2", d.h., einen Rotator mit Drehimpuls $j = 1/2$, in einem Magnetfeld $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$. Das magnetische Moment dieses Teilchens ist $\boldsymbol{\mu} = \gamma \boldsymbol{s}$, wobei $\gamma = eg/2mc$ das gyromagnetische Verhältnis ist und $g = 2$ der "g Faktor". Die Energie dieses Teilchens im Magnetfeld ist $H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}$. Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei der Spin 1/2 in dem $\hat{s}_x$-Eigenzustand

$$|\psi(t=0)\rangle = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(0) \\ \psi_\downarrow(0) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

(a) Bestimmen Sie $|\psi(t)\rangle$ durch eine Lösung der Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle.$$

Die Schrödingergleichung lautet in Matrixnotation:

$$\begin{pmatrix} \dot{\psi}_\uparrow \\ \dot{\psi}_\downarrow \end{pmatrix} = \frac{1}{2} i\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix},$$

wobei $\omega = \gamma B$. Diese Gleichung hat die Lösung

$$\psi_\uparrow(t) = \psi_\uparrow(0) e^{i\omega t/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega t/2}, \quad \psi_\downarrow(t) = \psi_\downarrow(0) e^{-i\omega t/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t/2}.$$

(b) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\overline{s_x(t)}$, $\overline{s_y(t)}$ und $\overline{s_z(t)}$.

Wir berechnen zuerst $\overline{s_+(t)} = \overline{s_x(t)} + i\overline{s_y(t)}$. Hierzu bemerken wir, dass der Operator $\hat{s}_+$ durch die Matrix

$$\hat{s}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

dargestellt wird. Es folgt dann, dass

$$\overline{s_+(t)} = \langle \psi(t)|\hat{s}_+|\psi(t)\rangle = \hbar \psi_\uparrow(t)^* \psi_\downarrow(t) = \frac{\hbar}{2} e^{-i\omega t}.$$

Hieraus folgt, dass $\overline{s}_x(t) = (\hbar/2)\cos(\omega t)$, $\overline{s_y(t)} = -(\hbar/2)\sin(\omega/t)$. Für den Erwartungswert $\overline{s}_z(t)$ finden wir, dass

$$\overline{s_z(t)} = \langle \psi(t)|\hat{s}_z|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(|\psi_\uparrow(t)|^2 - |\psi_\downarrow(t)|^2\right) = 0.$$

Übungen, die nach Aufwand korrigiert werden:

Aufgabe 9.3: Translationen

In einer alternativen Beschreibung der Quantenmechanik, wird der Impulsoperator $\boldsymbol{p}$ als Erzeuger der Translationen eingeführt. Hierzu betrachtet man den Operator $\hat{T}_{\boldsymbol{a}}$, der einen quantenmechanischen Zustand $|\psi\rangle$ um eine Strecke $\boldsymbol{a}$ verschiebt,

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \hat{T}(\boldsymbol{a})|\psi\rangle, \quad \psi'(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{a}, t).$$

Der Impulsoperator ist dann durch die Beziehung

$$\hat{T}(\boldsymbol{a}) = e^{-i\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar}$$

definiert.

(a) Zeigen Sie, dass aus dieser Definition folgt, dass die Komponenten $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ und $\hat{p}_z$ des Impulsoperators vertauschbar sind.

Da Translationen vertauschbar sind, geht aus der Definition der Translationsoperatoren $\hat{T}(\boldsymbol{a})$ hervor, dass sie auch vertauschbar sind,

$$\hat{T}^{-1}(a\boldsymbol{e}_y)\hat{T}^{-1}(a\boldsymbol{e}_x)\hat{T}(a\boldsymbol{e}_y)\hat{T}(a\boldsymbol{e}_x) = \hat{1}.$$

Mit $\hat{T}(a\boldsymbol{e}_x) = e^{-ia\hat{p}_x/\hbar}$ und $\hat{T}(a\boldsymbol{e}_y) = e^{-ia\hat{p}_y/\hbar}$ und nach Entwicklung bis zu 2. Ordnung in a findet man dann, dass

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0.$$

Die Kommutatoren von $\hat{p}_x$ und $\hat{p}_y$ mit $\hat{p}_z$ findet man in ähnlicher Weise.

(b) Zeigen Sie, dass die Wahl des Koeffizienten $\hbar$ im Exponenten mit der de-Broglie Hypothese übereinstimmt.

Laut der de-Broglie Hypothese wird ein Teilchen mit Impuls $\boldsymbol{p}$ durch eine Welle mit Wellenvektor $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{p}/\hbar$ dargestellt. Da Verschiebung einer Welle mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ über eine Strecke $\boldsymbol{a}$ einen Phasenfaktor $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}}$ ergibt, muss gelten, dass

$$T(\boldsymbol{a}) = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}}.$$

Dies stimmt mit der de-Broglie Hypothese $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{p}/\hbar$ überein.

Man kann auch “Translationen in der Zeit” betrachten. Sei $\hat{U}(\tau)$ der Operator, der die zeitliche Entwicklung eines Zustandes über ein Zeitintervall τ beschreibt,

$$|\psi(t+\tau)\rangle = U(\tau)|\psi(t)\rangle.$$

Dieser Operator führt so zu der Definition eines Energieoperators $\hat{H}$,

$$\hat{U}(\tau) = e^{-i\tau\hat{H}/\hbar}.$$

(c) Leiten Sie die Schrödinger Gleichung aus dieser Definition ab.

Entwickeln bis zur 1. Ordnung in τ gibt

$$|\psi(t)\rangle + \tau\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}\right)|\psi(t)\rangle,$$

so dass

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle.$$

(d) Zeigen Sie, dass die Wahl des Koeffizienten $\hbar$ im Exponenten mit der de-Broglie Hypothese übereinstimmt.

Laut der de-Broglie Hypothese wird ein Teilchen mit Energie E durch einen Zustand mit Frequenz $\omega = E/\hbar$ beschrieben. Da die Zeitentwicklung eines Zustands mit Frequenz ω einen Phasenfaktor $e^{-i\omega\tau}$ ergibt, muss gelten, dass

$$U(\tau) = e^{-i\omega\tau}.$$

Dies stimmt mit der Hypothese $\omega = E/\hbar$ überein.

Aufgabe 9.4: Darstellungen der Drehimpuls-Operatoren

Aus den Gleichungen

$$\hat{j}_\pm|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}|jm\pm 1\rangle, \quad \hat{j}_z|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle$$

geht hervor, dass die Wirkung der Komponenten $\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$ und $\hat{j}_z$ des Drehimpuls-Operators nur die magnetische Quantenzahl m betrifft; Andere Quantenzahlen (z.B., die Nebenquantenzahl j oder die Hauptquantenzahl n) sind nicht betroffen. Auf Grund dieser Beobachtung können die Komponenten $\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$ und $\hat{j}_z$ bei festem j-Wert durch Matrizen dargestellt werden. Hierzu schreibt man einen allgemeinen Zustand mit Nebenquantenzahl j als

$$|\psi\rangle = \sum_{m=-j}^{j} a_m |jm\rangle$$

und bildet aus den $2j+1$ Koeffizienten a_m einen Vektor,

$$\underline{a} = \begin{pmatrix} a_j \\ a_{j-1} \\ \vdots \\ a_{-j+1} \\ a_{-j} \end{pmatrix}.$$

Die Wirkung der Komponenten $\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$ und $\hat{j}_z$ des Drehimpuls-Operators kann dann durch eine $2j+1$-dimensionale Matrix dargestellt werden.
Ein Beispiel ist der Fall $j = 1/2$, wo die Operatoren $\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$ und $\hat{j}_z$ durch die Pauli Matrizen dargestellt werden, $j_i = (\hbar/2)\sigma_i$, $i = x, y, z$, wobei

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Finden Sie nun die Matrix-Darstellungen für die Operatoren $\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$ und $\hat{j}_z$ für

(a) $j = 0$,

Für $j = 0$ werden $\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$ und $\hat{j}_z$ alle durch die gleiche Zahl 0 dargestellt. Den Kommutationsrelationen für Drehimpuls-Operatoren wird dann trivialerweise genügt.

(b) $j = 1$

und überprüfen Sie, dass Ihre Matrix-Darstellung den Kommutationsrelationen für Drehimpuls-Operatoren genügt.

In der Vektor-Notation findet man, dass

$$\begin{aligned}
\hat{j}_+ \begin{pmatrix} a_1 \\ a_0 \\ a_{-1} \end{pmatrix} &= \hbar \begin{pmatrix} a_0\sqrt{(1-0)(1+0+1)} \\ a_{-1}\sqrt{(1-(-1))(1-1+1)} \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_0 \\ a_{-1} \end{pmatrix}, \\
\hat{j}_- \begin{pmatrix} a_1 \\ a_0 \\ a_{-1} \end{pmatrix} &= \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ a_1\sqrt{(1+1)(1-1+1)} \\ a_0\sqrt{(1+0)(1-0+1)} \end{pmatrix} \\
&= \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_0 \\ a_{-1} \end{pmatrix}, \\
\hat{j}_z \begin{pmatrix} a_1 \\ a_0 \\ a_{-1} \end{pmatrix} &= \hbar \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ -a_{-1} \end{pmatrix} \\
&= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_0 \\ a_{-1} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Mit $\hat{j}_x = (1/2)(\hat{j}_+ + \hat{j}_-)$ und $\hat{j}_y = 1/(2i)(\hat{j}_+ + \hat{j}_-)$ findet man dann, dass die Operatoren $\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$ und $\hat{j}_z$ durch die Matrizen

$$\hat{j}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{j}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{j}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

dargestellt werden. Man überprüft nun durch Matrix-Multiplikation, dass die Matrix-Darstellung den Kommutationsrelationen

$$[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = i\hbar\hat{j}_z, \quad [\hat{j}_y, \hat{j}_z] = i\hbar\hat{j}_x, \quad [\hat{j}_z, \hat{j}_x] = i\hbar\hat{j}_y,$$

genügt.