Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2021

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann
Obertutor: Dr. Carsten Littek

Übungsblatt 3

Besprechung in den virtuellen Übungsgruppen in der Woche 03. - 07. Mai 2021
Bitte geben Sie maximal 2 Aufgaben per Übungsgruppensystem zur Korrektur an Ihre Tutorin / Ihren Tutor!
Nutzen Sie dazu den Link `https://uebungen.physik.uni-heidelberg.de/h/1291`

1. *Verständnisfragen*

a) Was besagt die Bell'sche Ungleichung? Was versteht man unter den Prinzipien der Lokalität und Realität?

b) Erläutern Sie die Axiome der Kopenhagener Interpretation.

c) Erklären Sie den Unterschied zwischen reinen und gemischten Zuständen.

2. *Zwei-Zustand-System*

Wir betrachten ein System mit einem diskreten Freiheitsgrad, d.h. die möglichen Zustände können durch Zustandsvektoren in $\mathbb{C}^2$ beschrieben werden. Ein Beispiel für ein solches System ist ein Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen, das Sie in Kapitel 10 des Vorlesungsskripts diskutieren werden. (Der Inhalt des Kapitels 10 ist nicht notwendig für diese Aufgabe!) Eine Orthonormalbasis von $\mathbb{C}^2$ ist gegeben durch

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Das System sei beschrieben durch $|\psi\rangle = a\,|\uparrow\rangle + b\,|\downarrow\rangle$ mit $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Die Dynamik des Systems sei durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\mu B}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i}\sqrt{3} \\ \mathrm{i}\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}.$$

Die Pauli-Matrizen haben Sie bereits auf dem Übungsblatt 1 kennengelernt. Sie sind gegeben durch

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

a) Berechnen Sie den Kommutator $[\hat{H}, \hat{\sigma}_1]$. Was bedeutet es, dass der Kommutator nicht verschwindet?*

b) Bestimmen Sie jeweils die Eigenwerte und Eigenzustände von $\hat{H}$ und $\hat{\sigma}_1$.

c) Geben Sie die Zeitentwicklung der Eigenzustände des Hamilton-Operators an.

d) Zur Zeit $t = 0$ befinde sich das System im Eigenzustand zum positiven Eigenwert von σ_1. In welchem Zustand ist das System zum Zeitpunkt $t = T > 0$ und welchen Erwartungswert hat dann $\hat{\sigma}_1$? Warum kann der Erwartungswert von σ_1 nicht konstant sein?

---

* *Hinweis:* Drücken Sie den Hamilton-Operator durch die Pauli-Matrizen aus.

3. *Translationsoperator*

Wir wollen einen Operator formulieren, der es uns ermöglicht, räumliche Translationen auszuführen. Es sei $\psi(x) \in \mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$ eine unendlich oft differenzierbare Wellenfunktion.

a) Lesen Sie aus einer Taylor-Näherung 1. Ordnung einen Operator für eine räumliche Verschiebung um einen infinitesimalen Betrag dL ab.

b) Wie können Sie daraus eine Verschiebung um eine endliche Strecke L konstruieren?

c) Bilden Sie den Grenzfall, dass die Strecke L in beliebig viele Teilstücke dL unterteilt wird.

d) Welchen Zusammenhang mit dem Impulsoperator in Ortsdarstellung erkennen Sie?

e) Bilden Sie den Kommutator dieses Translationsoperators mit dem Hamilton-Operator eines freien Teilchens $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ in Ortsdarstellung. Was schließen Sie aus dem Ergebnis?

4. *Spinalgebra im Produktraum*

Gegeben sei ein System aus zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen. (Näheres zum Spin in Kapitel 10 des Vorlesungsskripts; der Inhalt ist jedoch *nicht* notwendig für diese Aufgabe!) Der Zustandsraum dieses Systems ist der Produktraum der Hilberträume der einzelnen Teilchen, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Der Operator des Gesamtspins sei $\hat{\vec{\Sigma}}$, seine Komponenten sind gegeben durch

$$\hat{\Sigma}_i = \hat{S}_i \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{S}_i,$$

wobei $\hat{S}_i = (\hbar/2)\,\sigma_i$, σ_i die i-te Pauli-Matrix und $\hat{I}$ der Einheitsoperator ist.

a) Zeigen Sie, dass die Pauli-Matrizen wie folgt auf die beiden möglichen Spinzustände

$$|\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

wirken,

$$\begin{aligned} \sigma_1\,|\uparrow\rangle &= \ |\downarrow\rangle\,, & \sigma_1\,|\downarrow\rangle &= \ |\uparrow\rangle\,,\\ \sigma_2\,|\uparrow\rangle &= \mathrm{i}\,|\downarrow\rangle\,, & \sigma_2\,|\downarrow\rangle &= -\mathrm{i}\,|\uparrow\rangle\,,\\ \sigma_3\,|\uparrow\rangle &= \ |\uparrow\rangle\,, & \sigma_3\,|\downarrow\rangle &= -\,|\downarrow\rangle\,. \end{aligned}$$

b) Zeigen Sie, dass

$$\hat{\vec{\Sigma}}^2 = \hat{\vec{S}}^2 \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{\vec{S}}^2 + 2\sum_{i=1}^{3} \hat{S}_i \otimes \hat{S}_i.$$

c) Berechnen Sie die Wirkung der Operatoren $\hat{\Sigma}_3$ und $\hat{\vec{\Sigma}}^2$ auf folgende Zustände,

(i) $|\uparrow\uparrow\rangle \equiv |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$,

(ii) $|\downarrow\downarrow\rangle \equiv |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$,

(iii) $\dfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\Big) \equiv \dfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle\Big)$,

(iv) $\dfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\Big) \equiv \dfrac{1}{\sqrt{2}}\Big((|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle\Big)$.

Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2021

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann
Obertutor: Dr. Carsten Littek

Übungsblatt 3: Lösung

1. Verständnisfragen

a) Das Prinzip der Realität besagt, dass eine Größe real ist, wenn sie in einem ungestörten System sicher vorhersagbar ist. Lokalität bedeutet, dass die Messung an einem System den Zustand eines anderen Systems nicht beeinflussen kann, wenn diese Systeme nicht in Wechselwirkung stehen.
Die Bell'sche Ungleichung macht Aussagen über die Erwartungswerte verschränkter Zustände unter der Annahme eines verborgenen Parameters λ, der Lokalität und Realität. Laut Einstein, Podolsky und Rosen muss eine Quantentheorie, die den Prinzipien der Realität und Lokalität genügt auch verborgene Parameter enthalten, um vollständig zu sein. Falls eine solche Theorie korrekt ist, dann muss sie die Bell'sche Ungleichung erfüllen. Die Bell'sche Ungleichung wird aber im Allgemeinen nicht von der Quantenmechanik erfüllt. Daher kann die Quantenmechanik durch verborgene Parameter nicht zu einer lokalen und realistischen Theorie vervollständigt werden.

b) Die Kopenhagener Deutung lässt sich durch sechs Postulate zusammenfassen

i. Zustände: Physikalische Zustände sind eindimensionale Unterräume (Strahlen) von Hilberträumen, die durch einen Vektor $|\psi\rangle$ einer beliebigen Länge aufgespannt wird. Der Hilbertraum quantenmechanischer Zustände hat eine abzählbare Basis.

ii. Observablen: Observable werden lineare, selbstadjungierte Operatoren zugeordnet. Observablen sind durch Messung an physikalischen Systemen beobachtbare Größen.

iii. Messwerte: Die möglichen Messwerte von Observablen entsprechen dem Eigenwertspektrum des zugehörigen selbstadjungierten Operators. Im Allgemeinen besteht das Eigenwertspektrum aus einem diskreten und einem kontinuierlichen Anteil.

iv. Wahrscheinlichkeiten: Das Betragsquadrat der Projektion eines normierten Zustandsvektors $|\psi\rangle$ auf die Eigenbasis $\{|a_i\rangle\}$ zu einem Operator $\hat{\mathrm{A}}$ entspricht der Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung den Eigenwert a_i zum Eigenvektor $|a_i\rangle$ zu messen: $p(a_i) = |\langle a_i|\psi\rangle|^2$

v. Zeitentwicklung: Die Schrödingergleichung bestimmt die zeitliche Entwicklung quantenmechanischer Zustände. Sie lautet

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

vi. Messprozess: Bei der Messung einer Observablen, repräsentiert durch einen Operator $\hat{\mathrm{A}}$, geht das System in einen Eigenzustand $|a_i\rangle$ von $\hat{\mathrm{A}}$ über. Dies stellt sicher, dass die Quantenmechanik wiederholt prüfbare Aussagen machen kann.

c) Ein *reiner* Zustand spannt einen eindimensionalen Unterraum des Hilbertraums auf. Dieser Zustand kann durch Linearkombination einer Eigenbasis $|a_i\rangle$ zu einem Operator $\hat{\mathrm{A}}$ dargestellt werden

$$|\psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i|\psi\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle ,$$

wobei $|c_i|^2$ die Wahrscheinlichkeit ist den Eigenwert a_i zu messen.
Ein *gemischter* Zustand entspricht einem mehrdimensionalen Unterraum des Hilbertraums, der durch die orthonormalen Vektoren $|n\rangle$ aufgespannt sei. Der gemischte Zustand befindet sich mit

einer Wahrscheinlichkeit p_n in einem der Zustände $|n\rangle$. Ein solches Gemisch wird durch den Dichteoperator dargestellt

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle \langle n| .$$

Der Erwartungswert einer Observablen $\hat{\mathrm{A}}$ wird durch Spurbildung mit dem Dichteoperator gebildet, $\langle \hat{\mathrm{A}} \rangle = \mathrm{Sp}(\hat{\mathrm{A}}\,\hat{\rho})$.

2. *Zwei-Zustand-System*

a) Wir schreiben zuerst den Hamilton-Operator mit Hilfe der Pauli-Matrizen:

$$\hat{H} = -\frac{\mu B}{2}\left(\sqrt{3}\sigma_2 + \sigma_3\right).$$

Jetzt bilden wir die relevanten Kommutatoren der Pauli-Matrizen und nutzen die Ergebnisse von Aufgabe 2c) auf Übungsblatt 1.

$$[\sigma_2, \sigma_1] = \sigma_2\sigma_1 - \sigma_1\sigma_2 = \mathrm{i}(\epsilon_{213} - \epsilon_{123})\sigma_3 = -2\mathrm{i}\sigma_3$$
$$[\sigma_3, \sigma_1] = \sigma_3\sigma_1 - \sigma_1\sigma_3 = \mathrm{i}(\epsilon_{312} - \epsilon_{132})\sigma_2 = 2\mathrm{i}\sigma_2$$

Dann ist der Kommutator des Hamilton-Operators und der Pauli-Matrix σ_1

$$[\hat{H}, \sigma_1] = \mathrm{i}\mu B\left(\sqrt{3}\sigma_3 - \sigma_2\right).$$

Also verschwindet der Kommutator nicht. Dann sind die Operatoren $\hat{H}$ und σ_1 nicht gleichzeitig diagonalisierbar.

b) Die Eigenwerte des Hamiltonoperators

$$\det(\hat{H} - \lambda \mathbb{1}_2) = \lambda^2 - \mu^2\,\hat{\mathrm{B}}^2$$
$$\Leftrightarrow \lambda_{1,2} = \pm\mu B$$

Die dazugehörigen Eigenzustände findet man durch Einsetzen in das Gleichungssystem

$$\left(-\frac{\mu B}{2} - \lambda\right)x + \mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}\mu B y = 0$$
$$-\mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}\mu B x + \left(\frac{\mu B}{2} - \lambda\right)y = 0$$

- $\underline{\lambda = \mu B}$ führt zu $y = -\mathrm{i}\sqrt{3}x$. Dann ist der Eigenzustand

  $$|\mu B\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -\mathrm{i}\sqrt{3} \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle - \mathrm{i}\sqrt{3}\,|\downarrow\rangle$$

  Bzw. normiert lautet der Zustand

  $$|\mu B\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle - \frac{\mathrm{i}\sqrt{3}}{2}|\downarrow\rangle$$

- $\underline{\lambda = -\mu B}$ führt zu $x = -\mathrm{i}\sqrt{3}y$. Dann ist der Eigenzustand

  $$|-\mu B\rangle = \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} = -\mathrm{i}\sqrt{3}\,|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle$$

  Bzw. normiert lautet der Zustand

  $$|-\mu B\rangle = -\frac{\mathrm{i}\sqrt{3}}{2}|\uparrow\rangle + \frac{1}{2}|\downarrow\rangle$$

Die Eigenwerte der Pauli-Matrix σ_1 sind

$$\det(\sigma_1 - \lambda \mathbb{1}_2) = \lambda^2 - 1 = 0 \Leftrightarrow \lambda_{1,2} = \pm 1$$

Die zugehörigen Eigenzustände sind

$$\begin{aligned} &\underline{\lambda = 1} \qquad |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \\ &\underline{\lambda = -1} \qquad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \end{aligned}$$

c) Die Zeitentwicklung eines Zustands ist durch den Operator

$$\hat{U}(t - t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$$

gegeben, wobei $\hat{H}$ der Hamilton-Operator ist. Da wir an der Zeitentwicklung der Eigenzustände des Hamilton-Operators interessiert sind, können wir $\hat{H}$ durch den jeweiligen Eigenwert ersetzen:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t - t_0)\,|\mu B\rangle &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu B(t-t_0)}\,|\mu B\rangle \\ \hat{U}(t - t_0)\,|-\mu B\rangle &= \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu B(t-t_0)}\,|-\mu B\rangle \end{aligned}$$

d) Um die Zeitentwicklung des Eigenzustands $|\psi_1\rangle$ zum positiven Eigenwert der Pauli-Matrix σ_1 zu bestimmen, werden wir den Zustand erst durch die Eigenzustände des Hamilton-Operators ausdrücken. Dazu projizieren wir den Zustand $|\psi_1\rangle$ auf die Zustände $|\mu B\rangle$ und $|-\mu B\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \mu B|\psi_1\rangle &= \frac{1}{2}\left(\langle\uparrow| + \mathrm{i}\sqrt{3}\,\langle\downarrow|\right)\cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\,(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) = \frac{1 + \mathrm{i}\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} =: a \\ \langle -\mu B|\psi_1\rangle &= \frac{1}{2}\left(+\mathrm{i}\sqrt{3}\,\langle\uparrow| + \langle\downarrow|\right)\cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\,(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) = \frac{1 + \mathrm{i}\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} = a \end{aligned}$$

Dann schreiben wir den Zustand als

$$|\psi_1\rangle = |\mu B\rangle\,\langle \mu B|\psi_1\rangle + |-\mu B\rangle\,\langle -\mu B|\psi_1\rangle = a\,(|\mu B\rangle + |-\mu B\rangle)\,.$$

Die Zeitentwicklung ist nun leicht abzulesen, wenn wir die Ergebnisse aus Aufgabenteil c) benutzen.

$$\hat{U}(t = T)\,|\psi_1\rangle = a\left(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu BT}\,|\mu B\rangle + \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu BT}\,|-\mu B\rangle\right)$$

Bevor wir den Erwartungswert für σ_1 berechnen, schauen wir zuerst wie σ_1 auf einen beliebigen Zustand wirkt:

$$\sigma_1\,|\phi\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix}$$

Insbesondere gilt daher

$$\sigma_1\,|\mu B\rangle = |-\mu B\rangle \quad \text{und} \quad \sigma_1\,|-\mu B\rangle = |\mu B\rangle\,.$$

Den Erwartungswert erhalten wir durch berechnen der Größe $\langle\psi_1|\hat{U}^*\sigma_1\hat{U}|\psi_1\rangle$. Wir setzen unser Ergebnis für die Zeitentwicklung des Zustands $|\psi_1\rangle$ ein und können σ_1 auf den zeitentwickelten Zustand wirken lassen

$$\begin{aligned} \langle\psi_1|\hat{U}^*\sigma_1\hat{U}|\psi_1\rangle &= |a|^2\left(\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu BT}\,\langle\mu B| + \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu BT}\,\langle-\mu B|\right)\cdot\sigma_1\cdot\left(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu BT}\,|\mu B\rangle + \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu BT}\,|-\mu B\rangle\right) \\ &= |a|^2\left(\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu BT}\,\langle\mu B| + \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu BT}\,\langle-\mu B|\right)\cdot\left(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu BT}\,|-\mu B\rangle + \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu BT}\,|\mu B\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{2\mu B}{\hbar}T} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{2\mu B}{\hbar}T}\right) \\ &= \cos\left(\frac{2\mu BT}{\hbar}\right). \end{aligned}$$

Der Erwartungswert für σ_1 ist also zeitlich nicht konstant und oszilliert zwischen $+1$ und -1. Da der Hamilton-Operator mit dem Operator σ_1 nicht vertauscht (vgl. Teilaufgabe a)), kann der Erwartungswert von σ_1 auch nicht konstant sein. Die Operatoren sind nicht gleichzeitig diagonalisierbar und die Eigenzustände der beiden Operatoren stimmen nicht überein.

3. *Translationsoperator*

a) Die Wellenfunktion $\psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ bildet den dreidimensionalen Raum in die komplexen Zahlen ab. Es geht hier um eine räumliche Verschiebung um die infinitesimale Länge $\mathrm{d}L$ in eine beliebige Richtung $\vec{e}$. Der Richtungsvektor soll auf 1 normiert sein. Die Taylor-Entwicklung in erster Ordnung lautet

$$\psi(\vec{x} + \mathrm{d}L\vec{e}) = \psi(\vec{x}) + \mathrm{d}L\,\vec{e}\cdot\nabla\psi(\vec{x}) = (1 + \mathrm{d}L\,\vec{e}\cdot\nabla)\,\psi(\vec{x}).$$

b) Eine Verschiebung um die endliche Strecke L lässt sich durch mehrfache Anwendung der Taylor-Entwicklung konstruieren. Wir teilen die Strecke L in n gleich große, infinitesimale Stücke $\mathrm{d}L$ auf:

$$\psi(\vec{x} + n\mathrm{d}L\vec{e}) = (1 + \mathrm{d}L\,\vec{e}\cdot\nabla)\,\psi(\vec{x} + (n-1)\mathrm{d}L) = \cdots = (1 + \mathrm{d}L\,\vec{e}\cdot\nabla)^n\,\psi(\vec{x})$$

c) Im Grenzfall $n \to \infty$ finden wir die Exponentialfunktion:

$$\psi(\vec{x} + L\vec{e}) = \lim_{n\to\infty} (1 + \mathrm{d}L\,\vec{e}\cdot\nabla)^n\,\psi(\vec{x}) = \mathrm{e}^{L\vec{e}\cdot\nabla}\psi(\vec{x})$$

d) Der Impulsoperator in Ortsdarstellung hat die Form $\hat{\mathrm{P}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$. Dann können wir das Argument der Exponentialfunktion umschreiben

$$L\vec{e}\cdot\nabla = \mathrm{i}\frac{L}{\hbar}\vec{e}\cdot\hat{\mathrm{P}}$$

Der gesuchte Translationsoperator ist also

$$\hat{T}(\vec{a}) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{a}\cdot\hat{\mathrm{P}}},$$

wobei $\vec{a}$ der Verschiebungsvektor ist. Man nennt den Impulsoperator den Generator der räumlichen Translationen.

e) Der Kommutator hat folgende Form:

$$\begin{aligned}
[\hat{T}(\vec{a}), \hat{H}] &= \hat{T}(\vec{a})\hat{H} - \hat{H}\hat{T}(\vec{a}) \\
&= \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{a}\hat{P}}\,\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{a}\hat{P}} \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\mathrm{i}/\hbar)^n}{n!}\left(\vec{a}\cdot\hat{\mathrm{P}}\right)^n\nabla^2 - \nabla^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\mathrm{i}/\hbar)^n}{n!}\left(\vec{a}\cdot\hat{\mathrm{P}}\right)^n\right) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\vec{a}\cdot\nabla)^n\nabla^2 - \nabla^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\vec{a}\cdot\nabla)^n\right) = 0
\end{aligned}$$

Der Kommutator verschwindet, weil die partiellen Ableitungen nach den Raumrichtungen vertauschen (*Satz von Schwarz*). Damit haben wir natürlich gezeigt, dass der Kommutator des Hamilton-Operators für ein freies Teilchen mit dem Translationsoperator aber auch mit dem Impulsoperator vertauscht. Also vertauschen der Generator der kontinuierlichen Symmetrieoperation (Translation) und der Hamilton-Operator. Daher gilt Impulserhaltung.

An dieser Stelle schimmert das Noether-Theorem durch, welches Ihnen aus der klassischen Mechanik bereits vertraut ist. Dieses besagt, dass zu jeder kontinuierlichen Symmetrie eines physikalischen Systems eine Erhaltungsgröße gehört. Dies gilt auch in der Quantenmechanik und Sie werden dies in Kapitel 7 noch detaillierter besprechen.

4. *Spinalgebra im Produktraum*

a) Für die Wirkung der Pauli-Matrizen auf die beiden Spinzustände gilt,

$$\sigma_1 |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle\,, \qquad \sigma_1 |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle\,,$$

$$\sigma_2 |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} = \mathrm{i}\,|\downarrow\rangle\,, \qquad \sigma_2 |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathrm{i} \\ 0 \end{pmatrix} = -\mathrm{i}\,|\uparrow\rangle\,,$$

$$\sigma_3 |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle\,, \qquad \sigma_3 |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = -\,|\downarrow\rangle\,.$$

b) Die Wirkung von $\hat{\Sigma}_i$ auf das Tensorprodukt zweier Zustände $|f\rangle$ und $|g\rangle$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_i\,(|f\rangle \otimes |g\rangle) &= (\hat{S}_i \otimes \hat{I})\,(|f\rangle \otimes |g\rangle) + (\hat{I} \otimes \hat{S}_i)\,(|f\rangle \otimes |g\rangle) \\ &= \hat{S}_i\,|f\rangle \otimes |g\rangle + |f\rangle \otimes \hat{S}_i\,|g\rangle\,.\end{aligned}$$

$\hat{\vec{\Sigma}}^2$ angewandt auf $|f\rangle \otimes |g\rangle$ ergibt

$$\begin{aligned}\hat{\vec{\Sigma}}^2 &= \sum_{i=1}^{3} \hat{\Sigma}_i \left[\hat{\Sigma}_i\,(|f\rangle \otimes |g\rangle)\right] = \sum_{i=1}^{3} (\hat{S}_i \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{S}_i)\,(\hat{S}_i\,|f\rangle \otimes |g\rangle + |f\rangle \otimes \hat{S}_i\,|g\rangle) \\ &= \sum_{i=1}^{3} \left[\hat{S}_i^2\,|f\rangle \otimes |g\rangle + 2\,\hat{S}_i\,|f\rangle \otimes \hat{S}_i\,|g\rangle + |f\rangle \otimes \hat{S}_i^2\,|g\rangle\right] \\ &= \hat{\vec{S}}^2\,|f\rangle \otimes |g\rangle + |f\rangle \otimes \hat{\vec{S}}^2\,|g\rangle + 2\sum_{i=1}^{3} \hat{S}_i\,|f\rangle \otimes \hat{S}_i\,|g\rangle\,.\end{aligned}$$

Daraus folgt also

$$\hat{\vec{\Sigma}}^2 = \hat{\vec{S}}^2 \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{\vec{S}}^2 + 2\sum_{i=1}^{3} \hat{S}_i \otimes \hat{S}_i.$$

c) Benutze im Folgenden, dass

$$\hat{\vec{S}}^2 = \sum_{i=1}^{3} \left(\frac{\hbar}{2}\sigma_i\right)\left(\frac{\hbar}{2}\sigma_i\right) = \frac{\hbar^2}{4}\sum_{i=1}^{3} \hat{I} = \frac{3}{4}\hbar^2 \hat{I}.$$

(i)

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_3\,|\uparrow\uparrow\rangle &= \hat{S}_3\,|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + |\uparrow\rangle \otimes \hat{S}_3\,|\uparrow\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2}\,|\uparrow\uparrow\rangle + \frac{\hbar}{2}\,|\uparrow\uparrow\rangle = \hbar\,|\uparrow\uparrow\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{\vec{\Sigma}}^2\,|\uparrow\uparrow\rangle &= \hat{\vec{S}}^2\,|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + |\uparrow\rangle \otimes \hat{\vec{S}}^2\,|\uparrow\rangle + 2\sum_{i=1}^{3} \hat{S}_i\,|\uparrow\rangle \otimes \hat{S}_i\,|\uparrow\rangle \\ &= \frac{3}{4}\hbar^2\,|\uparrow\uparrow\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2\,|\uparrow\uparrow\rangle + 2\cdot\frac{1}{4}\hbar^2\Big[\underbrace{|\downarrow\downarrow\rangle + \mathrm{i}^2\,|\downarrow\downarrow\rangle}_{=0} + |\uparrow\uparrow\rangle\Big] = 2\hbar^2\,|\uparrow\uparrow\rangle\end{aligned}$$

(ii)

$$\hat{\Sigma}_3 |{\downarrow\downarrow}\rangle = \hat{S}_3 |{\downarrow}\rangle \otimes |{\downarrow}\rangle + |{\downarrow}\rangle \otimes \hat{S}_3 |{\downarrow}\rangle$$
$$= -\frac{\hbar}{2} |{\downarrow\downarrow}\rangle - \frac{\hbar}{2} |{\downarrow\downarrow}\rangle = -\hbar |{\downarrow\downarrow}\rangle$$

$$\hat{\vec{\Sigma}}^2 |{\downarrow\downarrow}\rangle = \hat{\vec{S}}^2 |{\downarrow}\rangle \otimes |{\downarrow}\rangle + |{\downarrow}\rangle \otimes \hat{\vec{S}}^2 |{\downarrow}\rangle + 2 \sum_{i=1}^{3} \hat{S}_i |{\downarrow}\rangle \otimes \hat{S}_i |{\downarrow}\rangle$$
$$= \frac{3}{4}\hbar^2 |{\downarrow\downarrow}\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2 |{\downarrow\downarrow}\rangle + 2 \cdot \frac{1}{4}\hbar^2 \Big[\underbrace{|{\uparrow\uparrow}\rangle + (-\mathrm{i})^2 |{\uparrow\uparrow}\rangle}_{=0} + (-1)^2 |{\downarrow\downarrow}\rangle\Big] = 2\hbar^2 |{\downarrow\downarrow}\rangle$$

(iii) & (iv)

$$\hat{\Sigma}_3 \frac{1}{\sqrt{2}}(|{\uparrow\downarrow}\rangle \pm |{\downarrow\uparrow}\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\hat{S}_3 |{\uparrow}\rangle \otimes |{\downarrow}\rangle \pm \hat{S}_3 |{\downarrow}\rangle \otimes |{\uparrow}\rangle + |{\uparrow}\rangle \otimes \hat{S}_3 |{\downarrow}\rangle \pm |{\downarrow}\rangle \otimes \hat{S}_3 |{\uparrow}\rangle\right]$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\hbar}{2} |{\uparrow\downarrow}\rangle \mp \frac{\hbar}{2} |{\downarrow\uparrow}\rangle - \frac{\hbar}{2} |{\uparrow\downarrow}\rangle \pm \frac{\hbar}{2} |{\downarrow\uparrow}\rangle\right] = 0$$

$$\hat{\vec{\Sigma}}^2 |{\uparrow\downarrow}\rangle = \hat{\vec{S}}^2 |{\uparrow}\rangle \otimes |{\downarrow}\rangle + |{\uparrow}\rangle \otimes \hat{\vec{S}}^2 |{\downarrow}\rangle + 2 \sum_{i=1}^{3} \hat{S}_i |{\uparrow}\rangle \otimes \hat{S}_i |{\downarrow}\rangle$$
$$= \frac{3}{4}\hbar^2 |{\uparrow\downarrow}\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2 |{\uparrow\downarrow}\rangle + \frac{1}{2}\hbar^2 \Big[|{\downarrow\uparrow}\rangle + \mathrm{i}(-\mathrm{i}) |{\downarrow\uparrow}\rangle + (-1) |{\uparrow\downarrow}\rangle\Big]$$
$$= \hbar^2 |{\uparrow\downarrow}\rangle + \hbar^2 |{\downarrow\uparrow}\rangle$$

$$\hat{\vec{\Sigma}}^2 |{\downarrow\uparrow}\rangle = \hat{\vec{S}}^2 |{\downarrow}\rangle \otimes |{\uparrow}\rangle + |{\downarrow}\rangle \otimes \hat{\vec{S}}^2 |{\uparrow}\rangle + 2 \sum_{i=1}^{3} \hat{S}_i |{\downarrow}\rangle \otimes \hat{S}_i |{\uparrow}\rangle$$
$$= \frac{3}{4}\hbar^2 |{\downarrow\uparrow}\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2 |{\downarrow\uparrow}\rangle + \frac{1}{2}\hbar^2 \Big[|{\uparrow\downarrow}\rangle + (-\mathrm{i})\mathrm{i} |{\uparrow\downarrow}\rangle + (-1) |{\downarrow\uparrow}\rangle\Big]$$
$$= \hbar^2 |{\downarrow\uparrow}\rangle + \hbar^2 |{\uparrow\downarrow}\rangle$$

$$\hat{\vec{\Sigma}}^2 \frac{1}{\sqrt{2}}(|{\uparrow\downarrow}\rangle + |{\downarrow\uparrow}\rangle) = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}}(|{\uparrow\downarrow}\rangle + |{\downarrow\uparrow}\rangle + |{\downarrow\uparrow}\rangle + |{\uparrow\downarrow}\rangle)$$
$$= 2\hbar^2 \frac{1}{\sqrt{2}}(|{\uparrow\downarrow}\rangle + |{\downarrow\uparrow}\rangle)$$
$$\hat{\vec{\Sigma}}^2 \frac{1}{\sqrt{2}}(|{\uparrow\downarrow}\rangle - |{\downarrow\uparrow}\rangle) = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}}(|{\uparrow\downarrow}\rangle + |{\downarrow\uparrow}\rangle - |{\downarrow\uparrow}\rangle - |{\uparrow\downarrow}\rangle)$$
$$= 0$$