Übungen zur Vorlesung
Theoretische Physik III für LAG
(Quantenmechanik und Statistische Physik)

SS 2013 **Lösungsvorschlag Blatt 10** **10.07.2013**

Aufgabe 4 *Reprise: Der Stern-Gerlach-Versuch*

a) Da nur die Bewegung in z-Richtung quantenmechanisch betrachtet werden soll, enthält der Hamiltonoperator den kinetischen Term in dieser Richtung:

$$\hat{H}_{kin} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m}$$

Mit dem anliegenden B-Feld kann nur der Spin-Freiheitsgrad wechselwirken. Die potentielle Energie für diese Wechselwirkung ist

$$\hat{H}_{pot} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} = -\mu_B g_s \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}.$$

mit $\mu_B = \frac{e}{2m_e}\hbar$, dem Bohrschen Magneton und g_s, dem Landé-Faktor (≈ 2 für Elektronen). Einsetzen der magnetischen Flussdichte $\mathbf{B} = (B_0 + \beta z)\mathbf{e}_z$ ergibt den angegebenen Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \hat{H}_{kin} + \hat{H}_{pot} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} - \mu_B g_s (B_0 + \beta \hat{z})\hat{S}_z$$

mit $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$.

b) Die formale Berechnung der Zeitentwicklung erfolgt wie üblich durch Anwendung des Zeitentwicklungsoperators $\hat{U} = \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)$ auf den Anfangszustand:

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\psi\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle + |-\rangle\right)|\phi\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\Bigg(-\frac{i}{\hbar}\underbrace{\left(\frac{\hat{p}_z^2}{2m} - \frac{\hbar}{2}\mu_B g_s(B_0+\beta\hat{z})\right)}_{=:\hat{H}_+}t\Bigg)|+\rangle|\phi\rangle \\
&+ \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\Bigg(-\frac{i}{\hbar}\underbrace{\left(\frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hbar}{2}\mu_B g_s(B_0+\beta\hat{z})\right)}_{=:\hat{H}_-}t\Bigg)|-\rangle|\phi\rangle
\end{aligned}$$

c) Wir betrachten die Zeitentwicklung des Plusstrahls bzw. Minustrahls getrennt, die zugehörigen Terme im Hamiltonoperator $\hat{H}_+$ und $\hat{H}_-$ unterscheiden sich jeweils durch ein Vorzeichen:

$$\hat{H}_\pm = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \mp \frac{\hbar}{2}\mu_B g_s(B_0 + \beta\hat{z})$$

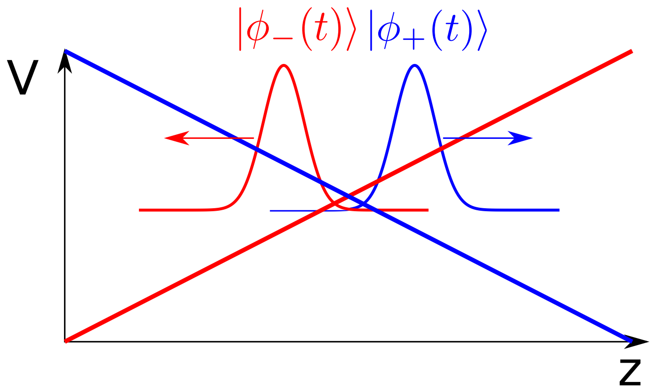


Abbildung 1: Skizze der Wellenfunktionen für den Plusstrahl (blau) und den Minusstrahl (rot). Die beiden Strahlen sehen lineare Potentiale mit unterschiedlichen Vorzeichen. Aus klassischen Überlegungen erwarten wir, dass der Plusstrahl in positive und der Minusstrahl in negative z-Richtung abgelenkt wird. Die korrekte zeitliche Entwicklung erfolgt in Airy-Funktionen.

Wir berechnen für beide Anteile die Zeitentwicklung des Erwartungswertes der z-Koordinate:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{z}(t)\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{z}(t),\hat{H}_\pm\right]\right\rangle\\ &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{z}(t),\frac{\hat{p}_z^2(t)}{2m}\mp\frac{\hbar}{2}\mu_B g_s(B_0+\beta\hat{z}(t))\right]\right\rangle\\ &= \frac{1}{2mi\hbar}\left\langle\underbrace{\left[\hat{z}(t),\hat{p}_z^2(t)\right]}_{=2i\hbar\hat{p}_z(t)}\right\rangle = \frac{\langle\hat{p}_z(t)\rangle}{m}\end{aligned}$$

Zur Berechung der Zeitentwicklung des Erwartungswertes der z-Koordinate benötigen wir also die Zeitentwicklung von $\langle\hat{p}_z(t)\rangle$:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{p}_z(t)\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{p}_z(t),\hat{H}_\pm\right]\right\rangle\\ &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{p}_z(t),\frac{\hat{p}_z^2(t)}{2m}\mp\frac{\hbar}{2}\mu_B g_s(B_0+\beta\hat{z}(t))\right]\right\rangle\\ &= \pm\frac{1}{i\hbar}\mu_B g_s\frac{\hbar}{2}\beta\langle -i\hbar\rangle = \pm\mu_B g_s\frac{\hbar}{2}\beta\\ \Longrightarrow \langle\hat{p}_z(t)\rangle &= \pm\mu_B g_s\frac{\hbar}{2}\beta t =: \pm Ft\end{aligned}$$

Einsetzen in die Gleichung für die Zeitentwicklung der z-Koordinate liefert:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{z}(t)\rangle = \pm\frac{F}{m}t \Longrightarrow \langle\hat{z}(t)\rangle = \pm\frac{F}{2m}t^2$$

mit den Anfangsbedingungen $\langle\hat{z}(t=0)\rangle = \langle\hat{p}_z(t=0)\rangle = 0$. Die Wellenpakete laufen also in entgegengesetzten Richtungen auseinander. Weiter geht's mit der Berechnung der

Erwartungswerte der höheren Momente von z:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\left\langle \hat{z}^2(t)\right\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{z}^2(t), \hat{H}_\pm\right]\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{z}^2(t), \frac{\hat{p}_z^2(t)}{2m} \mp \frac{\hbar}{2}\mu_B g_s(B_0+\beta\hat{z}(t))\right]\right\rangle \\
&= \frac{1}{2mi\hbar}\left\langle\left[\hat{z}^2(t), \hat{p}_z^2(t)\right]\right\rangle = \frac{1}{2mi\hbar}\left\langle \hat{z}(t)\left[\hat{z}(t), \hat{p}_z^2(t)\right] + \left[\hat{z}(t), \hat{p}_z^2(t)\right]\hat{z}(t)\right\rangle \\
&= \frac{1}{m}\left\langle \hat{z}(t)\hat{p}_z(t) + \hat{p}_z(t)\hat{z}(t)\right\rangle = \frac{1}{m}\left\langle 2\hat{z}(t)\hat{p}_z(t) - i\hbar\right\rangle \\
&= \frac{2}{m}\left\langle \hat{z}(t)\hat{p}_z(t)\right\rangle - \frac{i\hbar}{m}
\end{aligned}$$

Erneut müssen wir zuerst die Zeitentwicklung eines anderen Operators berechnen, bevor wir mit der Berechnung von $\frac{d}{dt}\left\langle \hat{z}^2(t)\right\rangle$ fortfahren können:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\left\langle \hat{z}(t)\hat{p}_z(t)\right\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{z}(t)\hat{p}_z(t), \hat{H}_\pm\right]\right\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left\langle \hat{z}(t)\left[\hat{p}_z(t), \hat{H}_\pm\right] + \left[\hat{z}(t), \hat{H}_\pm\right]\hat{p}_z(t)\right\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left\langle \hat{z}(t)(\pm i\hbar\mu_B g_s\frac{\hbar}{2}\beta) + \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_z^2(t)\right\rangle \\
&= \frac{F^2}{2m}t^2 + \frac{1}{m}\left\langle \hat{p}_z^2(t)\right\rangle
\end{aligned}$$

Wir fahren also mit der Berechnung der Zeitentwicklung von $\left\langle \hat{p}_z^2(t)\right\rangle$ fort:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\left\langle \hat{p}_z^2(t)\right\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{p}_z^2(t), \hat{H}_\pm\right]\right\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left\langle \hat{p}_z(t)\left[\hat{p}_z(t), \hat{H}_\pm\right] + \left[\hat{p}_z(t), \hat{H}_\pm\right]\hat{p}_z(t)\right\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left\langle \hat{p}_z(t)(\pm i\hbar F) \pm i\hbar F\hat{p}_z(t)\right\rangle \\
&= \pm 2F\left\langle \hat{p}_z(t)\right\rangle = 2F^2 t \\
\Longrightarrow \left\langle \hat{p}_z^2(t)\right\rangle &= F^2t^2 + p_{0,z}^2
\end{aligned}$$

Eingesetzt in die Formel für $\frac{d}{dt}\left\langle \hat{z}(t)\hat{p}_z(t)\right\rangle$:

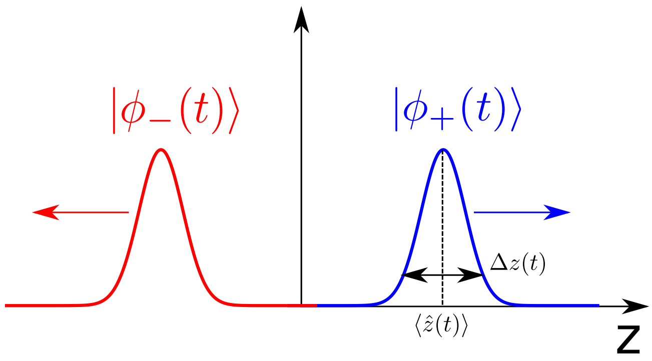
$$\begin{aligned}
\Longrightarrow \frac{d}{dt}\left\langle \hat{z}(t)\hat{p}_z(t)\right\rangle &= \frac{F^2}{2m}t^2 + \frac{F^2}{m}t^2 + \frac{p_{0,z}^2}{m} \\
\Longrightarrow \left\langle \hat{z}(t)\hat{p}_z(t)\right\rangle &= \frac{F^2}{2m}t^3 + \frac{p_{0,z}^2}{m}t + \underbrace{\left\langle \hat{z}(t=0)\hat{p}_z(t=0)\right\rangle}_{\frac{i\hbar}{2}} \\
&= \frac{F^2}{2m}t^3 + \frac{p_{0,z}^2}{m}t + \frac{i\hbar}{2}
\end{aligned}$$

Eingesetzt in die Formel für die Zeitentwicklung von $\left\langle \hat{z}^2(t)\right\rangle$:

$$\begin{aligned}
\Longrightarrow \frac{d}{dt}\left\langle \hat{z}^2(t)\right\rangle &= \frac{F^2}{m^2}t^3 + 2\frac{p_{0,z}^2}{m^2}t + \frac{i\hbar}{m} - \frac{i\hbar}{m} \\
\Longrightarrow \left\langle \hat{z}^2(t)\right\rangle &= \frac{F^2}{4m^2}t^4 + \frac{p_{0,z}^2}{m^2}t^2 + z_0^2
\end{aligned}$$

Schließlich können wir $\Delta z(t)$ berechnen:

$$\implies (\Delta z(t))^2 = \langle \hat{z}^2(t) \rangle - \langle \hat{z}(t) \rangle^2 = \frac{p_{0,z}^2}{m^2} t^2 + z_0^2$$
$$\implies \Delta z(t) = \sqrt{\frac{p_{0,z}^2}{m^2} t^2 + z_0^2}$$



Auseinanderlaufen der Wellenpakete von Plus- und Minusstrahl. Überlapp der Wellenfunktionen kann vernachlässigt werden, wenn halbe Breite der Wellenfunktion kleiner als $\langle \hat{z}(t) \rangle$.

$$\implies 2\langle \hat{z}(t) \rangle > \Delta z(t)$$
$$\frac{F^2}{m^2} t^4 > \frac{p_{0,z}^2}{m^2} t^2 + z_0^2$$
$$\implies t > \frac{p_{0,z}^2}{2F} + \sqrt{z_0^2 m^2 + \frac{p_{0,z}^4}{4F^4}} =: t^*$$

Überlapp von Plus- und Minusstrahl für $t > t^*$ vernachlässigbar.

d) Aus Aufgabenteil a) ist die Zeitentwicklung des Zustandes bekannt.

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Bigg(\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hbar}{2}\mu_B g_s (B_0 + \beta \hat{z})\right)t} |\phi\rangle}_{=:|\phi_+(t)\rangle} |+\rangle + \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hat{p}_z^2}{2m} - \frac{\hbar}{2}\mu_B g_s (B_0 + \beta \hat{z})\right)t} |\phi\rangle}_{=:|\phi_-(t)\rangle} |-\rangle \Bigg)$$

$$\implies |\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_+\rangle |+\rangle + |\phi_-\rangle |-\rangle \right)$$

Der Dichteoperator dieses reinen Zustands ist

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| &= \frac{1}{2} \left(|\phi_+\rangle |+\rangle + |\phi_-\rangle |-\rangle \right) \left(\langle \phi_+| \langle +| + \langle \phi_-| \langle -| \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(|\phi_+\rangle |+\rangle \langle +| \langle \phi_+| + |\phi_+\rangle |+\rangle \langle -| \langle \phi_-| + |\phi_-\rangle |-\rangle \langle +| \langle \phi_+| + |\phi_-\rangle |-\rangle \langle -| \langle \phi_-| \right). \end{aligned}$$

Im Folgenden wird die Teilspur über den Ort berechnet.

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}_x(\hat{\rho}(t)) &= \int dx \, \langle x| \hat{\rho} |x\rangle \\ &= \frac{1}{2} \int dx \, \big(\langle x|\phi_+\rangle |+\rangle \langle +| \langle \phi_+|x\rangle + \langle x|\phi_+\rangle |+\rangle \langle -| \langle \phi_-|x\rangle \\ &+ \langle x|\phi_-\rangle |-\rangle \langle +| \langle \phi_+|x\rangle + \langle \phi_-|x\rangle |-\rangle \langle -| \langle \phi_-|x\rangle \big) \end{aligned}$$

Oder analog zur Vorlesung durch “Umklappen„der Bra-Kets:

$$\mathrm{Tr}_x(\hat{\rho}(t)) = \frac{1}{2}\left(\left|+\right\rangle\left\langle+\right| + \left\langle\phi_-|\phi_+\right\rangle\left|+\right\rangle\left\langle-\right| + \left\langle\phi_+|\phi_-\right\rangle\left|-\right\rangle\left\langle+\right| + \left|-\right\rangle\left\langle-\right|\right)$$

Darstellung in $\hat{\sigma}_z$-Basis:

$$\mathrm{Tr}_x(\hat{\rho}(t)) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \left\langle\phi_-|\phi_+\right\rangle(t) \\ \left\langle\phi_+|\phi_-\right\rangle(t) & 1 \end{pmatrix}$$

Die reduzierte Dichtematrix $\mathrm{Tr}_x(\hat{\rho}(t))$ beschreibt nur für $t = 0$ einen reinen Zustand. Für $t > 0$ handelt es sich um ein Gemisch. Aus Teil e) wissen wir, dass der Überlapp der Wellenpakete von Plusstrahl und Minusstrahl für $t > t^*$ zu vernachlässigen ist. Es folgt für $t > t^*$ mit $\left\langle\phi_-|\phi_+\right\rangle = \left\langle\phi_+|\phi_-\right\rangle = 0$:

$$Tr_x(\hat{\rho}(t)) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Für $t > t^*$ liegt also ein Gemisch von Spins im Zustand $\left|+\right\rangle$ und $\left|-\right\rangle$ vor. Im Gegensatz dazu beschreibt die Dichtematrix $\hat{\rho}(t)$ für alle Zeiten einen reinen Zustand, da $\hat{\rho}(t) = \left|\psi(t)\right\rangle\left\langle\psi(t)\right|$ einen reinen Zustand darstellt.