

QUANTENMECHANIK I

Vorlesungsmotizen

Hölger Gies

TP1, FSU Jena

Inhalt

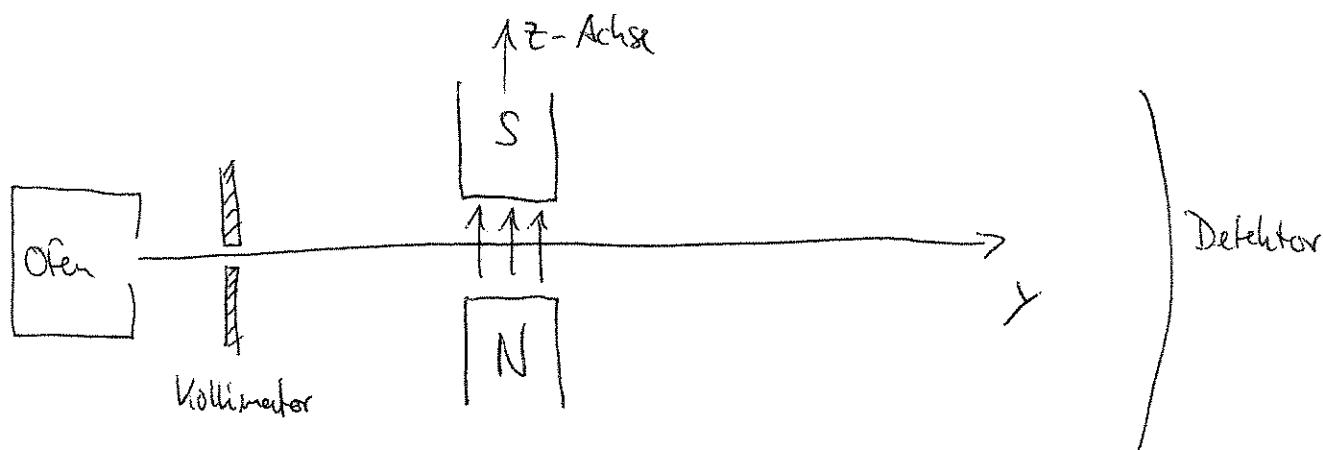
- 1 Fundamentale Konzepte
- 2 Formalismus der Quantenmechanik
- 3 Zeitentwicklung
- 4 Eindimensionale Systeme
- 5 Der harmonische Oszillator
- 6 Symmetrien in der Quantenmechanik
- 7 Das Wasserstoff-Atom
- 8 Stationäre Näherungsverfahren

1 Fundamentale Konzepte

Anstelle einer Einführung in die Quantenmechanik entlang der historischen Entwicklung beginnen wir mit einem Beispiel, das die Konzepte der Quantenmechanik besonders leicht illustriert:

1.1 Das Stern-Gerlach-Experiment

Im dem von O. Stern 1921 erdachten und von O. Stern & W. Gerlach 1922 ausgeführten Experiment werden Silberatome in einem gebündelten Strahl durch ein inhomogenes Magnetfeld geschickt und anschließend auf einem Schirm detektiert.



Silber hat ein magnetisches Moment $\vec{\mu}$.

das im Wesentlichen durch den Spin des 47. Elektrons gegeben ist. Da die Wechselwirkung des magnetischen Moments eine Energie $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ hat, erfährt das Atom im inhomogenen Magnetfeld eine Kraft. Gibt es nur eine Inhomogenität in z Richtung, so ist die Kraft gegeben durch

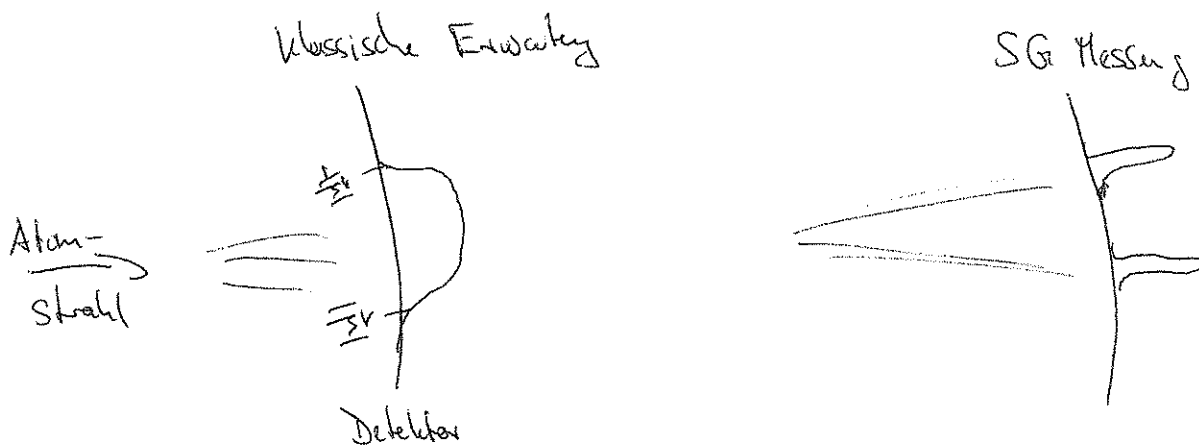
$$F_z = \frac{\partial}{\partial z} (\vec{\mu} \cdot \vec{B}) \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

in z-Richtung. Die Atome werden also je nach Größe der z-Komponente von $\vec{\mu}$ abgelenkt. Der SG- (Stem-Gericht) Apparat misst also die z-Komponente von $\vec{\mu}$, bzw. die z-Komponente des Elektron spins.

Da die Orientierung der Atome aus dem Ofen zufallsverteilt ist, hat $\vec{\mu}$ anfangs keine Vorzugsrichtung. Entstände das magnetische Moment rein klassisch z.B. durch Lachysrotationen,

so wäre auf dem Detektor eine kontinuierliche Verteilung von p_z zwischen $-\hbar/2$ und $\hbar/2$ zu erwarten.

Stattdessen zeigt das Experiment, dass der Strahl in genau zwei Komponenten aufgespalten wird.



D.h. der Elektron-Spin kann nur zwei verschiedene Einstellungen seiner z-Komponente haben "Spin up" und "Spin down". Die Messung ergibt

$S_z = \hbar/2$ oder $S_z = -\hbar/2$ für den Elektron-spin, wobei die Konstante \hbar gegeben ist durch

$$\hbar = 6.5822 \cdot 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}, \quad (1.1)$$

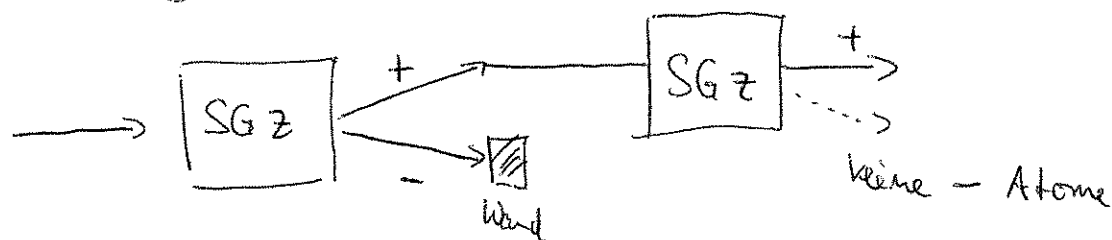
wobei \hbar das (reduzierte) Plancksche Wirkungsquantum ist $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. Der Spin ist also bezüglich seiner z-Komponente "quantisiert".

Selbstverständlich hat die z-Richtung keine besondere Bedeutung gegenüber z.B. der x-Richtung.

Ein SG Apparat in x-Richtung würde $S_x = \hbar/2$ oder $S_x = -\hbar/2$ messen.

Besonders interessant wird daher eine Sequenz von SG-Apparaten.

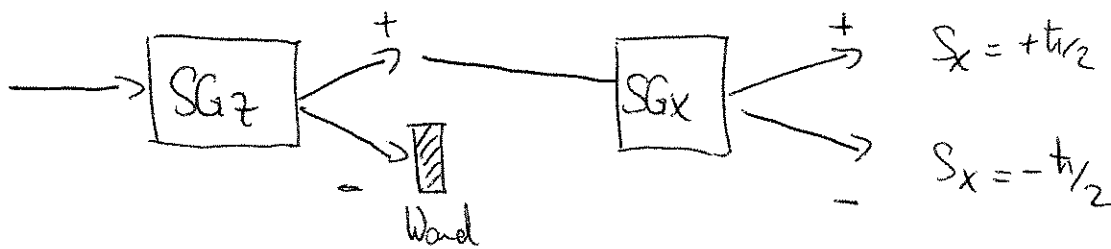
Betrachten wir zunächst zwei SG Apparate in z-Richtung:



Sortieren wir die spin-down Atome nach dem ersten Apparat aus, ist es wenig verwunderlich, dass aus dem zweiten

Apparat auch nur spin-up Atome herauskommen.
 Der SG_z -Apparat ändert also die Ausrichtung der
 "z-Atome" nicht.

Drehen wir jedoch die Inhomogenität des B-
 Feldes in x-Richtung, so finden wir
 folgendes:

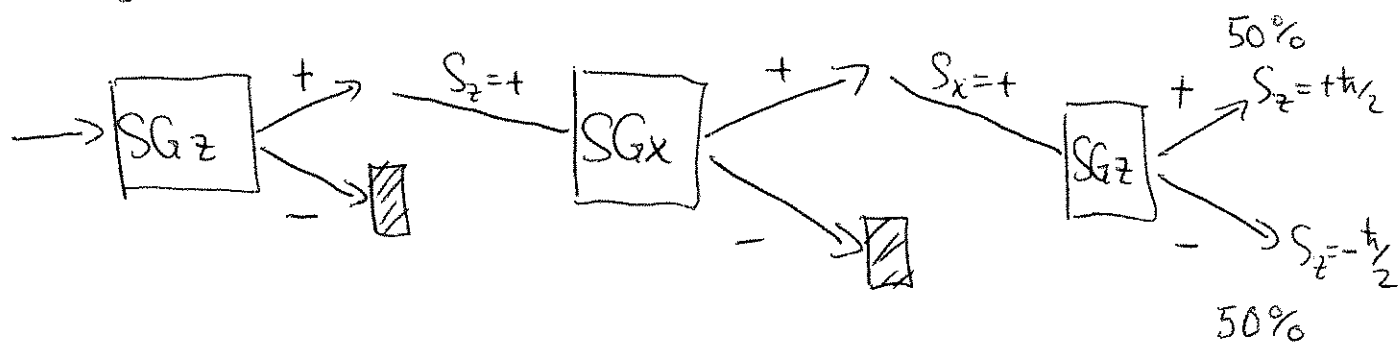


Im Detektor sind die Hälfte jeweils Spin-up
 oder spin-down Atome bezüglich der x-Achse.

Klassisch wären wir versucht zu sagen, dass
 die Atome bestimmt sind durch ihren S_z -
 Wert und ihren S_x -Wert. Es gäbe
 demnach 4 Atomsorten $(S_x=+, S_z=+)$, $(+, -)$, $(-, +)$, $(-, -)$.

Dass diese Interpretation falsch ist, zeigt

folgendes SG-Aufbau:



Nach Passage von $S_x = +\frac{\hbar}{2}$ ausgerichteten Atomen durch den SGz Apparat finden sich wieder $S_z = \pm\frac{\hbar}{2}$ Atome im Strahl. Die gesamte klassische Deutung ist damit ausgeschlossen.

Wie kann also die $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ Komponente, die zunächst herausgefilitet worden ist, wieder im Strahl erscheinen.

Die SGx - Messung muss folglich die Ausrichtung der $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ Atome beeinflussen; sogar soweit, dass die $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ Information völlig zerstört wird.

In der Quantenmechanik, die wir im Folgenden entwickeln wollen, lassen sich also S_z und S_x

Komponente des Spins nicht gleichzeitig bestimmen.

Wie lässt sich dieses (Gedanken-) Experiment formalisieren?

Offensichtlich ist die Information "spin-up" oder "spin-down" bezüglich einer Achse die größtmögliche Menge an Information mit der wir die Atome beschreiben können. Die Atome liegen im SG-Experiment in zwei Zuständen vor, z.B.

$$|S_{zi}+\rangle \text{ und } |S_{zi}-\rangle. \quad (1.2)$$

Hier haben wir die "Ket"-Notation von Dirac verwendet. Da wir es mit zwei Zuständen zu tun haben, können wir (1.2) auch als Zustandsvektoren in einem 2-dimensionalen Raum auffassen, z.B. $|S_{zi}+\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|S_{zi}-\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Wenn wir nun den $|S_{zi}+\rangle$ Zustand durch den SGx Apparat schicken, finden wir

jeweils zur Hälfte $|S_{xi+}\rangle$ und $|S_{xi-}\rangle$ Zustände;
(ähnlich würde es uns mit dem $|S_{zi-}\rangle$ Staat gehen).

Da (1.2) die größtmögliche Menge an Information darstellt, muss ein linearer Zusammenhang bestehen, z.B.:

$$\begin{aligned} |S_{zi+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{xi+}\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{xi-}\rangle \\ |S_{zi-}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{xi+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{xi-}\rangle \end{aligned} \quad (1.3)$$

Die Vorzeichen sind konventionsbedingt, wie später klar wird; lediglich ihr ~~Absolut~~ Betrag ist von physikalischer Bedeutung. (1.3) besagt z.B. dass

$|S_{zi+}\rangle$ verstanden werden kann als zu gleichen Teilen bestehend aus $|S_{xi+}\rangle$ und $|S_{xi-}\rangle$, was das SGX Experiment beschreibt. (1.3) lässt sich nach $|S_{xi+}\rangle$ und $|S_{xi-}\rangle$ auflösen,

$$\begin{aligned} |S_{xi+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{zi+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{zi-}\rangle \\ |S_{xi-}\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |S_{zi+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{zi-}\rangle. \end{aligned} \quad (1.4)$$

In der Tat sehen wir nun, dass der $S_x = +\frac{\hbar}{2}$ Strahl nach dem SGz Apparat jeweils wieder hälftig die Komponenten $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ und $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ vorweisen wird.

Unser Formalismus beruhend auf der Annahme, dass die Unterscheidung in zwei Zustände die maximale Information wiedergibt, beschreibt also das sequentielle SG-Experiment!

Es gibt nun aber noch eine weitere Komplikation: für einen Atomstrahl in x-Richtung erwarten wir für ein SG-Experiment mit y-Ausrichtung ähnliche Eigenschaften. D.h. die dann zu messenden Zustände $|S_y; +\rangle$ und $|S_y; -\rangle$ sollten ähnliche Relationen mit $|S_z; \pm\rangle$ und $|S_x; \pm\rangle$ erfüllen wie (1.3 & 1.4). D.h. $|S_y; \pm\rangle$ sollten jeweils durch $|S_z; \pm\rangle$ oder $|S_x; \pm\rangle$

aufspannbar sein mit betragsmäßig gleichen Koeffizienten, aber z.B. $|S_y; +\rangle$ soll nicht kollinear mit nur einem dieser Vektoren sein.

Diese Forderung ist mit reellen Koeffizienten nicht zu erreichen. Wir sind also gezwungen, einen komplexen Zusammenhang zuzulassen, z.B.:

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; +\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}} |S_z; -\rangle. \quad (1.5)$$

Damit ist der Zustandsraum des Spins eines Silberatoms (oder Elektrons) ein komplexer Vektorraum. Ein allgemeines Zustand ist dann eine Linearkombination aus Basisvektoren z.B. $|S_z; \pm\rangle$ mit komplexen Koeffizienten.

1.2 Kets, Bras und Operatoren -

Grundzüge des Formalismus der Quantenmechanik

Im Folgenden wollen wir elementare Grundzüge des Formalismus der Quantenmechanik einführen. Dabei geht es um eine erste Einführung und weniger um mathematische Strenge. Die Theorie linearer komplexer Vektorräume in unendlichen Dimensionen lässt sich rigoros mathematisch formulieren. In dieser Vorlesung sollen die Strukturen jedoch nur insoweit eingeführt werden, wie sie für ein physikalisches Verständnis der Quantenmechanik notwendig sind. Des Weiteren werden wir die Diracsche Notation verwenden, weil sie für die Quantenmechanik sehr zweckmäßig ist.

1.2.1 Der Raum der Ket Vektoren

Wir betrachten einen komplexen Vektorraum, dessen Dimensionalität der Zahl der möglichen Zustände entspricht, die ein gegebenes physikalisches System

einnehmen kann. z.B. im Fall des Stern-Gerlach-Experiments können die Silberatome zwei Trajektorien folgen, so dass wir einen 2-dimensionalen Vektorraum betrachten. Später werden wir Systeme betrachten, die überabzählbar unendlich viele Zustände zulassen. Die dem entsprechenden komplexen Vektorräume sind in der Mathematik als Hilbert-Räume bekannt. Im Folgenden genügt es jedoch, sich endlich dimensionale Vektorräume vorzustellen.

Ein physikalischer Zustand in der Quantenmechanik wird durch einen komplexen Zustandsvektor repräsentiert, der nach Dirac als Ket-Vektor bezeichnet wird: $|\alpha\rangle$.

Ein Postulat^{*} der Quantenmechanik ist es, dass dieser Ket die vollständige Information über den physikalischen Zustand des Systems enthält. Der Vektorraum ist komplex und linear, d.h. ein Zustand $|\gamma\rangle$ mit

$$|\gamma\rangle = c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle \quad (1.6)$$

* Die Postulate bzw. Axiome der Quantenmechanik werden später nochmals zusammengefasst.

ist ebenfalls ein Ket im Vektorraum, wenn $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ Ket Zustände sind. c_1 und c_2 können hierbei beliebige komplexe Zahlen sein, $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$. Kets und komplexe Zahlen kommutieren selbstverständlich,

$c_1 |\alpha\rangle \equiv |\alpha\rangle c_1$. Wenn $c_1 = 0$, dann heißt $c_1 |\alpha\rangle$: Nullket.

Das genannte physikalische Postulat besagt weiter, dass $|\alpha\rangle$ und $c|\alpha\rangle$ mit $c \in \mathbb{C}$ den gleichen physikalischen Zustand beschreiben, d.h. lediglich die "Richtungen" im Vektorraum sind physikalisch bedeutsam (in der Mathematik spricht man von Strahlen im Hilbert-Raum). Die genauen Werte der Koeffizienten in (1.3 - 1.5) waren daher nicht bedeutsam.

Eine Observable, bzw. eine Messapparatur für eine Observable, wird in der Quantenmechanik repräsentiert durch einen linearen Operator im Vektorraum.

Allgemein ist eine lineare Operator A eine lineare Abbildung des Vektorraumes in sich selbst, d.h.

$$A(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1 A|\alpha\rangle + c_2 A|\beta\rangle \quad (1.7)$$

ist wieder ein Ket im Vektorraum. In endlich dimensionalen Systemen kann man A im Wesentlichen durch eine Matrix darstellen (z.B. eine komplexe 2×2 Matrix im SG-Experiment).

Im Allgemeinen ist $A|\alpha\rangle \neq c|\alpha\rangle$. Für jedoch den Fall, dass ein Ket durch A auf seinen eigenen Strahl abgebildet wird, spricht man von

Eigenkets von A ,

$$|a'\rangle, |a''\rangle, |a'''\rangle, \dots$$

mit

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle, \quad A|a''\rangle = a''|a''\rangle, \dots \quad (1.8)$$

wobei a', a'', a''', \dots Eigenwerte von A sind,

d.h. Zahlen $a', a'', \dots \in \mathbb{C}$ oder $a', a'', \dots \in \mathbb{R}$, die in unserer Notation auch die Eigenkets $|a'\rangle, |a''\rangle, \dots$ nummerieren.

Entspricht ein physikalischer Zustand einem Eigenket, so sprechen wir auch von einem Eigenzustand.

Die SG-Apparatur z.B. in z-Ausrichtung entspricht einem Operator S_z dessen Eigenzustände $|S_z; \pm\rangle$ durch gegeben sind,

$$S_z |S_z; \pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |S_z; \pm\rangle. \quad (1.9)$$

(Bezeichnen wir $|S_z; +\rangle$ als $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $|S_z; -\rangle$ als $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, dann ist

$$S_z \hat{=} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1.2.2 Der Raum der Bra-Vektoren und innere Produkte

Der Raum der Bra-Vektoren ist ein zum Ket-Vektorraum dualer Raum, der die Ket-Vektoren linear und stetig auf komplexe Zahlen abbildet. Wir bezeichnen die Bras mit $\langle \alpha |$ und schreiben die genannte lineare Abbildung als $\langle \alpha | : |\beta\rangle \xrightarrow{\langle \alpha |} \mathbb{C}$,

$$\langle \alpha | \beta \rangle \in \mathbb{C} \quad (1.10)$$

Nach dem Satz von Riesz entspricht jedem $\langle \alpha |$ ein ^{Bra} $|\alpha\rangle$ ein

Ket-Vektor $|\alpha\rangle$ in eindeutiger Weise.

Wir postulieren zwei fundamentale Eigenschaften für dieses innere Produkt zwischen Bras und Kets:

$$(1) \quad \langle \alpha | \beta \rangle = \overline{\langle \beta | \alpha \rangle} \quad (1.11)$$

$$(2) \quad \langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$$

wobei der Überstrich komplexe Konjugation bedeutet.

Aus (1) folgt sofort das $\langle \alpha | \alpha \rangle \equiv \overline{\langle \alpha | \alpha \rangle}$ reell ist, weswegen (2) erst Sinn macht. Die Gleichheit in (2) soll nur für einen Nullket gelten.

Im übrigen ist (2) wesentlich für die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantenmechanik. Verstehen wir das innere Produkt als Skalarprodukt, so bedeutet (2), dass die zugehörige Metrik positiv definit ist.

Mit diesen Postulaten können wir die Norm eines Kets definieren:

$$\|\alpha\| := \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle} \quad (1.12)$$

Falls $\|\alpha\| = 0$, ist $|\alpha\rangle$ ein Nullket.

Falls $\|\alpha\| \neq 0$ können wir einen normierten Vektor definieren

$$|\tilde{\alpha}\rangle := \frac{1}{\|\alpha\|} |\alpha\rangle, \quad \text{so dass} \quad (1.13)$$

$$\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle = 1.$$

Zwei Vektoren $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ sind orthogonal, falls

$$\langle \alpha | \beta \rangle = 0 \quad (1.14)$$

Im SG-Experiment sind $|S_{zi}+\rangle$ und $|S_{zi}-\rangle$ orthogonal,

$$\langle S_{zi}- | S_{zi}+\rangle = 0. \quad (1.15)$$

Physikalisch kommt hier zum Ausdruck, dass ein Atomstrahl mit $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ Ausrichtung nach einer weiteren SGz-Apparatur keine $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ Atome enthält. Mit (1.4) lässt sich nachprüfen, dass $|S_{xi}+\rangle$ und $|S_{xi}-\rangle$ ebenfalls orthogonal sind,

$$\begin{aligned} \langle S_{xi}- | S_{xi}+\rangle &= \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_{zi}+ | + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_{zi}- | \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |S_{zi}+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{zi}-\rangle \right) \\ &= -\frac{1}{2} \langle S_{zi}+ | S_{zi}+\rangle + \frac{1}{2} \langle S_{zi}- | S_{zi}-\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle S_{x_i} - |S_{x_i} \rangle = 0, \quad (1.16)$$

falls $|S_{z_i} \pm \rangle$ und $|S_{z_i} - \rangle$ gleich normiert sind. In der Regel normiert man $|S_{z_i} \pm \rangle$ auf 1, $\langle S_{z_i} \pm | S_{z_i} \pm \rangle = 1$. Mit der Wahl der Koeffizienten in (1.4) sind $|S_{x_i} \pm \rangle$ ebenfalls normiert (wie sich leicht nachprüfen lässt): $\langle S_{x_i} \pm | S_{x_i} \pm \rangle = 1$.

Das gleiche lässt sich für $|S_{y_i} \pm \rangle$ definiert in (1.5) verifizieren, wobei wegen Postulat (1.11), (1) zu beachten ist, dass z.B.

$$|S_{y_i} + \rangle \stackrel{(1.5)}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z_i} + \rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |S_{z_i} - \rangle$$

$$\Rightarrow \langle S_{y_i} + | = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_{z_i} + | - \frac{i}{\sqrt{2}} \langle S_{z_i} - | \quad (1.17)$$

!!

allgemeines:

$$\text{Wenn } |\gamma\rangle = c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle, \text{ dann } \langle \gamma | = \bar{c}_1 \langle \alpha | + \bar{c}_2 \langle \beta |, \quad (1.18)$$

1.2.3 Operatoren

Wir fahren fort mit einigen wichtigen Definitionen für Operatoren.

Zwei Operatoren X und Y sind gleich, wenn für jeden beliebigen Zustand $|\alpha\rangle$ gilt

$$X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle, \quad |\alpha\rangle \text{ bel.} \quad (1.19)$$

Ein Operator heißt Nulloperator, falls

$$X|\alpha\rangle = 0 \quad \text{für } |\alpha\rangle \text{ bel.} \quad (1.20)$$

Die linearen Eigenschaften des Vet-Raumes übertragen sich auf die Operatoren,

$$\begin{aligned} X+Y &= Y+X && \text{(kommutativ bezügl. Addition)} \\ X+(Y+Z) &= (X+Y)+Z && \text{(assoziativ " Addition)} \end{aligned} \quad (1.21)$$

Betrachten wir einen Operator im Vet-Raum,

$$|\gamma\rangle = X|\alpha\rangle. \quad (1.22)$$

Der zu $|\gamma\rangle$ duale Bra ist nun im Allgemeinen nicht gleich $\langle\alpha|X$. Sondern wir erhalten den zu X adjungierten Operator X^\dagger ,

$$\langle \gamma | = \langle \alpha | X^\dagger. \quad (1.23)$$

In der Vorlesung nennen wir einen Operator hermitesch oder selbstadjungiert*, wenn

$$X = X^\dagger. \quad (1.24)$$

Produkte von Operatoren sind assoziativ,

$$X(YZ) = (XY)Z = XYZ \quad (1.25)$$

aber in der Regel nicht kommutativ

$$XY \stackrel{i.R.}{\neq} YX \quad (1.26)$$

(wie man sich leicht am Beispiel von Matrixmultiplikationen verdeutlichen kann)

Betrachten wir

$$| \gamma \rangle = X | \beta \rangle, \quad | \beta \rangle = Y | \alpha \rangle \\ \Rightarrow | \gamma \rangle = XY | \alpha \rangle,$$

* eine Unterscheidung zwischen hermitesch und selbstadjungiert ist nicht notwendig, wenn X beschränkt ist, d.h. $\langle \alpha | X | \alpha \rangle \leq \text{const.} \langle \alpha | \alpha \rangle$ für $|\alpha\rangle$ bel. Für unbeschränkte Operatoren ist in der Regel die Angabe seines Definitionsbereiches notwendig, so dass auch zwischen hermitesch und selbstadjungiert unterschieden werden muss. In dieser Vorlesung werden dies funktionalanalytischen Details ignoriert.

so gilt für die adjungierten Relationen:

$$\langle \beta | \stackrel{(1.23)}{=} \langle \alpha | Y^\dagger \quad , \quad \langle \gamma | = \langle \beta | X^\dagger = \langle \alpha | Y^\dagger X^\dagger$$

$$\stackrel{(1.23)}{\Rightarrow} \quad \underline{\underline{(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger}} \quad (1.27)$$

Ebenso folgt aus (1.11), (1),

$$\text{Wenn } X = c_1 Y + c_2 Z \Rightarrow X^\dagger = \bar{c}_1 Y^\dagger + \bar{c}_2 Z^\dagger \quad (1.28)$$

(Antilinearität der \dagger -Operation)

1.2.4 Äußeres Produkt

Als äußeres Produkt aus einem Ket-Vektor $|\beta\rangle$ und einem Bra-Vektor $\langle \alpha |$ bezeichnet man die sukzessive Anwendung von $\langle \alpha |$ auf einen weiteren bel. Ket-Vektor $| \gamma \rangle$

$$\langle \alpha | : | \gamma \rangle \rightarrow c = \langle \alpha | \gamma \rangle \quad , \quad | \gamma \rangle \text{ bel.}$$

mit anschließender Multiplikation von $|\beta\rangle$ mit c . (1.29)

Wir schreiben für das äußere Produkt

$$|\beta\rangle \langle \alpha | \quad (1.30)$$

Da es bel. Vets wieder auf Vets abbildet,

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|)|\gamma\rangle = |\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle \equiv (\langle\alpha|\gamma\rangle)|\beta\rangle, \quad (1.31)$$

ist das äußere Produkt ein Operator. Dieser Operator projiziert beliebige Vets in "Richtung" $|\beta\rangle$.

Beispiel: Der Operator

$$|S_{z_i+}\rangle\langle S_{z_i+}| \quad (1.32)$$

dreht bzw. projiziert einen bel. Spinzustand in $|S_{z_i+}\rangle$ -Richtung. Er entspricht also einem SG_z -Apparat, bei dem die $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ -Komponente ausgeblendet wird

$$|S_{z_i+}\rangle\langle S_{z_i+}| \stackrel{!}{=} \begin{array}{c} \boxed{SG_z} \\ \begin{array}{l} \nearrow + \\ \searrow - \end{array} \\ \text{---} \end{array},$$

z.B.

$$(|S_{z_i+}\rangle\langle S_{z_i+}|)|S_{x_i+}\rangle$$

$$= |S_{z_i+}\rangle \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\langle S_{z_i+}|S_{z_i+}\rangle}_{=1} + \frac{1}{2} \underbrace{\langle S_{z_i+}|S_{z_i-}\rangle}_{=0} \right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z_i+}\rangle \quad (1.33)$$

1.3 Basis - Vekt

In der Quantenmechanik sind hermitesche Operatoren von besonderem Interesse.

Betrachten wir einen hermiteschen Operator A . Seien $|a'\rangle$ und $|a''\rangle$ Eigenvektoren mit Eigenwerten a' und a'' ,

$$A |a'\rangle = a' |a'\rangle, \quad A |a''\rangle = a'' |a''\rangle. \quad (1.34)$$

Konjugieren wir die zweite Gleichung:

$$a''^* \langle a''| \stackrel{(1.34)}{=} \langle a''| A^\dagger = \langle a''| A \quad (1.35)$$

herm.

und multiplizieren mit $|a'\rangle$, so folgt

$$a''^* \langle a''|a'\rangle = \langle a''|A|a'\rangle \stackrel{(1.34)}{=} a' \langle a''|a'\rangle$$

$$\text{bzw.} \quad (a''^* - a') \langle a''|a'\rangle = 0 \quad (1.36)$$

Falls $|a'\rangle = |a''\rangle \neq \text{Null}$ gewählt wird, folgt

$$a' = a'^* \quad (1.37)$$

d.h. die Eigenwerte von hermiteschen Operatoren sind reell!

Falls wir $|a'\rangle \neq |a''\rangle$ mit $a' \neq a''$ wählen,
folgt

$$\langle a'' | a' \rangle = 0 \quad (a' \neq a''), \quad (1.38)$$

d.h. die Eigenvektoren eines hermiteschen Operators
sind orthogonal!

Da das Ergebnis einer physikalischen Messung reell ist, sind hermitesche Operatoren gute Kandidaten um physikalische Messapparaturen und Observablen zu symbolisieren.

In der Regel wählt man eine Konvention, in der die Eigenvektoren auch normiert sind, so daß alle $|a'\rangle$ eine orthonormierte Basis bilden

$$\langle a'' | a' \rangle = \delta_{a'' a'} \quad (1.39)$$

Falls A auf den Raum aller Zustände eines Systems wirkt, ist diese Basis der Eigenkets auch (per constructionem) vollständig.

Da die Eigenkets $|a'\rangle$ eine vollständige orthonormierte Basis bilden, kann ein beliebiges ket $|y\rangle$ in dieser Basis aufgespannt werden,

$$|y\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (1.40)$$

Multiplikation mit $\langle a''|$ liefert

$$\underline{\underline{\langle a''|y\rangle}} = \sum_{a'} c_{a'} \underbrace{\langle a''|a'\rangle}_{=\delta_{a''a'}} = \underline{\underline{c_{a''}}} \quad (1.41)$$

womit die Koeffizienten $c_{a'}$ bestimmt sind:

$$|y\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|y\rangle \quad (1.42)$$

D.h. die Summe über alle äußeren Produkte der Eigenvektoren erfüllt:

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = \mathbb{1} \quad (1.43)$$

wobei $\mathbb{1}$ der Identitätsoperator ist, der

$$\mathbb{1}|y\rangle = |y\rangle \quad \text{für } |y\rangle \text{ bel. erfüllt.}$$

(1.43) wird auch als Vollständigkeitsrelation bezeichnet.

Beispiel: Im SG-Experiment gibt es zwei Basis-Zustände, z.B. $|S_{zi}; \pm\rangle$. Im dem zugehörigen 2-dim. Vektorraum ist daher

$$|S_{zi}; +\rangle\langle S_{zi}; +| + |S_{zi}; -\rangle\langle S_{zi}; -| = \mathbb{1} \quad (1.44)$$

In der Tat lässt sich direkt mit (1.4) nachrechnen,

$$\text{dass } \left(|S_{zi}; +\rangle\langle S_{zi}; +| + |S_{zi}; -\rangle\langle S_{zi}; -| \right) |S_{xi}; \pm\rangle = |S_{xi}; \pm\rangle.$$

Für jeden einzelnen Term der Summe (1.43) gilt

$$(|a'\rangle\langle a'|) |y\rangle = |a'\rangle\langle a'|y\rangle = c_{a'} |a'\rangle, \quad (1.45)$$

d.h. $|a'\rangle\langle a'|$ projiziert $|y\rangle$ auf die $|a'\rangle$ -Richtung. Der Operator

$$P_{a'} = |a'\rangle\langle a'| \quad (1.46)$$

wird daher als Projektionsoperator bezeichnet.

Er erfüllt die Gleichungen

$$P_{a'}^2 = P_{a'}, \quad P_{a'} P_{a''} = 0 \text{ für } a' \neq a'', \quad \sum_{a'} P_{a'} = \mathbb{1}. \quad (1.47)$$

Mit Hilfe der Projektionsoperatoren folgt, dass sich der zugehörige Operator A schreiben lässt als

$$\begin{aligned}
 A &= A \cdot \mathbb{1} = A \sum_{a'} P_{a'} \\
 &= \sum_{a'} A |a'\rangle \langle a'| \\
 &= \sum_{a'} a' |a'\rangle \langle a'| \\
 &= \sum_{a'} a' P_{a'} \quad (1.48)
 \end{aligned}$$

Nummern wir die Eigenwerte $a', a'', \dots \hat{=} a^{(1)}, a^{(2)}, a^{(3)}, \dots$, dann können wir in Matrixdarstellung die Basisvektoren repräsentieren als

$$|a^{(1)}\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, |a^{(2)}\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, |a^{(3)}\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \dots \quad (1.49)$$

Der Operator A hat dann Diagonalgestalt,

$$A \hat{=} \begin{pmatrix} a^{(1)} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a^{(2)} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & a^{(3)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.50)$$

und die Projektoren lauten

$$P_{a^{(1)}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, P_{a^{(2)}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, P_{a^{(3)}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.51)$$