

# Mathematisches Grundtheorem der Quantenmechanik (QM)

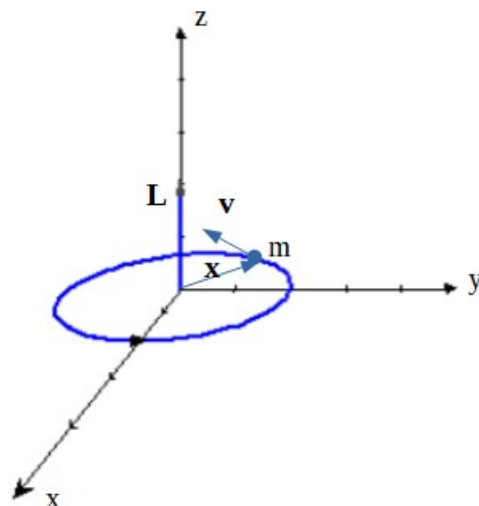
Manfred Hörz

Die Idee von Heisenberg war nach absurden<sup>1</sup> Theorien der Quantentheorie wie dem Rutherford'schen oder auch Bohrschen Atommodell, das Elektronen vorsah, die auf gewissen Bahnen um den Atomkern kreisen sollten, nur messbare Größen zuzulassen. Auf diese Weise entstand mit seiner Matrizenmechanik oder der Operatorentheorie die erste konsistente Quantentheorie.

Die messbaren Größen (Observablen) wurden über gewisse Matrizen (quadratische Formen) bzw. genauer über hermitesche Operatoren mathematisch dargestellt. Diese Operatoren sind lineare Abbildungen eines komplexen Vektorraumes (mit Skalarprodukt) in den selben Vektorraum (Hilbertraum) mit der zusätzlichen Eigenschaft der Hermitizität (siehe unten). Die Vektoren selbst stellen quantenmechanische Zustände dar.

Um das etwas konkreter zu sehen, soll das einfache Beispiel eines Photons oder Elektrons genommen werden. Ein Elektron hat einen Spin, der so etwas ähnliches ist wie ein Eigendrehimpuls, aber eben nur ähnlich. Der Spin ist eine Eigenschaft, die in der klassischen Physik nicht vorkommt und typisch für die QM ist. Dieser Spin kann gemessen werden.

Die Messung ist in der QM (und auch in der klassischen Physik) eine Wechselwirkung zwischen einem Messgerät und dem System (hier dem Spin des Elektrons). Der Drehimpuls  $L$  eines Massenpunktes in der klassischen Physik wird durch einen dreidimensionalen Vektor dargestellt.



---

1 Die Absurdität bestand in Folgendem: das Gesetz der elektromagnetischen Theorie behauptete, dass elektrisch geladene Teilchen (wie das Elektron), die eine Beschleunigung erfahren (hier die Richtungsänderung auf den Kreisbahnen der Elektronen um den Kern), Energie abstrahlen müssen. Das stand im Widerspruch zu der empirisch bekannten Stabilität der Materie. Denn das Elektron müsste sonst sehr schnell mit dem Atomkern kollidieren. Bohr forderte daher, dass nur gewisse Bahnen erlaubt seien, auf denen keine Energie verloren werde. Nur beim Wechsel auf eine andere der erlaubten Bahnen würde entweder Energie (Photonen) abgestrahlt bzw. absorbiert. Diese Adhoc-Theorie war zwar erfolgreich, aber unplausibel. Denn die Behauptung, dass ein Elektron auf einer erlaubten Bahn keine Energie abstrahle, war dogmatisch und in Widerspruch zur elektromagnetischen Theorie. Das Problem war die Bahntheorie überhaupt.

$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times (\mathbf{m}\mathbf{v}) = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ . Dreht sich der Massenpunkt in die andere Richtung (im Uhrzeigersinn), also mit  $-\mathbf{v}$  so hat  $\mathbf{L}$  die entgegengesetzte Orientierung. Er hat also bei festem Betrag der Geschwindigkeit und festem Betrag des Radiusvektors (und fester Masse) genau zwei Werte.

Als Vektor hat er drei Komponenten  $\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix}$ , wobei etwa für die z-Komponente gilt:

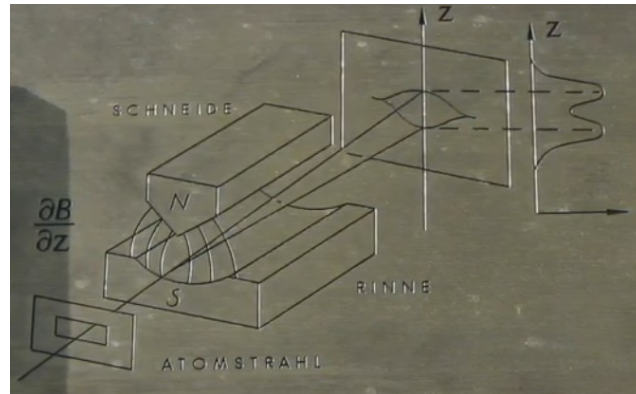
$$L_z = p_x y - p_y x \quad \text{mit} \quad \mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad \text{Im obigen Schaubild ist nur die z-Komponente } L_z$$

vorhanden. Wird sie normiert, so hat  $L_z$  nur die Werte 1 (zeigt nach oben) oder -1 (zeigt nach unten). Bleibt die Drehung in der gleichen Drehebene und auf der gleichen Kreisbahn um den Ursprung mit gleicher Winkelgeschwindigkeit, so bleibt der Drehimpuls erhalten.

Ist die Drehebene nicht die x,y-Ebene, sondern die y,z-Ebene, so zeigt der Drehimpulsvektor in Richtung positiver x-Achse (bei sonst gleichbleibenden Größen). Analog wäre dann  $L_x = 1$  und bei entgegengesetzter Drehrichtung -1. Bei beliebiger Drehebene setzt sich der Drehimpulsvektor (wie immer) aus den drei Komponenten zusammen:  $\mathbf{L} = L_x \mathbf{e}_1 + L_y \mathbf{e}_2 + L_z \mathbf{e}_3$ .

Der Eigendrehimpuls sozusagen (genauer der Spin  $\sigma$ ) des Elektrons lässt sich auch aus den drei Komponenten  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  zusammensetzen<sup>2</sup>. Doch dazu später.

Wie misst man eine solche Spinkomponente? Das Stern-Gerlach-Apparat ist dafür geeignet.



Er besteht aus einem Strahl von Silberatomen (im Vakuum um Störungen durch Kollisionen zu vermeiden), die entlang eines inhomogenen Magnetfeldes laufen und auf einen Schirm auftreffen. Die neutralen Silberatome besitzen durch das äußerste 5s-Elektron ein magnetisches (Dipol-) Moment  $\mu$ , das mit dem Magnetfeld interagiert und in der Regel werden die Silberatome dadurch abgelenkt.

Da das genannte Elektron keinen Bahndrehimpuls  $L$  hat, müsste es sein (klassisch gedachter) Eigendrehimpuls  $s$  sein. Stellt man sich vor, dass das Elektron kein Punktteilchen ist<sup>3</sup>, so würde die Ladungsverteilung des Elektrons<sup>4</sup> mit der Ladung  $e$  für das magnetische Moment verantwortlich

<sup>2</sup> Hier fehlt genau genommen noch die Identität (siehe später)

<sup>3</sup> So wie man es heute sieht im Gegensatz zu früher

<sup>4</sup> Das Elektron ist von einer Wolke virtueller geladener Teilchen-Antiteilchen-Paare umgeben, die sein Eigendrehimpuls anschaulich machen könnten und die seine Ladung definieren.

sein analog zu einer Ladung, die auf einer Kreisbahn, deren Kreisfläche A ist, das Moment

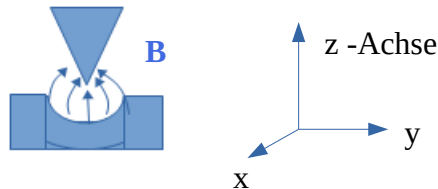
$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2m_e} \mathbf{L}$$

besitzt, wobei  $m_e$  die Masse des Elektrons wäre und  $\mathbf{L}$  der Drehimpuls.

Das Magnetfeld, das davon erzeugt wird, ist einem Stabmagneten S sehr ähnlich.



Wäre das externe Magnetfeld  $\mathbf{B} = B_z$



nicht inhomogen, also homogen  $\frac{\partial B_z}{\partial z} = 0$ , würde sich der „Stabmagnet“  $\mathbf{S}$  nur längs des Feldes  $\mathbf{B}$

ausrichten, so aber erfährt er noch eine Kraft  $F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$  nach oben bzw. nach unten, je nach der Orientierung von  $\mu_z$ .

Ist  $\mathbf{S}$  parallel zu  $\mathbf{B}$ ,

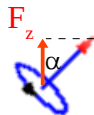


so wird er oben o auf dem Schirm landen.

Ist  $\mathbf{S}$  antiparallel, so landet er unten u:

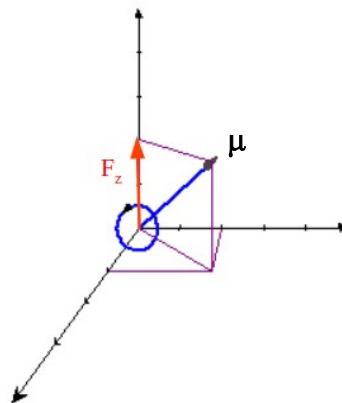


Liegt er schräg in der y,z-Ebene, so ist die Kraft nur noch das  $\cos \alpha$ -fache .

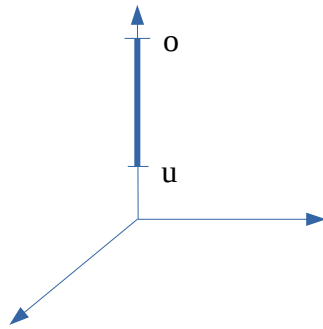


In diesem Fall sollte das Silberatom unterhalb von o, aber oberhalb der Mitte von o und u zu liegen kommen.

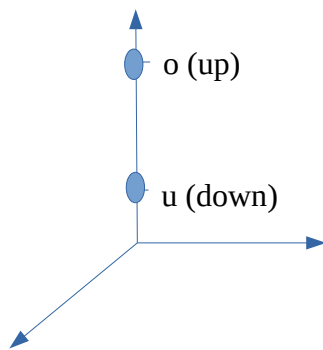
Liegt  $\boldsymbol{\mu}$  beliebig im Raum, so ergibt die Projektion auf die z-Achse die Kraft  $F_z$ .



Da das magnetische Moment  $\mu$  der Silberatome zufällig verteilt ist, so wäre zu erwarten, dass die Silberatome auf dem Schirm zwischen o und u jeden Punkt einnehmen:



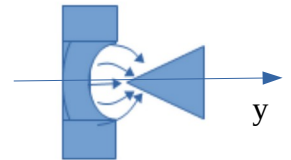
Dem war aber nicht so. Sondern es gab nur Punkte rund um o und um u.



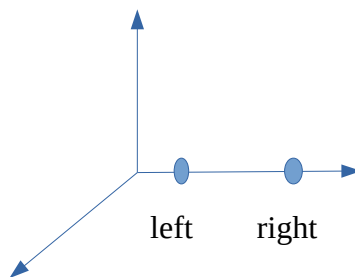
Dreht man die Apparatur,



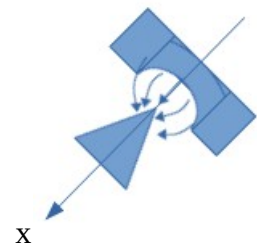
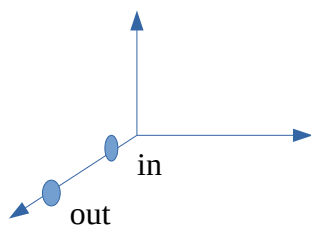
so dass sie längs der y-Achse liegt

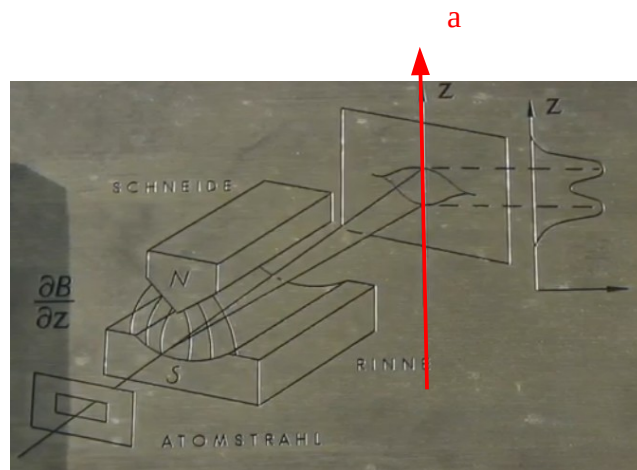


so findet man die Spuren der Atome rechts oder links

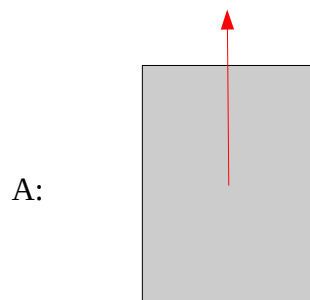


Entsprechendes gilt bei Orientierung des Messapparates längs der x-Achse:

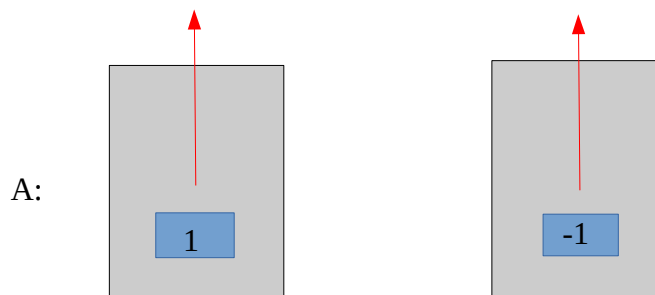




Zur Vereinfachung soll nun der betrachtete Messapparat schematisch dargestellt werden:



Wird ein einzelnes Atom betrachtet, so gibt der Apparat A (auch Analysator) je nach Ausrichtung des magnetischen Moments des Atoms *einen von zwei* Zuständen an, deren Projektion auf die Ausrichtung von A entweder parallel oder antiparallel ist. Man beachte jetzt aber, dass die Projektion nur angibt, ob sie parallel oder antiparallel ist; sie hat keine variable Länge wie die Projektion eines Vektors je nach Winkel  $\alpha$ . Es ist sinnvoll, jedem Zustand (dem „Spin“  $\sigma$ ) daher eine Zahl 1 oder -1 zuzuordnen, 1 für parallel und -1 für antiparallel. Man kann dann das Messergebnis auf dem Apparat notieren:



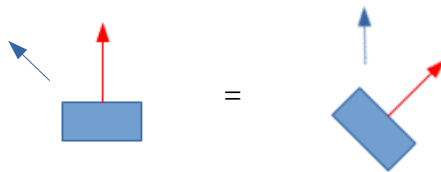
Das gilt für jede Orientierung des Apparats. Die Werte werden nur 1 bzw. -1 sein.

Man könnte es sich noch einfacher machen: der rote Pfeil für den Apparat mit dem Messergebnis würde reichen:

oder bspw.



Anstatt des Apparates könnte man auch das Teilchen (Atom) in entgegengesetzte Richtung drehen. Es kommt ja nur auf den Winkel zwischen der Achse **a** und dem magnetischen Moment  $\mu$  an:



Was würde dieses Ergebnis der Aufspaltung in zwei Strahlen (oben und unten), also mit Apparat A in z-Richtung orientiert, klassisch interpretiert bedeuten? Der für die Aufspaltung verantwortliche Term  $\mu$  bzw.  $\mu_z$  hatte nicht beliebige Richtungen, sondern nur **eine** Projektion  $\mu_z$  in Richtung der positiven z-Achse und **eine** Projektion in Richtung der negativen z-Achse. Der z-Spin ist also gequantelt in seiner Richtung. Diese Quantelung zu nur einer z-Richtung (bspw. up) muss aber Ergebnis einer Interaktion gewesen sein, der Interaktion der zu **B** parallelen  $\mu_z$  mit dem Apparat A. Diese Interaktion hat offensichtlich den z-Spin unifiziert. Ein zweiter Apparat, der hinter den oberen Teilchenstrahl mit  $\sigma_z=1$  nochmal misst, ohne sonst etwas zu verändern, wird den oberen Strahl nicht mehr aufspalten, sondern nur noch etwas weiter nach oben durch das zweite identische Magnetfeld ablenken und zwar wieder zu **einem** Punkt, d.h wieder  $\sigma_z=1$  ergeben. Die zweite Messung bestätigt also die erste.

Dreht man nun den Apparat um  $90^\circ$  in Richtung der positiven y-Achse und misst wieder (ohne sonst etwas verändert zu haben), so misst man den Spin  $\sigma_y$  in y-Richtung und bekommt entweder den Wert 1 oder -1. Das ist aber sehr seltsam. Denn man würde bei obiger Interpretation doch erwarten, dass der gedrehte Apparat den Teilchenstrahl mit ausschließlichem Spin  $\sigma_z=1$  verschlucken würde. Denn es gilt doch offensichtlich, dass  $\mu_y=0$  ist. Das kann aber doch nicht der Fall sein, wie sollte sonst  $\sigma_y=1$  bzw.  $\sigma_y=-1$  sein können, dazu muss doch eine  $\mu_y$  - Komponente ungleich Null noch existieren.

Möglich wäre, dass nicht die verschiedenen  $\mu_z$ , sondern die Kraft  $F_z = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$  gequantelt wurde zu einer eindeutigen konstanten Kraft, durch den Wechselwirkungsprozess, die z-Komponenten der magnetischen Momente aber gleich blieben. Das würde bedeuten, dass es bis auf den Fall, dass

$\mu$  exakt parallel zu  $\mathbf{B}$  ist, das Moment eine nicht verschwindende y-Komponente hätte, so dass die Kraft  $F_y = \mu_y \frac{\partial B}{\partial y}$  wieder unifiziert wird durch die Wechselwirkung mit dem gedrehten Apparat und das Ergebnis  $\sigma_y = 1$  bzw.  $\sigma_y = -1$  zeitigte.

Das heißt, dass der obere Strahl nach der ersten Messung unverändert blieb und in der dritten Messung eben die y-Komponenten der magnetischen Momente maß auch hier ohne Veränderung der magnetischen Momente links und rechts plausibel.

Positioniert man nun zwei weitere Apparate identisch mit dem ersten in z-Richtung, sodass jeder Apparat den jeweiligen Teilstrahl rechts und links misst, so sollte jeder der beiden Apparate nur  $\sigma_z = 1$  ausgeben, da der eine nur die rechten oberen Momente und der andere die linken oberen Momente misst. Das Ergebnis ist aber wieder jeweils  $\sigma_z = 1$  bzw.  $\sigma_z = -1$ . Und das bedeutet, die obige Interpretation funktioniert nicht. Der Spin ist eben kein Eigendrehimpuls im klassischen Sinn.

Im übrigen ist aber  $L=0$  für das äusserste Elektron<sup>5</sup>, sodass auch das magnetische Moment hätte Null sein müssen, und zu erwarten wäre dann ein einziger Fleck in der Mitte.

Das magnetische Moment konnte also nicht vom Drehimpuls, weder vom Bahndrehimpuls noch vom Eigendrehimpuls herrühren.

Erst Pauli<sup>6</sup> vermutete, dass das Elektron noch eine weitere Quantenzahl besitzen müsste, neben den drei der Energie E des im Atom gebundenen Elektrons,  $L$  und  $L_z$ : der Spin, der nur zwei Werte zuließ. Goudsmit und Uhlenberg (Leyden), die diesen vierten Freiheitsgrad (vielleicht unglücklich) als „Eigenrotation“ ansahen, als Spin S, mit den Eigenwerten  $S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$ , ordneten

dem das magnetische „Spinmoment“  $\mu_s$  mit  $\mu_s = \frac{e}{2m_e} S \cdot g$  und g, dem berühmten Landé-

Faktor (auch gyromagnetischer Faktor), der ungefähr den Wert 2 hatte<sup>7</sup>, zu. Vergleicht man das mit

der obigen Formel  $\mu = \frac{e}{2m_e} L$ , so fällt auf, dass L durch den Spin S ersetzt wurde mit dem

zusätzlichen g-Faktor. Da dann mit  $S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$  nur zwei Werte in Frage kommen, gilt das auch für

die das magnetische Spinmoment  $\mu_s = \pm \hbar \frac{e}{4m_e} \cdot g$  und also auch für die wirkende Kraft

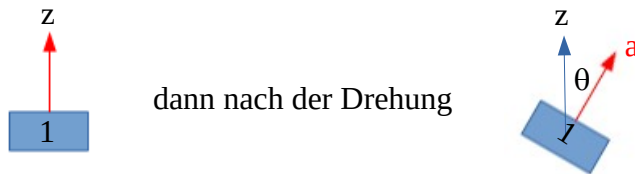
$$F_z = \pm \hbar \frac{e}{4m_e} g \frac{\partial B}{\partial z} .$$

Was passiert, wenn nach der ersten Messung, sagen wird in positiver z-Richtung, der Spin zu 1 (gemessen in der Einheit  $\frac{1}{2} \hbar$ ) festgestellt wurde, und nun der Apparat in der y,z-Ebene, also um die x-Achse als Rotationsachse um  $\theta$  gedreht wird und nun längs der Achse a liegt, und

5 Stern und Gerlach hatten  $L=1$  angenommen und hatten für den diskreten Fall  $n=2L+1$ , also  $n=3$  Flecken vermutet. Bei richtiger Annahme  $L=0$  hätte sich nur ein Fleck zeigen dürfen. Es waren aber zwei!

6 Zusätzlich kam noch das Pauli-Prinzip, das Ausschließungsprinzip für Fermionen hinzu: Fermionen (Elektronen sind auch Fermionen) können nicht in allen Quantenzahlen identisch sein. Sind alle drei Quantenzahlen identisch, so müssen sich zwei Elektronen dadurch unterscheiden, dass ihr Spin verschieden ist.

7 Der g-Faktor ist für das Elektron mit dem Wert 2,0023193048 theoretisch gemäß der QED abgeleitet und experimentell mit 2,00231930436256 gemessen worden.



wieder 1 zeigt? Ist  $\theta=30^\circ$ , so wird dieses Ergebnis empirisch in ungefähr 93% aller Fälle angezeigt und in den übrigen 7% der Fälle als -1. Ist  $\theta=90^\circ$ , so ist die relative Häufigkeit für 1:  $h(1)=0,5$

Allgemein ist bei einem beliebigen Winkel die relative Häufigkeit für 1  $\cos^2 \frac{\theta}{2}$  und für -1

$\sin^2 \frac{\theta}{2}$ . Ist der Winkel  $0^\circ$ , bleibt also das Messgerät unverändert, so zeigt er mit Sicherheit die 1, da  $\cos 0^\circ = 1$ , wie oben behauptet.

Was läuft da ab, wenn sich der Spin (er soll jetzt  $\sigma$  genannt werden) so seltsam verhält? Da der Strahl vor der Messung nicht wissen kann, wie das Gerät orientiert ist und das Messgerät nach der Wechselwirkung mit den Teilchen des Strahls nur 1 bzw. -1 anzeigt, mit den gerade angegebenen Wahrscheinlichkeiten, so kann die Eigenschaft Spin vor der Messung noch nicht festgelegt gewesen sein. War der Spin also da noch virtuell? Die Messung hätte ihn dann einen der beiden Werte real zugewiesen, so dass er beispielsweise 1 war. Dass er jetzt real ist, zeigt eine zweite Messung mit identischer Orientierung des Messgeräts. Wenn das Gerät jetzt gedreht wird, dann hat der Spin noch den Wert 1, also hier „spin up“ ( $\sigma_z=1$ ), aber eine erneute Messung mit dem gedrehten Gerät verändert jetzt den Spin zu  $\sigma_a=1$  oder  $\sigma_a=-1$ . Dreht man das Gerät wieder zurück in die erste Position, so zeigt es nicht unbedingt wieder  $\sigma_z=1$  an, wie wir oben gesehen haben, sondern kann auch  $\sigma_z=-1$  anzeigen. Die Wahrscheinlichkeit für  $\sigma_z=1$  ist wieder  $\cos^2 \frac{\theta}{2}$ . Das

Teilchen muss also eine Art Gedächtnis haben für seinen letzten Zustand, aber nicht für seinen vorletzten (ersten). Der ist durch die zweite Messung (also des rotierten Geräts mit der Achse a) ausgelöscht worden. Er hat genau genommen ein Kurzzeitgedächtnis für zwei Ereignisse: 1. sein voriges Ergebnis und 2. die letzte Position des Geräts. Beide Informationen müssen dem Strahl nach

der Messung inhärent sein:  $P_{\sigma_z=1}(\sigma_a=1)=\cos^2\left(\frac{1}{2}\angle(z,a)\right)$   $P_{\sigma_z=1}(\sigma_a=-1)=\sin^2\left(\frac{1}{2}\angle(z,a)\right)$

$$P_{\sigma_z=-1}(\sigma_a=1)=\sin^2\left(\frac{1}{2}\angle(z,a)\right) \quad P_{\sigma_z=-1}(\sigma_a=-1)=\cos^2\left(\frac{1}{2}\angle(z,a)\right) .$$

Bei der Photonpolarisation ist das Resultat ganz ähnlich, nur geht da nicht  $\frac{\theta}{2}$  ein, sondern  $\theta$ .

Ich vermute, dass der Spin der Teilchen wesentlich aus dem Spin der vielen virtuellen Photonen<sup>8</sup> sich aufbaut und zwar der Photonen, die das Teilchen konstituieren. Ich hatte die These vertreten, dass das Elektron ein Raum-Enklave aus gleichspinigen Photonen sind, woraus sich nicht nur die Ladung, sondern auch die Masse des Elektrons relativistisch ergäben würden<sup>9</sup>.

Eine Analogie möchte ich hier auch noch erwähnen: die Bewusstseins- bzw. die Begriffsbildung.

8 Vielleicht noch mit anderen Komponenten

9 Auf das Higgsteilchen bzw. das Higgsfeld könnte man dann verzichten. Das grundlegende und einzige Feld wäre das Quantenvakuum. Eine Folge davon müsste sein, dass jede Gravitationswelle auch eine EM-Welle wäre und umgekehrt, allerdings mit sehr unterschiedlicher Stärke, wobei für die EM-Welle der Spin der Photonen verantwortlich wäre.



Zur Konstitution eines Begriffs führt eine Folge von Schemata, die Schemata von Erinnerungsspuren erlebter Situationen des vorsprachlichen Kindes sind. Allerdings werden die je nächsten Schemata gebildet, indem das letzte Schema mit der „jetzt“ erlebten Situation integriert werden. Aus einem Schema und einer Situation entsteht ein neues reicheres Schema, das allmählich sich zu einem Begriff formiert.

Zurück zum Spin. Wie lassen sich die Ergebnisse mathematisch beschreiben? Man verwendet dazu einen Hilbertraum, einen komplexen Vektorraum mit Skalarprodukt.

Im Falle des Spins reicht ein zweidimensionaler Raum  $V$  aus. Als Basisvektoren lassen sich die beiden Zustände bezüglich der  $z$ -Achse wählen:  $|u\rangle$ ,  $|d\rangle$ . Man nennt sie Ket-Vektoren nach Dirac. Das Skalarprodukt (inneres Produkt) wird ebenfalls mit der Dirac-Notation mithilfe des dualen Vektorraums  $V^*$  durch  $\langle u|$  und  $\langle d|$  aufgespannt. Wendet man einen dualen Vektor (der eine lineare Abbildung des Vektorraums auf seinen Körper, also hier  $\mathbb{C}$ ) auf einen normalen Vektor an, so erhält man einen Skalar, eine komplexe Zahl, man schreibt bspw. anstatt  $\langle u|(|d\rangle)$  kurz  $\langle u|d\rangle$ . Der Vektor  $|u\rangle$  kann als Linearkombination von  $|u\rangle, |d\rangle$  geschrieben werden:  $|u\rangle = 1 \cdot |u\rangle + 0 \cdot |d\rangle$ . In dieser Basis hat dieser Vektor die Darstellung  $|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ .

Entsprechend gilt  $|d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Für einen beliebigen Vektor  $|x\rangle$  aus  $V$  gilt:

$$|x\rangle = \alpha_u \cdot |u\rangle + \alpha_d \cdot |d\rangle \text{ mit komplexen } \alpha_u, \alpha_d \in \mathbb{C}. \text{ Er hat dann die Darstellung } |x\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_u \\ \alpha_d \end{pmatrix}.$$

Die duale Basis  $\langle u|$ ,  $\langle d|$  sind folgendermaßen definiert:

$$\langle u|d\rangle := 0 \quad \langle d|u\rangle := 0 \quad \langle u|u\rangle := 1 \quad \langle d|d\rangle := 1.$$

Gilt für zwei Vektoren  $|x\rangle, |y\rangle \in V$   $\langle x|y\rangle = 0$ , so heißen sie orthogonal.

Gilt für einen Vektor  $|x\rangle \in V$   $\langle x|x\rangle = 1$ , so heißt der Vektor normiert.

Die Basis  $|u\rangle, |d\rangle$  ist also eine Orthonormalbasis von  $V$ .

Ebenso ist  $\langle u|, \langle d|$  eine Orthonormalbasis von  $V^{*10}$ .

Hat der Vektor  $|x\rangle$  die Darstellung  $|x\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_u \\ \alpha_d \end{pmatrix}$ , so gilt für den dualen Vektor  $\langle x|$ :

$$\langle x| = \alpha_u^* \cdot \langle u| + \alpha_d^* \cdot \langle d| \quad ^{11}, \text{ wobei die mit } * \text{ bezeichneten komplexen Zahlen die konjugiert}$$

komplexen sind. Seine Darstellung schreibt man als Zeilenvektor  $(\alpha_u^*, \alpha_d^*)$  und das Skalarprodukt, das eine Sesquilinearform ist, führt man dann als Matrixmultiplikation aus:

$$\langle x|x\rangle = (\alpha_u^*, \alpha_d^*) \cdot \begin{pmatrix} \alpha_u \\ \alpha_d \end{pmatrix} = \alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d = |\alpha_u|^2 + |\alpha_d|^2. \text{ Dieses Ergebnis erhält man auch, ohne die}$$

Darstellung zu verwenden. Dazu muss man beachten, dass die Sesquilinearform im ersten Glied nicht homogen ist, es gilt:  $\langle \alpha x|y\rangle = \alpha^* \langle x|y\rangle$ , im zweiten ist sie homogen:

$$\langle x|\beta y\rangle = \beta \langle x|y\rangle \quad ^{12}. \text{ Damit gilt mit } |x\rangle = \alpha_u \cdot |u\rangle + \alpha_d \cdot |d\rangle :$$

$$\langle x|x\rangle = \langle \alpha_u u + \alpha_d d | \alpha_u u + \alpha_d d \rangle = \alpha_u^* \alpha_u \langle u|u\rangle + \alpha_u^* \alpha_d \langle u|d\rangle + \alpha_d^* \alpha_u \langle d|u\rangle + \alpha_d^* \alpha_d \langle d|d\rangle =$$

10 Der Dualraum  $V^{**}$  zum Dualraum  $V^*$  ist isomorph zu  $V$ , kann also mit  $V$  identifiziert werden.

11 Siehe [Bra-Ket-Notation](#), Seite 3

12 Man könnte es auch umgekehrt wählen.

$$\alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d \quad .$$

Es gilt  $\langle x|y \rangle = \langle y|x \rangle^*$ , denn sei  $|x\rangle = \alpha_u \cdot |u\rangle + \alpha_d \cdot |d\rangle$  und  $|y\rangle = \beta_u \cdot |u\rangle + \beta_d \cdot |d\rangle$  :

$$\langle x|y \rangle = \langle \alpha_u u + \alpha_d d | \beta_u u + \beta_d d \rangle = \alpha_u^* \beta_u + \alpha_d^* \beta_d \quad \text{und}$$

$$\langle y|x \rangle^* = \langle \beta_u u + \beta_d d | \alpha_u u + \alpha_d d \rangle^* = (\beta_u^* \alpha_u + \beta_d^* \alpha_d)^* = \beta_u \alpha_u^* + \beta_d \alpha_d^* = \langle x|y \rangle \quad .$$

Daraus folgt, dass  $\langle x|x \rangle \in \mathbb{R}$ , denn  $\langle x|x \rangle^* = \langle x|x \rangle$ .

Weiter gilt:  $\langle x|x \rangle \geq 0$ , denn  $\langle x|x \rangle = \alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d = |\alpha_u|^2 + |\alpha_d|^2 \geq 0$ .

In der Darstellung gilt weiter:  $\langle u|d \rangle = (1, 0) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 + 0 = 0$  und

$$\langle u|u \rangle = (1, 0) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 + 0 = 1 \quad \text{und} \quad \langle d|d \rangle = (0, 1) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 + 1 = 1 \quad , \text{ was ja schon per Definition klar}$$

ist.

Da ergäbe sich schon eine Anwendung:  $\langle u|u \rangle = 1$  ließe sich interpretieren: Ergab die erste Messung  $|u\rangle$  und wurde nochmal direkt gemessen, so ergab sich wieder  $|u\rangle$  mit der Wahrscheinlichkeit 1.

Und  $\langle d|u \rangle = 0$  hätte die Interpretation: War die erste Messung  $|u\rangle$ , dann ist die Wahrscheinlichkeit, dass die direkte zweite Messung  $|d\rangle$  ergibt: 0, also unmöglich.

Diese Interpretation ist aber noch etwas verfrüht.

Betrachtet man nämlich die Folge:

1. Messung:  $|u\rangle$

2. Drehung um  $90^\circ$  und Messung:  $|r\rangle$ , also das Gerät zeigt 1, so war die Wahrscheinlichkeit dafür 0,5.

Stellt man  $|r\rangle \in V$  als Linearkombination (LK) der Basisvektoren dar, so hat man

$$|r\rangle = \alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle \quad .$$

Für  $\langle r|r \rangle$  ergibt sich  $\langle r|r \rangle = \alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d$ , da sicher ist, dass eine zweite Messung wieder

$$|r\rangle \quad , \text{ wenn die erste bereits } |r\rangle \text{ war, müsste das Ergebnis 1 sein: } \langle r|r \rangle = \alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d \stackrel{!}{=} 1 \quad .$$

Was ergibt sich für die obige Folge?  $\langle r|u \rangle = \langle \alpha_u u + \alpha_d d | u \rangle = \alpha_u^* \langle u|u \rangle + \alpha_d^* \langle d|u \rangle = \alpha_u^*$

Das müsste aber dann 0,5 sein. Das gleiche folge für  $\alpha_d^*$ , wenn man die Folge  $\langle r|d \rangle$  wählt.

$$\text{Dann wäre aber } \langle r|r \rangle = \alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{2} \neq 1 \quad .$$

Diese Interpretation ist also falsch.

Wählt man hingegen für  $\langle u|u \rangle = 1$  die Interpretation, dass  $|\langle u|u \rangle|^2$  die Wahrscheinlichkeit angibt, erhält man auch das richtige Ergebnis 1.

Was gilt dann für  $|\langle r|r \rangle|^2$ ?  $|\langle r|r \rangle|^2 = |\alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d|^2 = \|\alpha_u^*\|^2 + \|\alpha_d^*\|^2 = \left|\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right|^2 = 1$ , also richtig.

Daraus folgt noch weiter, dass  $\langle r|r \rangle = \alpha_u^* \alpha_u + \alpha_d^* \alpha_d = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$ , was für alle Vektoren gilt:

$$\langle x|x \rangle = 1, \text{ denn laut Interpretation muss ja gelten } |\langle x|x \rangle|^2 = 1$$

$$\Rightarrow |\langle x|x \rangle| = 1 \Rightarrow \langle x|x \rangle = 1 \vee \langle x|x \rangle = -1 \Rightarrow \langle x|x \rangle = 1, \text{ da } \langle x|x \rangle \geq 0.$$

Jeder Vektor ist also normiert.

Wählt man also die Interpretation, dass  $|\langle x|y \rangle|^2$  die Wahrscheinlichkeit dafür ist, dass das Ergebnis der 2. Messung  $|x \rangle$ , wenn das Ergebnis der 1. Messung  $|y \rangle$  war, so sieht es ganz gut aus.

Den Term  $\langle x|y \rangle$  nennt man die **Wahrscheinlichkeitsamplitude**. Erst ihr Betragsquadrat  $|\langle x|y \rangle|^2$  ist die Wahrscheinlichkeit  $P_y(x)$ .

Multipliziert man  $|u \rangle$  mit  $|x \rangle = \alpha_u \cdot |u \rangle + \alpha_d \cdot |d \rangle$ :  $\langle u|x \rangle = \langle u | (\alpha_u \cdot |u \rangle + \alpha_d \cdot |d \rangle) = \alpha_u$ , erhält man die Komponente  $\alpha_u$  von  $|x \rangle$ . Multipliziert man  $|d \rangle$  mit  $|x \rangle = \alpha_u \cdot |u \rangle + \alpha_d \cdot |d \rangle$ , bekommt man die zweite Komponente von  $\alpha_d$  von  $|x \rangle$ .

Es gilt also  $\alpha_u = \langle u|x \rangle$  und  $\alpha_d = \langle d|x \rangle$ .  $|x \rangle$  kann also auch geschrieben werden in der Form  $|x \rangle = |u \rangle \langle u|x \rangle + |d \rangle \langle d|x \rangle = (|u \rangle \langle u| + |d \rangle \langle d|) |x \rangle$ <sup>13</sup>

Demnach kann auch die Wahrscheinlichkeit anders geschrieben werden:

$$P_x(u) = |\langle u|x \rangle|^2 = |\alpha_u|^2 = \alpha_u^* \alpha_u = \langle x|u \rangle \langle u|x \rangle \quad P_x(d) = |\langle d|x \rangle|^2 = |\alpha_d|^2 = \alpha_d^* \alpha_d = \langle x|d \rangle \langle d|x \rangle$$

Wie stellen sich nun die Vektoren  $|r \rangle$  und  $|l \rangle$  in der vorgegebenen Basis dar?

Man kann schon mal sagen, dass  $|r \rangle = \alpha_u \cdot |u \rangle + \alpha_d \cdot |d \rangle$  mit  $\alpha_u, \alpha_d \in \mathbb{C}$ . Wie sehen die Komponenten  $\alpha_u, \alpha_d \in \mathbb{C}$  konkreter aus?  $\alpha_u = \langle u|r \rangle$  und  $|\alpha_u|^2 = P_r(u) = \frac{1}{2} \Rightarrow |\alpha_u| = \frac{1}{\sqrt{2}}$ .

Da für jede komplexe Zahl  $z$  mit  $z = r e^{i\varphi}$  gilt  $|z| = r$  und umgekehrt für ein gewisses  $\varphi$ , so ist  $\alpha_u = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\varphi}$  für ein gewisses  $\varphi$ . Gleiche Argumentation für  $\alpha_d$ :  $\alpha_d = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\psi}$ . Also gilt

$$|r \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} \cdot |u \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\psi} \cdot |d \rangle. \text{ Die „Phasenfaktoren“ } e^{i\varphi} \text{ bzw. } e^{i\psi} \text{ haben mit dem Betrag 1}$$

13 Der Klammerausdruck wird später als Einsoperator identifiziert werden.

keinen Einfluss auf die Wahrscheinlichkeiten (also dem physikalisch Relevanten):

$P_x(u) = \alpha_u^* \alpha_u$  , wenn  $|x\rangle = \alpha_u \cdot |u\rangle + \alpha_d \cdot |d\rangle$  . Sei nun  $z$  mit  $|z|=1$  ein Phasenfaktor, dann ist  $z|x\rangle = z\alpha_u \cdot |u\rangle + z\alpha_d \cdot |d\rangle$  und die Wahrscheinlichkeit

$$P_{zx}(u) = (z\alpha_u)^* z\alpha_u = \alpha_u^* z^* z\alpha_u = \alpha_u^* \alpha_u , \text{ da } z^* z = 1 . \text{ Also } P_x(u) = P_{zx}(u) .$$

Gleiche Argumentation für  $P_x(d) = P_{zx}(d)$  . Den Phasenfaktor kann man also jeweils auch

weglassen und demnach schreiben:  $|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot |u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot |d\rangle$  .

$|l\rangle = \beta_u \cdot |u\rangle + \beta_d \cdot |d\rangle$  . Es gilt  $\langle r|l\rangle = 0 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \beta_u + \frac{1}{\sqrt{2}} \beta_d = 0 \Rightarrow \beta_u + \beta_d = 0$  , also

$$|l\rangle = \beta_u \cdot |u\rangle - \beta_u \cdot |d\rangle . \quad 1 = \langle l|l\rangle = \beta_u^* \beta_u + \beta_u^* \beta_u \Rightarrow \beta_u^* \beta_u = \frac{1}{2} \Rightarrow \beta_u = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} \Rightarrow$$

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot |u\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot |d\rangle .$$

Man kann also auch  $|r\rangle, |l\rangle$  als Basisvektoren wählen. Auch sie bilden eine Orthonormalbasis, da sie zueinander orthogonal und jeweils normiert sind.

Die Bestimmung der Komponenten wird für

$$|o\rangle = \gamma_u \cdot |u\rangle + \gamma_d \cdot |d\rangle \quad |i\rangle = \delta_u \cdot |u\rangle + \delta_d \cdot |d\rangle \quad \text{etwas komplizierter.}$$

$\langle u|i\rangle = \langle u|\delta_u u + \delta_d d\rangle = \delta_u \Rightarrow |\langle u|i\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} = |\delta_u| \Rightarrow \delta_u = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\varphi}$  . Also kann gewählt werden

$$\delta_u = \frac{1}{\sqrt{2}} . \text{ Analog mit } \langle d|i\rangle = \delta_d : \delta_d = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\psi} .$$

$$\langle i|r\rangle = \langle \delta_u u + \delta_d d | \frac{1}{\sqrt{2}} u + \frac{1}{\sqrt{2}} d \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \delta_u^* + \frac{1}{\sqrt{2}} \delta_d^* \Rightarrow \langle r|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \delta_u + \frac{1}{\sqrt{2}} \delta_d \Rightarrow$$

$$\frac{1}{2} = \langle i|r\rangle \langle r|i\rangle = \frac{1}{2} \left( \underbrace{\delta_u^* \delta_u}_{\frac{1}{2}} + \delta_u^* \delta_d + \delta_d^* \delta_u + \underbrace{\delta_d^* \delta_d}_{\frac{1}{2}} \right) \Rightarrow \underbrace{\delta_u^* \delta_d}_{=:z} + \underbrace{\delta_d^* \delta_u}_{z^*} = 0$$

$$z + z^* = 0 \text{ für } z = a + ib \text{ und } z^* = a - ib \Rightarrow z + z^* = 2a = 0 \Rightarrow a = 0 \Rightarrow z = ib$$

Ist  $\delta_u \text{ real} \Rightarrow \delta_u^* \text{ real}$  , wäre dann auch  $\delta_d \text{ real} \Rightarrow z = \delta_u^* \delta_d \text{ real}$  Widerspruch zu  $z = ib$  , also muss  $\delta_d$  imaginär sein , wenn  $\delta_u$  real ist.

Man kann bei  $\delta_u = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\varphi}$  den Phasenvektor ignorieren (siehe oben), also  $\delta_u = \frac{1}{\sqrt{2}}$  (real).  
Also ist  $\delta_d$  imaginär.

Es ist analog  $\delta_d = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\psi}$ . Also muss  $e^{i\psi}$  gleich  $i$  oder  $-i$  sein. Wähle  $i$ :

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}i|d\rangle.$$

$$\langle i|o\rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}u + \frac{1}{\sqrt{2}}id \left| y_u u + y_d d \right. \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}y_u + \frac{1}{\sqrt{2}}y_d i \quad \text{also} \quad \langle o|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}y_u^* - \frac{1}{\sqrt{2}}y_d^* i \quad \text{und}$$

$$0 = \langle i|o\rangle \langle o|i\rangle = \frac{1}{2} \underbrace{y_u y_u^* + y_d y_d^*}_{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} y_u y_d^* i + \frac{1}{2} y_d y_u^* i \Rightarrow 0 = 1 - (y_d y_u^* - y_u y_d^*) i \Rightarrow -i = \underbrace{y_d y_u^*}_{=: ib} - \underbrace{y_u y_d^*}_{=: -ib} \Rightarrow$$

$$2ib = -i \Rightarrow b = -\frac{1}{2} \Rightarrow y_u y_d^* = \frac{1}{2} i$$

$$\langle u|o\rangle = \langle u|y_u u + y_d d\rangle = y_u \Rightarrow |y_u|^2 = |\langle u|o\rangle|^2 = \frac{1}{2} \Rightarrow y_u = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} \quad \text{wähle} \quad y_u = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\frac{1}{2} i = y_u y_d^* = \frac{1}{\sqrt{2}} y_d^* \Rightarrow y_d^* = \frac{\sqrt{2}}{2} i = \frac{1}{\sqrt{2}} i \Rightarrow y_d = \frac{-1}{\sqrt{2}} i \quad \text{und damit hat man endlich:}$$

$$|o\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}i|d\rangle.$$

Auch diese Vektoren bilden eine Orthonormalbasis.

Man kann also alle Vektoren in dieser Basis als LK angeben. Addiert man die beiden LK von

$$|i\rangle \text{ und } |o\rangle \text{ auf, erhält man } |i\rangle + |o\rangle = \frac{2}{\sqrt{2}}|u\rangle \Rightarrow |u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|i\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|o\rangle. \quad \text{Subtrahiert man}$$

$$|o\rangle \text{ von } |i\rangle \text{ ergibt das: } |i\rangle - |o\rangle = \frac{2}{\sqrt{2}}i|d\rangle \Rightarrow |d\rangle = \frac{-i}{\sqrt{2}}|i\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|o\rangle.$$

Ein beliebiger Vektor in der Basis  $|u\rangle, |d\rangle$ :  $|\psi\rangle = \alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle$  wird so in der Basis

$$|i\rangle, |o\rangle \text{ zu: } |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_u - i\alpha_d)|i\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_u + i\alpha_d)|o\rangle.$$

Alles, was man in der Quantenmechanik tatsächlich messen kann (Observablen<sup>14</sup>), wie beispielsweise den Spin mit dem Stern-Gerlach-Apparat, wird mit **linearen Operatoren** beschrieben.

Die Ergebnisse der Messung werden begrifflich als Zustand und mathematisch als **Zustandsvektoren** gefasst. So wird der Zustand eines Silberatoms, das durch das inhomogene Magnetfeld abgelenkt wird als Zustand „oben“ (bzgl. der z-Achse) und „unten“ beschrieben und mathematisch als Zustandsvektor  $|u\rangle$  bzw.  $|d\rangle$  im Hilbertraum ausgedrückt.

Lineare Operatoren  $\hat{O}$  sind lineare Abbildungen vom Hilbertraum  $V = \mathcal{H}$  nach  $\mathcal{H}$ ; sie ordnen also einem Zustandsvektor  $|x\rangle$  einen weiteren Zustandsvektor  $|y\rangle$  zu:

$$\hat{O}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}; |x\rangle \mapsto |y\rangle = \hat{O}(|x\rangle) \quad .$$

Sie können in einer gegebenen Basis als **Matrizen**  $M \doteq \hat{O}$  dargestellt werden. So ist bspw.

$\hat{s}_z \doteq \frac{\hbar}{2} \sigma_z$  ein Spinoperator, der den Spins die z-Komponenten zuordnet, wobei  $\sigma_z$  eine **Pauli-Matrix** ist:

$$\hat{s}_z(|u\rangle) := \frac{\hbar}{2}|u\rangle \quad \text{und} \quad \hat{s}_z(|d\rangle) := -\frac{\hbar}{2}|d\rangle \quad \text{und jedem Spin}$$

$\hat{s}_z(\alpha_u|u\rangle + \alpha_d|d\rangle) \stackrel{\text{Linearität}}{=} \alpha_u \hat{s}_z(|u\rangle) + \alpha_d \hat{s}_z(|d\rangle)$  . So ordnet er dem Spin  $|r\rangle$  zu:

$$\hat{s}_z(|r\rangle) = \hat{s}_z\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_z(|u\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_z(|d\rangle) = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}}|u\rangle - \frac{\hbar}{2\sqrt{2}}|d\rangle = \frac{\hbar}{2}|l\rangle \quad .$$

Wählt man die Basis  $|u\rangle, |d\rangle$ , dann haben deren Vektoren in dieser Basis die Darstellung

$$|u\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |d\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad .$$

Zur Darstellung des Operators: Sei der Einfachheit halber  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$  Basis von  $\mathcal{H}$  und

$\hat{O}: \mathbf{x} \rightarrow \hat{O}(\mathbf{x}) = \mathbf{y}$  und  $\mathbf{x} = x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2$  und  $\hat{O}(\mathbf{e}_1) = \alpha_1 \mathbf{e}_1 + \alpha_2 \mathbf{e}_2$   $\hat{O}(\mathbf{e}_2) = \beta_1 \mathbf{e}_1 + \beta_2 \mathbf{e}_2$ , dann

ist  $\hat{O}(\mathbf{x}) = \hat{O}(x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2) = x_1 \hat{O}(\mathbf{e}_1) + x_2 \hat{O}(\mathbf{e}_2) = x_1(\alpha_1 \mathbf{e}_1 + \alpha_2 \mathbf{e}_2) + x_2(\beta_1 \mathbf{e}_1 + \beta_2 \mathbf{e}_2) =$

$$(\alpha_1 x_1 + \beta_1 x_2) \mathbf{e}_1 + (\alpha_2 x_1 + \beta_2 x_2) \mathbf{e}_2 \doteq \begin{pmatrix} \alpha_1 x_1 + \beta_1 x_2 \\ \alpha_2 x_1 + \beta_2 x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} x_1 + \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} x_2 =: \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 \end{pmatrix}}_M \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

Der Vektor  $\hat{O}(\mathbf{x})$  lässt sich also in der gewählten Basis darstellen als  $M \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 \end{pmatrix}}_M \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$

Man schreibt manchmal auch etwas ungenau  $M \cdot \mathbf{x} = \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 \end{pmatrix}}_M \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$  .

Wie lautet die Darstellungsmatrix für  $\hat{s}_z$ ?

$$\hat{s}_z(|u\rangle) \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \hat{s}_z(|d\rangle) \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \text{ also } \hat{s}_z \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z.$$

Ich gebe die anderen zwei Pauli-Matrizen einfach an:  $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x$  und  $\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_y$  und werde sie später noch herleiten. Also  $\hat{s}_x \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  und  $\hat{s}_y \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ .

Der **Spinoperator** setzt sich aus diesen Komponenten zusammen:  $\hat{s} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$ .

Ein anderes wichtiges Beispiel für einen Operator ist der sogenannte **Hamiltonoperator**  $\hat{H}$ .

Er symbolisiert die Energiemesswerte. Dem Zustandsvektor  $|\psi(t)\rangle$  wird mithilfe des

Hamiltonoperators der Zustandsvektor  $\hat{H}|\psi\rangle$  zugeordnet mit  $\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle$ <sup>15</sup>

$\psi(t)$  ist dabei die Wellenfunktion. Durch die Schrödingergleichung können z.B. die Energieniveaus (Eigenvektoren s.u.) berechnet werden.

Was für die Quantenmechanik sehr wichtig (und nicht nur für sie), ist eine spezielle Eigenschaft von Operatoren, ihre sogenannten **Eigenvektoren**.

Ein Eigenvektor ist ein Vektor ungleich dem Nullvektor  $|0\rangle$ <sup>16</sup>, dessen Bild unter dem Operator nur ein Vielfaches des Urbildes ist:

$$\hat{O}(|x\rangle) = \lambda_x |x\rangle, \text{ wobei man } \lambda_x \in \mathbb{C} \text{ den } \mathbf{Eigenwert} \text{ zu } |x\rangle \text{ nennt.}$$

Diese Eigenvektoren repräsentieren stabile Zustände<sup>17</sup>.

Wählt man wieder den Operator  $\hat{s}_z$  und setzt die Gleichung  $\hat{s}_z(|u\rangle) = \lambda_u |u\rangle$  an, erhält man  $\frac{\hbar}{2} |u\rangle = \lambda_u |u\rangle \Rightarrow \lambda_u = \frac{\hbar}{2}$ .  $\frac{\hbar}{2}$  ist also der Eigenwert zu  $|u\rangle$  von  $\hat{s}_z$ .

$$\hat{s}_z(|d\rangle) = \lambda_d |d\rangle \Rightarrow -\frac{\hbar}{2} |d\rangle = \lambda_d |d\rangle \Rightarrow \lambda_d = -\frac{\hbar}{2}. \quad -\frac{\hbar}{2} \text{ ist der Eigenwert zu } |d\rangle \text{ des Operators } \hat{s}_z.$$

Man möchte aber sämtliche Eigenvektoren eines Operators kennen. Man bestimmt zuerst die Eigenwerte und dann die zugehörigen Eigenvektoren:

$$\hat{s}_z(|x\rangle) = \lambda_x |x\rangle \Leftrightarrow \hat{s}_z(\alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle) = \lambda_x (\alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle) \Leftrightarrow \frac{\hbar}{2} \alpha_u |u\rangle - \frac{\hbar}{2} \alpha_d |d\rangle = \lambda_x \alpha_u |u\rangle + \lambda_x \alpha_d |d\rangle \Leftrightarrow$$

15 Diese Differentialgleichung wird Schrödingergleichung genannt.

16 Der Nullvektor wird ausgeschlossen, da mit  $\hat{O}(|0\rangle) = |0\rangle$   $\hat{O}(|0\rangle) = \lambda |0\rangle$  unendlich viel Lösungen hat.

17 Ist der Zustand „up“, so misst der Apparat, wenn sonst nichts verändert wird, wieder „up“.

$$\left(\frac{\hbar}{2}\alpha_u - \lambda_x \alpha_u\right)|u\rangle + \left(-\frac{\hbar}{2}\alpha_d - \lambda_x \alpha_d\right)|d\rangle = |0\rangle \stackrel{\text{linear unabhängig}}{\Rightarrow} \frac{\hbar}{2}\alpha_u = \lambda_x \alpha_u \wedge \frac{\hbar}{2}\alpha_d = -\lambda_x \alpha_d \quad . \text{ Da } |x\rangle \neq |0\rangle \text{ gilt}$$

$\alpha_u \neq 0 \vee \alpha_d \neq 0$  . Ist  $\alpha_u \neq 0 \Rightarrow \lambda_x = \frac{\hbar}{2}$  , ist  $\alpha_d \neq 0 \Rightarrow \lambda_x = -\frac{\hbar}{2}$  .  $\frac{\hbar}{2}$  und  $-\frac{\hbar}{2}$  sind die beiden einzigen Eigenwerte.

Zur Bestimmung der dazugehörigen Eigenvektoren: Sei  $\lambda_x = \frac{\hbar}{2}$  :  $\hat{s}_z(|x\rangle) = \frac{\hbar}{2}|x\rangle \Leftrightarrow$

$$\frac{\hbar}{2}\alpha_u|u\rangle - \frac{\hbar}{2}\alpha_d|d\rangle = \frac{\hbar}{2}\alpha_u|u\rangle + \frac{\hbar}{2}\alpha_d|d\rangle \Leftrightarrow -2\alpha_d|d\rangle = |0\rangle \Rightarrow \alpha_d = 0 \Rightarrow |x\rangle = \alpha_u|u\rangle \quad .$$

Da mit einem Eigenvektor auch immer das Vielfache des Eigenvektors wieder Eigenvektor ist, wählt man als *den* Eigenvektor den mit Norm 1, also  $|x\rangle = |u\rangle$  .

Sei nun  $\lambda_x = -\frac{\hbar}{2}$  :

$$\hat{s}_z(|x\rangle) = -\frac{\hbar}{2}|x\rangle \Leftrightarrow \frac{\hbar}{2}\alpha_u|u\rangle - \frac{\hbar}{2}\alpha_d|d\rangle = -\frac{\hbar}{2}\alpha_u|u\rangle - \frac{\hbar}{2}\alpha_d|d\rangle \Leftrightarrow 2\alpha_u|u\rangle = |0\rangle \Rightarrow \alpha_u = 0 \Rightarrow |x\rangle = \alpha_d|d\rangle \quad ,$$

also ist zum Eigenwert  $-\frac{\hbar}{2}$  der (normierte) Eigenvektor  $|x\rangle = |d\rangle$  . Demnach sind  $|u\rangle, |d\rangle$

die einzigen Eigenvektoren von  $\hat{s}_z$  . Die **Eigenwerte**  $\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}$  **sind die einzigen**

„**Messwerte**“<sup>18</sup>, die die z-Komponente des Spins annehmen können.

Den genaueren Zusammenhang von Mathematik und empirischer Physik ist am Beispiel der z-Komponente des Spins in der Tabelle angegeben.

Zusammenhang von Mathematik (theoretischer Physik) und (empirischer) Physik					
Mathematik	Operator $\hat{s}_z$	Eigenwerte von $\hat{s}_z$		Eigenvektoren von $\hat{s}_z$ (Zustandsvektoren)	
		$\frac{\hbar}{2}$	$-\frac{\hbar}{2}$	$ u\rangle$	$ d\rangle$
Physik	Observable $s_z$ (z-Komponente des Spins)	Maßzahl 1 Maßeinheit $\frac{\hbar}{2} = 3,2911 \cdot 10^{-16} \text{ eVs}$	Maßzahl -1 Maßeinheit $\frac{\hbar}{2}$	Zustand Fleck oben	Zustand Fleck unten
		Spin-Maß $\frac{\hbar}{2}$	Spin-Maß $-\frac{\hbar}{2}$		

Wie sieht der Zusammenhang zwischen der *Anwendung des Operators auf einen Zustandsvektor* einerseits und der *Messung der Observablen* andererseits aus?

18 Man konstatiert mit dem Messgerät natürlich nicht 1 und -1, sondern „oberer Fleck“ und „unterer Fleck“ und bezeichnet die Zustände mathematisch mit den Zustandsvektoren  $|u\rangle$  und  $|d\rangle$  und *berechnet* dann die Werte  $\frac{\hbar}{2}$  bzw.  $-\frac{\hbar}{2}$



**Bsp1:**

Operatoranwendung:  $\hat{s}_z(|d\rangle) = -\frac{\hbar}{2}|d\rangle$

Messung: Apparat in z-Richtung; Silberatom-Strahl zeigt nach unten (Präparierung)  $\rightarrow |d\rangle$   
 Ein zweiter Apparat des „unten“-Strahls misst wieder „unten“:  $\rightarrow |d\rangle$

$-\frac{\hbar}{2}|d\rangle$  und  $|d\rangle$  zeigen den gleichen Zustand (Fleck unten) an.

Hier sieht es so aus, als ob die Operatoranwendung direkt den Messprozess widerspiegelt.

**Bsp2:**

Operatoranwendung:

$$\hat{s}_z(|r\rangle) = \hat{s}_z\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_z(|u\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_z(|d\rangle) = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}}|u\rangle - \frac{\hbar}{2\sqrt{2}}|d\rangle = \frac{\hbar}{2}|l\rangle$$

Messung: Apparat misst in y-Richtung, Fleck erscheint rechts auf Schirm (Präparierung)  $\rightarrow |r\rangle$ .  
 Ein zweiter Apparat in z-Richtung empfängt den „rechts“-Strahl und auf Schirm erscheinen wieder zwei gleich große Flecken, oben und unten. Die Wahrscheinlichkeiten für „oben“ ist 50% und für „unten“ ebenfalls 50%.

Das Messergebnis ist sicher nicht „links“! wie die Operatoranwendung suggerieren würde, falls eine eindeutige Beziehung bestünde zwischen Physik und Mathematik.

Eine direkte Beziehung besteht nur, wenn die Zustandsvektoren  $|u\rangle$  bzw.  $|d\rangle$ , d.h. die Eigenvektoren von  $\hat{s}_z$  sind.

Der Eigenwert zu  $\hat{s}_z \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  ist  $\frac{\hbar}{2}$  mit Eigenvektor  $|u\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  in der Basis  $|u\rangle, |d\rangle$   
 bzw.  $-\frac{\hbar}{2}$  mit dem Eigenvektor  $|d\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

Der Zusammenhang der Spinkomponente  $\hat{s}_z$  des Spinoperator  $\hat{s} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$  und dem magnetischen Moment  $\mu_s$  ist:

$\mu_s = g_e \frac{e}{2m_e} s_z$  mit dem Landé-Faktor  $g_e \approx -2$ . Dabei ist  $s = \frac{1}{2}$  die Spinquantenzahl,

$m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$  die magnetische Spinquantenzahl und  $m_s \hbar = \pm s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$  wie bereits gesagt die Eigenwerte von  $\hat{s}_z$ .

Die Messung der Observablen  $s_z$  wird durch das Spin-Maß  $\pm \frac{1}{2} \hbar$  gegeben, das die Eigenwerte des Operators  $\hat{s}_z$  sind.

Man sagt, dass die Messwerte (Maße) immer reelle Zahlen sein sollen, da es in der realen Welt nur reelle Zahlen<sup>19</sup> gibt und keine komplexen. Warum können nicht komplexe Zahlen die Wirklichkeit beschreiben? Ein Grund ist das Bedürfnis, Messwerte eindeutig verglichen zu können. Ist einer größer oder gleich oder kleiner als ein anderer? Reelle Zahlen sind linear angeordnet. Komplexe Zahlen nicht. 1 und i lassen sich nicht vergleichen. Man kann zwar sagen, dass sie die gleiche Größe haben, aber nicht, dass sie gleich sind. Komplexe Zahlen lassen sich nur vergleichen, wenn sie auf einer gemeinsamen Geraden der komplexen Ebene liegen. Ansonsten muss man ihren Betrag wählen und dann gibt es eine ganze Menge von Zahlen, die den gleichen Betrag haben, nämlich alle Zahlen, die auf einem Ursprungskreis mit Radius des besagten Betrags liegen. Meines Erachtens spräche einiges dafür, komplexe Zahlen als Messwerte zuzulassen. So sollte die Physik nicht nur das Reale betrachten, sondern auch das Virtuelle, wie sie es ja in der QED tut. Die Wirklichkeit ist stets eine Kombination aus Realität und Virtualität. So ist die Ladung eines Elektron streng genommen nicht e, sondern viel größer. Erst durch die Abschirmung seiner Wolke aus virtuellen Teilchen bekommt es die Ladung e. Die Ladung ist also eine Kombination aus der realen, viel größeren Ladung und der virtuellen Wolke.

Nun, die klassische Quantentheorie aber betrachtet leider nur reelle Werte als Messwerte. Das hat zur Folge, dass nur komplexe Zahlen z in Frage kommen, die mit ihrer komplex Konjugierten  $z^*$  identisch sind und das sind die reellen Zahlen:  $z = a + ib = a - ib = z^* \Rightarrow ib = -ib \Rightarrow b = 0 \Rightarrow z = a \in \mathbb{R}$ .

Operatoren, die mit ihrem adjungierten Operator identisch sind erzeugen nur reelle Eigenwerte. Solche Operatoren nennt man selbstadjungiert oder **hermitesch**. Ein Operator  $\hat{O}^+ : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  ist **adjungiert** zu  $\hat{O} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , wenn  $\langle \hat{O}^+ x | y \rangle = \langle x | \hat{O} y \rangle$  für alle Vektoren  $|x\rangle, |y\rangle \in \mathcal{H}$ .

Sei  $|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle$  eine Orthonormalbasis in  $\mathcal{H}$ . Sei  $\hat{O}|y\rangle = |z\rangle$ ,

$$|x\rangle = \sum_j x_j |e_j\rangle \quad \text{mit der Darstellung} \quad \langle x | \doteq \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad \text{und}$$

$$|z\rangle = \sum_j z_j |e_j\rangle \quad \text{mit der Darstellung} \quad \langle z | \doteq \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} \quad \text{und}$$

$$|y\rangle = \sum_j y_j |e_j\rangle \quad \text{mit der Darstellung} \quad \langle y | \doteq \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad \text{dann ergibt}$$

$$\hat{O}|y\rangle = |z\rangle : \quad \hat{O} \sum_j y_j |e_j\rangle = \sum_j z_j |e_j\rangle \Leftrightarrow \sum_j \hat{O}|e_j\rangle y_j = \sum_j z_j |e_j\rangle.$$

Wendet man auf diese Gleichung den dualen Bravektor  $\langle e_i |$  an, so ergibt das die Komponenten von  $\hat{O}|y\rangle = |z\rangle$  in der gegebenen Basis:

$$\langle e_i | \sum_j \hat{O}|e_j\rangle y_j = \langle e_i | \sum_j z_j |e_j\rangle \Leftrightarrow \sum_j \langle e_i | \hat{O}|e_j\rangle y_j = \sum_j \langle e_i | e_j \rangle z_j \Leftrightarrow \sum_j m_{ij} y_j = z_i \quad (*) \text{ mit}$$

$$m_{ij} := \langle e_i | \hat{O}|e_j \rangle \quad \text{den Matrixelementen der Matrix} \quad M = \begin{pmatrix} m_{11} & \dots & m_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & \dots & m_{nn} \end{pmatrix}.$$

Die Gleichung (\*) für  $i = 1 \dots n$  lässt sich als Gleichung einer Matrixmultiplikation von M mit

<sup>19</sup> Streng genommen gibt es jedoch nur rationale.

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \text{ verstehen: } \begin{pmatrix} m_{11} & \cdots & m_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & \cdots & m_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_j m_{1j} y_j \\ \vdots \\ \sum_j m_{nj} y_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}, \text{ die Darstellung von } \hat{O}|y\rangle = |z\rangle.$$

Multipliziert man nun  $\hat{O}|y\rangle = |z\rangle$  mit dem Bravektor  $\langle x|$  mit der Darstellung

$\langle x| \doteq (x_1^*, \dots, x_n^*)$ , so ergibt das die Skalargleichung  $\langle x|\hat{O}|y\rangle = \langle x|z\rangle$  mit der Darstellung:

$$(x_1^*, \dots, x_n^*) \begin{pmatrix} m_{11} & \cdots & m_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & \cdots & m_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = (x_1^*, \dots, x_n^*) \begin{pmatrix} \sum_j m_{1j} y_j \\ \vdots \\ \sum_j m_{nj} y_j \end{pmatrix} = (x_1^*, \dots, x_n^*) \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\langle x|\hat{O}|y\rangle \doteq (x_1^* m_{11} y_1 + \dots + x_1^* m_{1n} y_n) + \dots + (x_n^* m_{n1} y_1 + \dots + x_n^* m_{nn} y_n) \quad (1)$$

Der Operator  $\hat{O}^\dagger$  habe die Darstellung  $A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$ , dann ist

$$\hat{O}^\dagger|x\rangle \doteq \begin{pmatrix} a_{11} x_1 + \dots + a_{1n} x_n \\ \vdots \\ a_{n1} x_1 + \dots + a_{nn} x_n \end{pmatrix}, \text{ dessen Bravektordarstellung ist}$$

$$(a_{11}^* x_1^* + \dots + a_{1n}^* x_n^*, \dots, a_{n1}^* x_1^* + \dots + a_{nn}^* x_n^*) \text{ und das ist die Darstellung von } \langle \hat{O}^\dagger x|.$$

Wirkt dieser Bravektor auf  $|y\rangle$  und ergibt  $\langle \hat{O}^\dagger x|y\rangle$ , so ist dessen Darstellung

$$(a_{11}^* x_1^* + \dots + a_{1n}^* x_n^*, \dots, a_{n1}^* x_1^* + \dots + a_{nn}^* x_n^*) \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = (a_{11}^* x_1^* y_1 + \dots + a_{1n}^* x_n^* y_1) + \dots + (a_{n1}^* x_1^* y_n + \dots + a_{nn}^* x_n^* y_n) =$$

$$(x_1^* a_{11}^* y_1 + \dots + x_1^* a_{n1}^* y_n) + \dots + (x_n^* a_{1n}^* y_1 + \dots + x_n^* a_{nn}^* y_n) \quad (2)$$

Vergleicht man (1) mit (2) ergibt sich  $m_{11} = a_{11}^*, \dots, m_{1n} = a_{n1}^*, \dots, m_{n1} = a_{1n}^*, \dots, m_{nn} = a_{nn}^*$ , d.h. die

darstellende Matrix von  $\hat{O}$  ist  $M = \begin{pmatrix} a_{11}^* & \cdots & a_{n1}^* \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n}^* & \cdots & a_{nn}^* \end{pmatrix}$  und das ist die konjugiert komplex

transponierte Matrix von  $\hat{O}^\dagger$ , d.h.  $M = A^{*T} =: A^\dagger$ .

Ein Operator  $\hat{O}^\dagger$  ist also adjungiert zum Operator  $\hat{O}$ , wenn die darstellende Matrix M von

$\hat{O}$  die konjugiert komplex transponierte Matrix von  $\hat{O}^\dagger$  ist.

Man sieht leicht, dass  $(A^\dagger)^\dagger = A$  ist. Also ist die obige  $M = A^\dagger$  Beziehung äquivalent zu  $A = M^\dagger$ .

Ein Operator  $\hat{O}$  heißt selbstadjungiert, wenn  $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$ , d.h. wenn  $\langle \hat{O}x | y \rangle = \langle x | \hat{O}y \rangle$ , d.h. wenn man den Operator im Skalarprodukt von links nach rechts oder umgekehrt ziehen kann.

Noch eine Bemerkung zur dualen Korrespondenz:

$$|x\rangle \leftrightarrow \langle x| \quad ; \quad \lambda|x\rangle \leftrightarrow \langle x|\lambda^* \quad ; \quad \hat{O}|x\rangle \leftrightarrow \langle x|\hat{O}^\dagger .$$

Für die darstellende Matrix  $M$  eines selbstadjungierten Operators in einem festen Basissystem gilt dann, dass  $M^\dagger = M$ . Solche Matrizen nennt man **hermitesch**.

Da die Maßzahlen in der Quantentheorie reelle Größen sein sollen und die Eigenwerte des Operators, der die Observable mathematisch symbolisiert die Maßzahlen bedeuten, so müssen die Mess-Operatoren selbstadjungiert und ihre Matrizen hermitesch sein.

Das trifft bspw. für die Spinoperatoren  $\hat{s}_x, \hat{s}_y$  und  $\hat{s}_z$  zu. Ihre Matrizen sind nämlich im

Basissystem  $|u\rangle, |d\rangle$  :  $\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$  und  $\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  hermitesch.

Übrigens sind die Einträge in einer hermiteschen Matrix in der Diagonalen immer reell. Denn die Diagonaleinträge  $a_{ii}$  verändern sich bei der Transposition (Spiegelung an der Hauptdiagonalen) nicht und diese müssen nach ihrer komplexen Konjugation  $a_{ii}^*$  identisch bleiben, also  $a_{ii}^* = a_{ii}$ , diese sind aber obligatorisch reell.

Die zweite Paulimatrix  $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$  hat zwei komplexe Einträge  $i$  und  $-i$ . Ihre Transposition ist

$$\sigma_y^T = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \text{ und wird nun komplex konjugiert, so ergibt das } (\sigma_y^T)^* = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_y .$$

Dass die beiden anderen Paulimatrizen hermitesch sind, ist direkt ersichtlich, da alle Einträge reell sind und in der Nebendiagonalen identische Werte vorkommen.

Es soll noch ein weiterer Operator betrachtet werden: der Ortsoperator  $\hat{x}$ , dessen Observable  $x$  den Ort misst.

Der Ortsoperator operiert auf der Wellenfunktion  $\psi(x)$  und ergebe per definitionem

$$\hat{x}\psi(x) := x\psi(x) \text{ , wobei } x\psi(x) \text{ wieder eine Wellenfunktion ist.}$$

Die Wellenfunktion soll als Vektor dargestellt werden. Sie ordnet jedem  $x$  aus einem gewissen Intervall  $[0, b]$  ein Funktionswert  $\psi(x)$  zu.

Man unterteilt dazu das Intervall  $[0, b]$  der  $x$ -Achse in  $n$  gleich große Teilintervalle, die alle die Länge  $\epsilon$  haben und erhält so  $n+1$  Punkte der Grenzen der Teilintervalle:



Zunächst wird die Funktion an diesen Stellen angegeben, die mit kleinerem  $\epsilon$  beliebig verfeinert werden kann:  $\psi: x_0 \rightarrow \psi(x_0), x_1 \rightarrow \psi(x_1), \dots, x_n \rightarrow \psi(x_n)$ .

$$\psi(x) \doteq \begin{pmatrix} \psi(x_0) \\ \psi(x_1) \\ \vdots \\ \psi(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi(\epsilon) \\ \vdots \\ \psi(n\epsilon) \end{pmatrix}$$

Der Operator wird dann dargestellt als eine  $(n+1)$ ,  $(n+1)$ -Matrix:

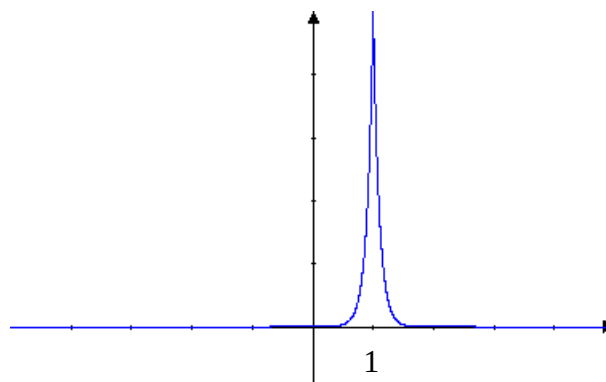
$$\begin{pmatrix} x_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & x_1 & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & n\epsilon \end{pmatrix}, \text{ die au\sserhalb der Hauptdiagonalen lauter Nullen hat.}$$

$$\hat{x}\psi(x) \doteq \begin{pmatrix} x_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & x_1 & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & x_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi(x_0) \\ \psi(x_1) \\ \vdots \\ \psi(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0\psi(x_0) \\ x_1\psi(x_1) \\ \vdots \\ x_n\psi(x_n) \end{pmatrix} \text{ oder}$$

$$\hat{x}\psi(x) \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & n\epsilon \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi(\epsilon) \\ \vdots \\ \psi(n\epsilon) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\psi(0) \\ \epsilon\psi(\epsilon) \\ \vdots \\ n\epsilon\psi(n\epsilon) \end{pmatrix}$$

Ein Eigenvektor von  $\hat{x}$  ist  $\psi_{x_0}(x) := \delta(x - x_0)$ . Dabei ist  $\delta(x - x_0) = \begin{cases} \infty; & x = x_0 \\ 0; & x \neq x_0 \end{cases}$ , wenn man

es nicht zu genau nimmt. Bspw. ist die Deltafunktion verstehbar als Grenzwert  $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{2\alpha} e^{-\frac{|x-x_0|}{\alpha}}$



$$\delta(x-1) \approx 5e^{-10|x-1|} \quad \alpha=0,1$$

(Für eine in  $x_0$  stetige Funktion  $f$  gilt dann  $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-x_0) dx = f(x_0)$  ).

$$(x-x_0)\delta(x-x_0)=0 \text{ bzw. } x\delta(x)=0, \text{ da } x\delta(x)=\begin{cases} x \cdot \infty; x=0 \\ x \cdot 0; x \neq 0 \end{cases} = \begin{cases} 0 \cdot \infty; x=0 \\ 0; x \neq 0 \end{cases} = 0, \text{ insofern}$$

das Unendlich domestiziert ist, und das ist es, durch die Bedingung  $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$  d.h.  $0 \cdot \infty = 0$  .

Man kann  $x\delta(x)=0$  auch durch den Grenzwert  $x\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{x}{2\alpha} e^{-\frac{|x|}{\alpha}}$  erkennen. Für  $x \neq 0$  ist es klar. Für  $x=0$ :  $\frac{0}{2\alpha} = 0$  und  $e^{-\frac{|x|}{\alpha}} \rightarrow 0$  , also  $x\delta(x)=0$  .

Also ist  $(x-x_0)\delta(x-x_0)=0$  oder  $x\delta(x-x_0)=x_0\delta(x-x_0)$  (\*)

Mit  $\psi_{x_0}(x) := \delta(x-x_0)$  gilt dann  $\hat{x}\psi_{x_0}(x) := x\psi_{x_0}(x) := x\delta(x-x_0) \stackrel{(*)}{=} x_0\delta(x-x_0) = x_0\psi_{x_0}(x)$  .

Damit ist  $\psi_{x_0}(x)$  Eigenvektor von  $\hat{x}$  mit dem Eigenwert  $x_0$  .

Die darstellende Matrix von  $\hat{x}$  ist  $\begin{pmatrix} x_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & x_1 & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & n\epsilon \end{pmatrix}$  und wie man sieht

hermitesch, also ist der Ortsoperator  $\hat{x}$  selbstadjungiert.

Sei nun allgemein ein n-dimensionaler Hilbertraum gegeben mit selbstadjungierten Operatoren (hermiteschen Matrizen).

(1) Sind  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  zwei verschiedene Eigenwerte zum Operator  $\hat{O}$  , dann sind die zugehörigen Eigenvektoren orthogonal.

Denn:  $\hat{O}|x_1\rangle = \lambda_1|x_1\rangle$  und  $\hat{O}|x_2\rangle = \lambda_2|x_2\rangle$  . Die erste Gleichung kann über die duale

Korrespondenz geschrieben werden als  $\langle x_1|\hat{O}^\dagger = \langle x_1|\lambda_1^*$  und da  $\hat{O}$  selbstadjungiert ist  $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$  und da die Eigenwerte reell ist  $\lambda_1^* = \lambda_1$  , sodass die erste Gleichung wird:

$$\langle x_1|\hat{O} = \langle x_1|\lambda_1$$

Bildet man das innere Produkt der ersten Gleichung mit  $|x_2\rangle$  ergibt das  $\langle x_1|\hat{O}|x_2\rangle = \lambda_1\langle x_1|x_2\rangle$

und mit der zweiten Gleichung das innere Produkt mit  $\langle x_1|$  :  $\langle x_1|\hat{O}|x_2\rangle = \lambda_2\langle x_1|x_2\rangle$  .

Da die linken Seiten gleich sind, müssen es auch die rechten sein:  $\lambda_1\langle x_1|x_2\rangle = \lambda_2\langle x_1|x_2\rangle$  und das heißt  $(\lambda_1 - \lambda_2)\langle x_1|x_2\rangle = 0$  und da  $\lambda_1 \neq \lambda_2 \Rightarrow \langle x_1|x_2\rangle = 0$  .

(2) Seien nun zwei Eigenwerte  $\lambda_1 = \lambda_2 =: \lambda$  gleich mit verschiedenen Eigenvektoren:

$\hat{O}|x_1\rangle = \lambda|x_1\rangle$  und  $\hat{O}|x_2\rangle = \lambda|x_2\rangle$ .  $|\psi\rangle = \alpha|x_1\rangle + \beta|x_2\rangle$  ist auch Eigenvektor zu  $\hat{O}$ :

$\hat{O}|\psi\rangle = \hat{O}(\alpha|x_1\rangle + \beta|x_2\rangle) = \alpha\hat{O}|x_1\rangle + \beta\hat{O}|x_2\rangle = \alpha\lambda|x_1\rangle + \beta\lambda|x_2\rangle = \lambda|\psi\rangle$ . Da  $|x_1\rangle, |x_2\rangle$  linear

unabhängig sind, können sie über das Gram-Schmidt Verfahren orthonormalisiert werden:

Seien  $u, v$  l.u.  $x := \frac{u}{\|u\|}$   $y := v - \langle x|v\rangle x$ .  $x, y$  sind orthogonal, da

$\langle x|y\rangle = \langle x|(v - \langle x|v\rangle x)\rangle = \langle x|v\rangle - \langle x|v\rangle \underbrace{\langle x|x\rangle}_1 = 0$ . Wird noch  $y$  normiert, dann sind beide

orthonormal und sowohl das  $|x\rangle$  als auch das normierte  $\frac{|y\rangle}{\|y\|}$  sind LK von  $u, v$ .

Also sind die orthonormalisierten  $|x_1\rangle, |x_2\rangle$  wieder Eigenvektoren zu  $\lambda$ .

Die gleiche Argumentation gilt für drei oder mehr Eigenvektoren gleicher Eigenwerte.

(3) Sei nun  $\hat{O}|x\rangle = \lambda|x\rangle$  bzw. mit dem Identitätsoperator  $\hat{I}$ :  $(\hat{O} - \lambda\hat{I})|x\rangle = |0\rangle$  die Eigenwertgleichung für den Operator  $\hat{O}$ , so muss wegen  $|x\rangle \neq |0\rangle$  die Determinante

$\det(\hat{O} - \lambda\hat{I}) = 0$  sein. Das ist ein Polynom in  $\lambda$  vom Grad  $n$  (das charakteristische Polynom),

das nach dem Hauptsatz der Algebra  $n$  Lösungen (eventuell mehrfache) für  $\lambda$  hat. Die  $n$  Eigenvektoren können also nach den Bemerkungen (1) und (2) orthonormalisiert werden und bilden daher eine Orthonormalbasis des Vektorraums  $\mathcal{H}$ .

Das ist das **Fundamentaltheorem**.

Es sollen die **Prinzipien** (zunächst vier) der Quantenmechanik formuliert werden.

**Prinzip 1:** Die Observable  $O$ , die messbare Größe, wird durch einen linearen Operator  $\hat{O}$  repräsentiert.

**Bsp:** die Observablen  $s_x, s_y, s_z$  der Komponenten des Spins werden durch die Spinoperatoren

$$\hat{s}_x \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

die durch ihre Matrizen dargestellt

wurden repräsentiert.

**Prinzip 2:** Die möglichen Ergebnisse einer Messung einer Observablen  $O$  werden durch die Eigenwerte  $\lambda$  des zugehörigen Operators  $\hat{O}$  angegeben:  $\hat{O}|x\rangle = \lambda|x\rangle$ . Wenn das System im Eigenzustand  $|x\rangle$  ist, so ist das Messergebnis mit Sicherheit  $\lambda$ .

**Bsp:** Ist die Observable  $s_z$  die z-Komponente des Spins, so hat die Eigenwertgleichung

$$\hat{s}_z|x\rangle = \lambda|x\rangle \quad \text{die Eigenwerte} \quad \pm \frac{\hbar}{2} \quad \text{und die Eigenzustände} \quad |x\rangle=|u\rangle \quad \text{bzw.} \quad |x\rangle=|d\rangle .$$

Ist das System im Zustand  $|d\rangle$ , so ergibt die Messung mit Sicherheit  $-\frac{\hbar}{2}$ .

**Prinzip 3:** Verschiedene Eigenzustände werden durch orthogonale Vektoren repräsentiert.

**Bsp:**  $|u\rangle, |d\rangle$  sind orthogonal:  $\langle u|d\rangle=0$ , aber  $|u\rangle, |r\rangle$  sind es nicht, denn

mit dem „reinen“ Zustand „rechts“:  $|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$ , der kein Eigenzustand von  $\hat{s}_z$  ist, ergibt das innere Produkt  $\langle u|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \neq 0$ .

**Prinzip 4:** Befindet sich ein System in dem Zustand  $|z\rangle$  und wird die Observable O gemessen mit  $\hat{O}|x\rangle = \lambda|x\rangle$ , dann ist die Wahrscheinlichkeit  $P_z$ , den Eigenwert  $\lambda$  zu messen

$$P_z(\lambda) = \langle x|z\rangle \langle z|x\rangle = |\langle x|z\rangle|^2$$

**Bsp:** Der Spin sei im Zustand  $|r\rangle$  mit  $|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$ . Die Observable sei  $s_z$ , die den Spin längs der z-Achse misst:  $\hat{s}_z|d\rangle = -\frac{\hbar}{2}|d\rangle$ .  $P_r(-\frac{\hbar}{2}) = \langle d|r\rangle \langle r|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}$ .

Es sollen jetzt noch die Spinoperatoren bzw. ihre Darstellungen in der Basis  $|u\rangle, |d\rangle$  aufgebaut werden. Zunächst  $\hat{s}_z$ .

Wie bereits gezeigt, hat  $\hat{s}_z$  die Eigenwerte  $\pm \frac{\hbar}{2}$  mit den Eigenzuständen  $|u\rangle$  bzw.  $|d\rangle$  mit den Gleichungen  $\hat{s}_z|u\rangle = \frac{\hbar}{2}|u\rangle$  und  $\hat{s}_z|d\rangle = -\frac{\hbar}{2}|d\rangle$  oder in der genannten Darstellung:

$$\begin{pmatrix} \hat{s}_{z11} & \hat{s}_{z12} \\ \hat{s}_{z21} & \hat{s}_{z22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} \hat{s}_{z11} & \hat{s}_{z12} \\ \hat{s}_{z21} & \hat{s}_{z22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{was die folgenden vier Gleichungen}$$

erzeugt:  $\hat{s}_{z11} = \frac{\hbar}{2}$ ,  $\hat{s}_{z21} = 0$ ,  $\hat{s}_{z12} = 0$  und  $\hat{s}_{z22} = -\frac{\hbar}{2}$  und damit hat man

$$\begin{pmatrix} \hat{s}_{z11} & \hat{s}_{z12} \\ \hat{s}_{z21} & \hat{s}_{z22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Nun zum Operator  $\hat{s}_x$ :



$\hat{s}_x|r\rangle = \frac{\hbar}{2}|r\rangle$  und  $\hat{s}_x|l\rangle = -\frac{\hbar}{2}|l\rangle$  oder in der Darstellung:

$$\begin{pmatrix} \hat{s}_{x11} & \hat{s}_{x12} \\ \hat{s}_{x21} & \hat{s}_{x22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} \hat{s}_{x11} & \hat{s}_{x12} \\ \hat{s}_{x21} & \hat{s}_{x22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$(1) \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{x11} + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{x12} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{2} \quad (2) \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{x21} + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{x22} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{2} \quad (3) \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{x11} - \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{x12} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{2}$$

$$(4) \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{x21} - \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{x22} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{2} .$$

Die erste und dritte Gleichung addiert ergibt  $\frac{2}{\sqrt{2}}\hat{s}_{x11} = 0 \Rightarrow \hat{s}_{x11} = 0$  und daraus folgt für die dritte Gleichung  $\hat{s}_{x12} = \frac{\hbar}{2}$  .

Die zweite und vierte Gleichung addiert ergibt:  $\hat{s}_{x21} = \frac{\hbar}{2}$  und damit in die vierte Gleichung

$$\frac{-1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{x22} = 0 \Rightarrow \hat{s}_{x22} = 0 . \text{ Also ist } \begin{pmatrix} \hat{s}_{x11} & \hat{s}_{x12} \\ \hat{s}_{x21} & \hat{s}_{x22} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

Zuletzt noch zu  $\hat{s}_y$  :

$$\hat{s}_y|i\rangle = \frac{\hbar}{2}|i\rangle \quad \text{und} \quad \hat{s}_y|o\rangle = -\frac{\hbar}{2}|o\rangle$$

$$\begin{pmatrix} \hat{s}_{y11} & \hat{s}_{y12} \\ \hat{s}_{y21} & \hat{s}_{y22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} \hat{s}_{y11} & \hat{s}_{y12} \\ \hat{s}_{y21} & \hat{s}_{y22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} .$$

$$(1) \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{y11} + \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{s}_{y12} = \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (2) \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{y21} + \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{s}_{y22} = \frac{\hbar}{2}\frac{i}{\sqrt{2}} \quad (3) \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{y11} - \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{s}_{y12} = -\frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$(4) \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{s}_{y21} - \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{s}_{y22} = \frac{\hbar}{2}\frac{i}{\sqrt{2}}$$

(1)+(3):  $\hat{s}_{y11} = 0$  in (3):  $\hat{s}_{y12} = -i\frac{\hbar}{2}$  (2)+(4):  $\hat{s}_{y21} = i\frac{\hbar}{2}$  in (4):  $\hat{s}_{y22} = 0$  und damit

$$\begin{pmatrix} \hat{s}_{y11} & \hat{s}_{y12} \\ \hat{s}_{y21} & \hat{s}_{y22} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} .$$

Im Beispiel von Prinzip 4 wurde die Wahrscheinlichkeit für die Messung von Spin-down (d.h. für den Wert  $-\frac{\hbar}{2}$ ) angegeben, falls der Spin nach rechts zeigt, und der SG-Apparat wieder in z-Richtung gedreht wird:

$$P_r(-\frac{\hbar}{2}) = \langle d|r \rangle \langle r|d \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} .$$

Das gleiche Ergebnis erhält man für Spin-up:

$$P_r(\frac{\hbar}{2}) = \langle u|r \rangle \langle r|u \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} .$$

Der Erwartungswert  $\mu_r(s_z)$  für die Zufallsvariable  $s_z$  mit ihren Werten  $\pm \frac{\hbar}{2}$  ist für den Fall, dass der Spin nach rechts zeigt:

$$\mu = \frac{\hbar}{2} \cdot P_r(\frac{\hbar}{2}) + (-\frac{\hbar}{2}) \cdot P_r(-\frac{\hbar}{2}) = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{2} + \frac{1}{2} (-\frac{\hbar}{2}) = 0 .$$

Klassisch hätte man damit gerechnet, den Wert 0 für jede derartige Messung zu erhalten, was quantenmechanisch jedoch nur als Mittelwert zutrifft.

Allgemein ist der Erwartungswert  $\mu_{|z\rangle}(\hat{O})$  für eine Observable O bzw. für ihren Operator  $\hat{O}$  die Summe der mit den Wahrscheinlichkeiten gewichteten Eigenwerte. Sind also  $\lambda_i$  die Eigenwerte des Operators  $\hat{O}$  und  $|x_i\rangle$  die zugehörigen Eigenvektoren und ist das System im Zustand  $|z\rangle$ ,

dann ist der Erwartungswert für den Operator  $\hat{O}$  :

$$\mu_{|z\rangle}(\hat{O}) = \sum_i \lambda_i P_{|z\rangle}(\lambda_i) =: \langle \hat{O} \rangle_z .$$

Es gilt mit Hilfe der Basis aus Eigenvektoren von  $\hat{O}$  :  $|z\rangle = \sum_i \xi_i |x_i\rangle$ , dann ist

$$\hat{O}|z\rangle = \sum_i \xi_i \hat{O}|x_i\rangle = \sum_i \xi_i \lambda_i |x_i\rangle .$$

Wendet man nun den Bra-Vektor  $\langle z| = \sum_i \langle x_i| \xi_i^*$  auf die

Gleichung an, ergibt das:

$$\langle z|\hat{O}|z\rangle = \sum_i \langle x_i|\xi_i^* \left( \sum_j \xi_j \lambda_j |x_j\rangle \right) = \sum_i \lambda_i \xi_i^* \xi_i \stackrel{\text{Prinzip 4}}{=} \sum_i \lambda_i P_{|z\rangle}(\lambda_i) = \langle \hat{O} \rangle_z .$$

Der Erwartungswert für  $\hat{O}$ , falls das System im Zustand  $|z\rangle$  ist, beträgt  $\langle \hat{O} \rangle_z = \langle z|\hat{O}|z\rangle$ .

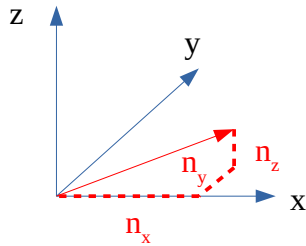
**Beispiel:** Sei das System im Zustand spin up. Dreht man den SG-Apparat in y-Richtung und will die Observable  $s_y$  messen, wird ihr Erwartungswert  $\langle \hat{s}_y \rangle_u$  folgender sein:

$$\langle u|\hat{s}_y|u\rangle : \hat{s}_y|u\rangle \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} \quad \text{mit } \langle u| = (1, 0) :$$

$$\langle u|\hat{s}_y|u\rangle \doteq \frac{\hbar}{2} (1, 0) \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} = 0 .$$

Wie sehen die Operatoren  $\hat{s}_n$  für die Observablen des Spins bezüglich einer beliebigen

Raumrichtung aus, die durch den Einheitsvektor  $\hat{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}$  beschrieben sei ?



Zunächst muss man sich vergegenwärtigen, dass die hermiteschen komplexen  $2 \times 2$ -Matrizen auch einen vierdimensionalen  $\mathbb{R}$ -Vektorraum bilden. Das bedeutet, dass man die Matrix des gesuchten Operators als LK der Basismatrizen darstellen kann.

Nimmt man zu den drei Paulimatrizen noch die Einheitsmatrix hinzu, so hat man damit Basismatrizen, die den Vektorraum aufspannen.

$$\alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$(1) \quad \alpha + \delta = 0 \quad (2) \quad \beta - i\gamma = 0 \quad (3) \quad \beta + i\gamma = 0 \quad (4) \quad \alpha - \delta = 0$$

$$(1) + (4): \quad \alpha = 0 \quad \stackrel{(4)}{\Rightarrow} \delta = 0 \quad (2) + (3): \quad \beta = 0 \stackrel{(3)}{\Rightarrow} \gamma = 0 \quad .$$

Damit sind die vier Matrizen l.u.

Sei erzeugen auch jede Matrix (Vektor) des angegebenen Vektorraums:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\alpha = \frac{1}{2}(a+d) \quad \beta = \frac{1}{2}(b+c) \quad \gamma = \frac{i}{2}(b-c) \quad \delta = \frac{1}{2}(a-d)$$

Die Paulimatrizen einschließlich der Einheitsmatrix bilden also eine Basis des vierdimensionalen  $\mathbb{C}$ -Vektorraums der komplexen  $(2 \times 2)$ -Matrizen.

Ist  $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$  hermitesch, sind  $a$  und  $d$  reell und  $c = b^*$ .

Demnach sind auch  $\alpha$  und  $\delta$  reell. Ist  $b = x + iy$  mit  $x, y \in \mathbb{R}$ , dann ist  $c = x - iy$  und also

$$\beta = \frac{1}{2}(x + iy + x - iy) = x \in \mathbb{R} \quad \text{und} \quad \gamma = \frac{i}{2}(b - c) = \frac{i}{2}(x + iy - (x - iy)) = i^2 y = -y \in \mathbb{R}$$

Also bilden sie eine Basis des reellen Vektorraums der komplexen hermiteschen  $(2 \times 2)$ -Matrizen.

Das bedeutet, dass sich die hermitesche Matrix  $\sigma_n$  des gesuchten Operators  $\hat{s}_n$  in dieser Weise darstellen lässt:

$$\sigma_n = \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Für  $\hat{n} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$  erhält man  $\sigma_x = 0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + 1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + 0 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + 0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Für  $\hat{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  :  $\sigma_y = 0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + 0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + 1 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + 0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Für  $\hat{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  :  $\sigma_z = 0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + 0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + 0 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + 1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Die Einheitsmatrix scheint überflüssig zu sein.

Ansatz: Für  $\hat{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}$  :  $\sigma_n = n_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + n_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + n_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix}$

Wie man sieht ist diese Matrix hermitesch.

In der Tat lässt sich jede hermitesche 2x2-Matrix, für die  $a+d=0$  ist, also die spurfrei ist, aus den drei Paulimatrizen eindeutig erzeugen. Die Koeffizienten bleiben dabei aber reell:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & -a \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(b+c) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{i}{2}(b-c) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + a \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \text{ Diese Matrizen bilden einen}$$

dreidimensionalen Unterraum mit den drei Paulimatrizen als Basis.

Die Frage ist noch, ob alle Spinmatrizen diese Form  $\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & -a \end{pmatrix}$  haben, ob sie *spurfrei* sein müssen.

Das ergibt sich aus folgender Überlegung:

Sei  $\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & d \end{pmatrix}$  eine Spinmatrix, deren Eigenwerte  $\pm 1$  sind gemäß der Messungen.

Sei  $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$  der Eigenvektor zum Eigenwert 1 und  $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$  der Eigenvektor zum Eigenwert -1.

Dann gilt  $\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Leftrightarrow (1) \ ax+by=x$  und  $(2) \ b^*x+dy=y$  oder

$by=(1-a)x$  und  $(1-d)y=b^*x$  . Die Division der beiden Gleichungen ergibt  $\frac{b}{1-d} = \frac{1-a}{b^*}$  oder  $bb^*=(1-a)(1-d)$  . (\*). Die andere Eigenvektorgleichung ist

$$\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u \\ -v \end{pmatrix} \Leftrightarrow (1) \ au+bv=-u$$
 und  $(2) \ b^*u+dv=-v$  oder

$(a+1)u=-bv$  und  $b^*u=(-d-1)v$  . Die Division der beiden Gleichungen ergibt  $\frac{a+1}{b^*} = \frac{b}{d+1}$

oder  $bb^* = (a+1)(d+1)$  (\*\*). Gleichsetzung von (\*) und (\*\*) ergibt:

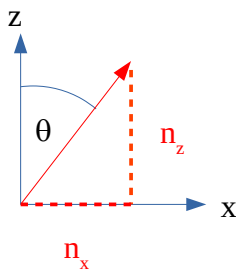
$$(1-a)(1-d) = (a+1)(d+1) \Leftrightarrow 1+ad - a - d = 1+ad+a+d \Leftrightarrow 2(a+d) = 0 \Leftrightarrow a+d=0$$

und damit ist gezeigt, dass die Spinmatrizen spurfrei sein müssen und demnach die drei Paulimatrizen Basis aller Spinmatrizen (mit Spinquantenzahl  $\frac{1}{2}$ ) sind. Also können die Spinmatrizen als dreidimensionale Vektoren aufgefasst werden, deren Komponenten die Koeffizienten der LK aus den Paulimatrizen sind.

Woher weiß man nun aber, dass die Koeffizienten die Koordinaten des Raumvektors sind, der die Richtung des SG-Apparates angibt?

Für die Koordinatenachsen ist es schon gezeigt. Der obige Ansatz soll durch das nächste Beispiel und den allgemeinen Fall überprüft werden. Es wird sich zeigen, dass der Ansatz voll mit der Empirie zur Deckung kommt.

**Beispiel 1:** Die Richtung des SG-Apparats liege in der x,z-Ebene und bilde einen Winkel  $\theta$  mit der z-Achse.



Dann gilt:  $n_x = \sin \theta$  ,  $n_z = \cos \theta$  ,  $n_y = 0$  Also

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

Um die Eigenwerte zu berechnen, wird die Determinante von  $\sigma_n - \lambda E$  Null gesetzt, da der Eigenvektor nicht Nullvektor sein kann.

$$0 = \det(\sigma_n - \lambda E) = \begin{vmatrix} \cos \theta - \lambda & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta - \lambda \end{vmatrix} \Rightarrow -(\cos \theta - \lambda)(\cos \theta - \lambda) - \sin^2 \theta = 0 \Rightarrow \lambda = \pm 1$$

Für  $\lambda = 1$ :  $\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow$  (1)  $x \cos \theta + y \sin \theta = x$  (2)  $x \sin \theta - y \cos \theta = y$

(1) mit x multipliziert: (3)  $x^2 = x^2 \cos \theta + xy \sin \theta$  und

(2) mit y multipliziert: (4)  $y^2 = -y^2 \cos \theta + xy \sin \theta$

Da der Eigenvektor normiert ist, gilt  $1 = x^2 + y^2 \stackrel{(3)+(4)}{=} (x^2 - y^2) \cos \theta + 2xy \sin \theta \stackrel{(2)}{=}$

$$= (x^2 - y^2) \cos \theta + 2y \cdot y \cdot \underbrace{1}_{1} \cos \theta = \underbrace{(x^2 + y^2)}_1 \cos \theta + 2y^2 = \cos \theta + 2y^2 = 1 \Rightarrow y = \sqrt{\frac{1 - \cos \theta}{2}} = \sin \frac{\theta}{2}$$

$$x^2 = 1 - y^2 = 1 - \left( \frac{1 - \cos \theta}{2} \right) = \frac{1 + \cos \theta}{2} \Rightarrow x = \sqrt{\frac{1 + \cos \theta}{2}} = \cos \frac{\theta}{2} \Rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \text{ der Eigenvektor zu}$$

$$\lambda = 1 \text{ .}$$

Für  $\lambda = -1$  : Da die beiden Eigenvektoren orthogonal sein müssen, ist  $\begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$  der

zugehörige Eigenvektor, was auch die analoge Rechnung ergibt.

Da der statistische Mittelwert für die Messergebnisse in dieser Richtung  $\hat{n}$  sich zu  $\cos \theta$  ergeben hat (was man auch bei jeder Messung klassisch erwarten würde), berechnet man zur Überprüfung des Ansatzes den Erwartungswert  $\langle u | \sigma_n | u \rangle$  für dieses  $\sigma_n$  .

$$\sigma_n |u\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \Rightarrow \langle u | \sigma_n | u \rangle = (1, 0) \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} = \cos \theta \text{ , was erfreulicherweise}$$

mit der Empirie übereinstimmt.

Wie groß ist nun die Wahrscheinlichkeit für  $\lambda = \lambda_1 = 1$  , wenn der Spin im Zustand up war und jetzt entlang der Richtung  $\hat{n}$  gemessen wird ?

Der Eigenvektor dazu ist  $|\lambda_1\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |u\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |d\rangle$

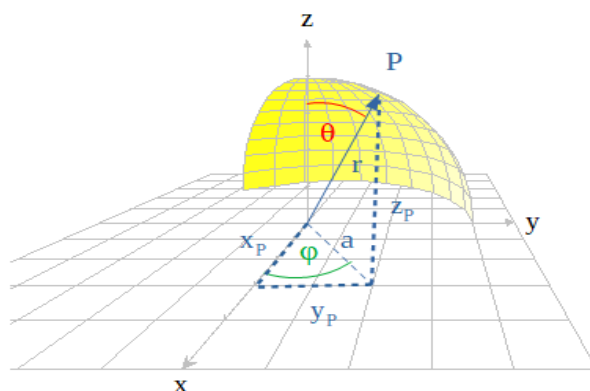
$$P_u(1) = \langle u | \lambda_1 \rangle \langle \lambda_1 | u \rangle = \cos \frac{\theta}{2} \cdot \cos \frac{\theta}{2} = \cos^2 \frac{\theta}{2}$$

Für  $\lambda = \lambda_2 = -1$  mit Eigenvektor  $|\lambda_2\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} |u\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |d\rangle$

$$P_u(-1) = \langle u | \lambda_2 \rangle \langle \lambda_2 | u \rangle = -\sin \frac{\theta}{2} \cdot -\sin \frac{\theta}{2} = \sin^2 \frac{\theta}{2} \text{ .}$$

Beide Wahrscheinlichkeiten ergeben zusammen 1.

## Beispiel 2: Sphärische Koordinaten und allgemeiner Fall



$$a = r \sin \theta$$

$$x_P = a \cos \varphi$$

$$y_P = a \sin \varphi$$

$$z_P = r \cos \theta$$

$$\begin{aligned}x_p &= r \sin \theta \cos \varphi \\y_p &= r \sin \theta \sin \varphi \\z_p &= r \cos \theta\end{aligned}$$

Die Richtung der Messung sei  $\hat{n} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}$

und die der Präparation entlang der z-Achse.

Die Spinmatrix zu dieser Richtung  $\hat{n}$  ist

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \cos \varphi - i \sin \theta \sin \varphi \\ \sin \theta \cos \varphi + i \sin \theta \sin \varphi & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

Berechnung der Eigenwerte  $\lambda$  :

$$\sigma_n |x\rangle = \lambda |x\rangle \Leftrightarrow (\sigma_n - \lambda E) |x\rangle = |0\rangle \stackrel{|x\rangle \neq |0\rangle}{\Rightarrow} \det(\sigma_n - \lambda E) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\det \begin{pmatrix} \cos \theta - \lambda & \sin \theta \cos \varphi - i \sin \theta \sin \varphi \\ \sin \theta \cos \varphi + i \sin \theta \sin \varphi & -\cos \theta - \lambda \end{pmatrix} = 0 \Leftrightarrow$$

$$-(\cos \theta - \lambda)(\cos \theta + \lambda) - (\sin \theta \cos \varphi - i \sin \theta \sin \varphi)(\sin \theta \cos \varphi + i \sin \theta \sin \varphi) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\lambda^2 - \cos^2 \theta - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - i \sin^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi + i \sin^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi - \sin^2 \theta \sin^2 \varphi = 0 \Leftrightarrow$$

$$\lambda^2 - (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 = 1 \Leftrightarrow \lambda = \pm 1$$

Eigenvektor zu  $\lambda = 1 =: \lambda_1$  :

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \cos \varphi - i \sin \theta \sin \varphi \\ \sin \theta \cos \varphi + i \sin \theta \sin \varphi & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Leftrightarrow$$

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Leftrightarrow$$

$$(1) \quad x \cos \theta + y \sin \theta e^{-i\varphi} = x \Rightarrow x(1 - \cos \theta) = y \sin \theta e^{-i\varphi} \Rightarrow x = y \sin \theta \frac{e^{-i\varphi}}{1 - \cos \theta}$$

$$(2) \quad x \sin \theta e^{i\varphi} - y \cos \theta = y \Rightarrow y(1 + \cos \theta) = x \sin \theta e^{i\varphi} \Rightarrow y = x \sin \theta \frac{e^{i\varphi}}{1 + \cos \theta}$$

$$(2) : (1) \text{ und mit } xy \text{ multipliziert: } y^2 = x^2 e^{2i\varphi} \frac{1 - \cos \theta}{1 + \cos \theta} = e^{2i\varphi} \tan^2 \frac{\theta}{2} \Rightarrow y = x e^{i\varphi} \tan \frac{\theta}{2} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ x e^{i\varphi} \tan \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \tan \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \text{ Die Norm von } \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \tan \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \text{ ist}$$

$$\sqrt{1 \cdot 1 + e^{i\varphi} \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \tan \frac{\theta}{2}} = \sqrt{1 + \tan^2 \frac{\theta}{2}} = \frac{1}{\cos \frac{\theta}{2}} . \text{ Also ist } \cos \frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \tan \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

der Eigenvektor zu  $\lambda_1 = 1$  .

Da der andere Eigenvektor orthogonal sein muss, ergibt sich für  $\lambda_2 = -1$  der Eigenvektor zu

$$\begin{pmatrix} e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} .$$

Der Erwartungswert  $\langle \sigma_n \rangle_u = \langle u | \sigma_n | u \rangle$  :  $\sigma_n | u \rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta e^{i\varphi} \end{pmatrix} \Rightarrow$

$$\langle u | \sigma_n | u \rangle = (1, 0) \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \cos \theta , \text{ was mit den Messungen übereinstimmt.}$$

Der erste Eigenvektor ist  $|\lambda_1\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |u\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |d\rangle$  und die Wahrscheinlichkeit, dass der Eigenwert  $\lambda_1 = 1$  gemessen wird ist

$$P_u(1) = \langle u | \lambda_1 \rangle \langle \lambda_1 | u \rangle = \cos \frac{\theta}{2} \cdot \cos \frac{\theta}{2} = \cos^2 \frac{\theta}{2} .$$

Der zweite Eigenvektor  $|\lambda_2\rangle = e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |u\rangle - \cos \frac{\theta}{2} |d\rangle$  ; die Wahrscheinlichkeit, dass der zweite Eigenwert -1 gemessen wird ist

$$P_u(-1) = \langle u | \lambda_2 \rangle \langle \lambda_2 | u \rangle = e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} = \sin^2 \frac{\theta}{2} .$$

Das war der allgemeine Fall, da das Koordinatensystem immer so gewählt werden kann, dass die Richtung der Präparation mit der z-Achse zusammenfällt.

Demnach sind die Koordinaten einer beliebigen Spinmatrix  $\sigma_n$  in der LK aus den Paulimatrizen

die Raumkoordinaten der Richtung  $\hat{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}$  des SG-Apparates:  $\sigma_n = \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix} .$

Zu beachten bleibt, dass ein rechtwinkliges kartesisches Koordinatensystem zugrunde gelegt wurde.

Die Spinmatrizen  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  sind sogar orthogonal zueinander, wenn man das Frobenius-Skalarprodukt verwendet:



Sind  $A=(a_{ij})$  und  $B=(b_{ij})$  die beiden komplexen quadratischen Matrizen, so ist

$$\langle A, B \rangle_F := \sum_{i,j} a_{ij}^* b_{ij} \text{ das Frobenius-Skalarprodukt.}$$

$$\langle \sigma_x, \sigma_y \rangle_F = \left\langle \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right\rangle_F = 0^* \cdot 0 + 1^* \cdot (-i) + 1^* \cdot i + 0^* \cdot 0 = 0$$

$$\langle \sigma_y, \sigma_x \rangle_F = \left\langle \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle_F = 0^* \cdot 0 + (-i)^* \cdot 1 + i^* \cdot 1 + 0^* \cdot 0 = 0 + i \cdot 1 + (-i) \cdot 1 + 0 = 0$$

$$\langle \sigma_x, \sigma_z \rangle_F = \left\langle \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\rangle_F = 0 \cdot 1 + 1 \cdot 0 + 1 \cdot 0 + 0 \cdot (-1) = 0 = \langle \sigma_z, \sigma_x \rangle_F$$

$$\langle \sigma_y, \sigma_z \rangle_F = \left\langle \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\rangle_F = 0 \cdot 1 + i \cdot 0 + (-i) \cdot 0 + 0 \cdot (-1) = 0 = \langle \sigma_z, \sigma_y \rangle_F$$

Jede Spinmatrix hat also in dem dreidimensionalen Untervektorraum die Vektordarstellung

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}_{\{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}} \text{ bzgl. der Basis } \{ \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z \}. \text{ Man beachte, dass der gleichnamige Vektor}$$

$$\hat{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}_{\{e_x, e_y, e_z\}} \text{ ein anderer Vektor ist, der einen Raumvektor im Vektorraum } \mathbb{R}^3 \text{ darstellt.}$$

Was hat es mit den Matrizen  $\sigma_n$  als Vektoren auf sich?  $\sigma_n$  ist ein Objekt des dreidimensionalen Vektorraums der spurfreien hermiteschen Matrizen, also ein Vektor dieses Vektorraums, ebenso natürlich speziell  $\sigma_x, \sigma_y$  und  $\sigma_z$ , die Basisvektoren dieses Vektorraums sind. Diese Vektoren haben also drei Komponenten, wenn man sie als LK der Basisvektoren ausdrückt, nämlich die

$$\text{Koeffizienten dieser LK. So ist } \sigma_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und } \sigma_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ und } \sigma_n = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} \text{ im}$$

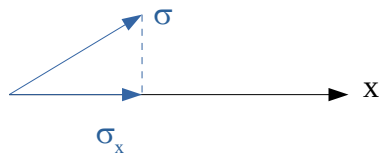
angegebenen Matrizenraum (Vektorraum).

Dann ist es üblich  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \dots, \sigma_n$  *Spinkomponenten* zu nennen, die in die indizierten Richtungen zeigen. Aber Komponenten wovon? Von einem Superspin? Man schreibt etwa

$$\sigma_n = \vec{\sigma} \cdot \hat{n} = n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z \quad ^{20} \text{ Soll } \vec{\sigma} = (\sigma_x \ \sigma_y \ \sigma_z) \text{ oder } \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \text{ sein?}$$

Ich glaube hier liegt ein Missverständnis vor! Natürlich gibt es die Analogie zum klassischen Drehimpuls  $L=(L_x, L_y, L_z)$  sogar mit den unten gleich zu beschreibenden

Kommutatorrelationen. Hat der Spin denn Raumkomponenten? Dann sollte man doch Folgendes meinen:



$\sigma_x$  wäre dann die x-Komponente von  $\sigma$ . Misst man aber  $\sigma$  entlang der x-Achse, so erhält man zuweilen auch  $-\sigma_x$ , d.h. genauer  $|l\rangle$  bzw. noch genauer den Eigenwert  $-1 \left(-\frac{\hbar}{2}\right)$  und nicht 1 bzw.  $|r\rangle$ , wie man doch erwarten sollte.

Die klassische Vorstellung des Drehimpulses als räumlicher Vektor wird in die QM hinüber gerettet.

Der Spin wird erst durch die Messung in eine Richtung durch den Messapparat erzeugt<sup>21</sup>. Er selbst hat keine Raumkomponenten. Daher kann man sie auch nicht gleichzeitig messen<sup>22</sup>.

Wird der Spin zuerst bspw. in z-Richtung gemessen, hat er also die Messwerte 1 bzw. -1, bzw. die Zustände  $|u\rangle$  bzw.  $|d\rangle$  durch die Messung erhalten, so wird das System diese Messung (diesen Zustand) erinnern.

Denn eine erneute Messung bspw. in einer Apparat-Rotation von  $45^\circ$  wird den Messwert 1 in höhere Wahrscheinlichkeit erzeugen, als -1, was ohne Gedächtnis nicht funktionieren könnte.

Man kann zwar von Komponenten des Spins sprechen, das sind dann aber mathematisch die Raum-Koeffizienten bzgl. seiner Darstellung im Matrizenraum. Sonst ist die Sprechweise Komponente eines Spins nichts anderes als eine Richtung, in der der Spin gemessen wird, was mathematisch der Matrix  $\sigma_n$  entspricht.

Sei also  $|x\rangle = \alpha_u|u\rangle + \alpha_d|d\rangle$  ein beliebiger Spinzustand, dann gibt es eine Richtung  $\hat{n}$ , sodass

$\sigma_n|x\rangle = |x\rangle$  ist, d.h. der Apparat, der längs dieser Richtung positioniert ist, den Wert 1 misst.

Der Vektor  $\hat{n}$  heißt der *Polarisationsvektor*. Er ist  $\hat{n} = \begin{pmatrix} 2\Re(\alpha_u\alpha_d^*) \\ 2\Im(\alpha_u^*\alpha_d) \\ \alpha_u^*\alpha_u - \alpha_d^*\alpha_d \end{pmatrix}$ .

Herleitung:  $\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_u \\ \alpha_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_u \\ \alpha_d \end{pmatrix}$  und  $\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_d^* \\ -\alpha_u^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha_d^* \\ \alpha_u^* \end{pmatrix}$

$$(1) \quad a\alpha_u + b\alpha_d = \alpha_u \quad (2) \quad b^*\alpha_u - a\alpha_d = \alpha_d \quad \text{und} \quad (3) \quad a\alpha_d^* - b\alpha_u^* = -\alpha_d^* \quad (4) \quad b^*\alpha_d^* + a\alpha_u^* = \alpha_u^*$$

$$(1') = (1)\alpha_d^*: \quad a\alpha_u\alpha_d^* + b\alpha_d\alpha_d^* = \alpha_u\alpha_d^* \quad \text{und} \quad (3') = (3)\alpha_u: \quad a\alpha_u\alpha_d^* - b\alpha_u\alpha_u^* = -\alpha_d^*\alpha_u$$

$$(1') - (3'): \quad b(\underbrace{\alpha_u^*\alpha_u + \alpha_d^*\alpha_d}_1) = 2\alpha_u\alpha_d^* \Rightarrow b = 2\alpha_u\alpha_d^* = n_x - in_y \Rightarrow n_x = \Re(2\alpha_u\alpha_d^*); n_y = \Im(2\alpha_u\alpha_d^*)$$

$$(1'') = (1)\alpha_u^*: \quad a\alpha_u^*\alpha_u + b\alpha_d\alpha_u^* = \alpha_u^*\alpha_u \quad (3'') = (3)\alpha_d: \quad a\alpha_d^*\alpha_d - b\alpha_u^*\alpha_d = -\alpha_d^*\alpha_d$$

21 So ähnlich wie die Kopenhagener Deutung vorschlägt.

22 Siehe unten bei den Kommutatorrelationen

$$(1'')+(3''): a=\alpha_u^*\alpha_u-\alpha_d^*\alpha_d=n_z$$

$$\Rightarrow \hat{n}=\begin{pmatrix} 2\Re(\alpha_u\alpha_d^*) \\ 2\Im(\alpha_u\alpha_d^*) \\ \alpha_u^*\alpha_u-\alpha_d^*\alpha_d \end{pmatrix}.$$

Aus  $\sigma_n|x\rangle=|x\rangle$  folgt auch für den Erwartungswert  $\langle\sigma_n\rangle_x=\langle x|\sigma_n|x\rangle=\langle x|x\rangle=1$

Operatoren  $\hat{A}:\mathcal{H}\rightarrow\mathcal{H}$ ,  $\hat{B}:\mathcal{H}\rightarrow\mathcal{H}$  können hintereinander ausgeführt werden:

$$\hat{B}\circ\hat{A}:\mathcal{H}\rightarrow\mathcal{H}:|x\rangle\mapsto\hat{B}\circ\hat{A}(|x\rangle):=\hat{B}(\hat{A}(|x\rangle)). \text{ Man schreibt für } \hat{B}\circ\hat{A} \text{ kurz } \hat{B}\hat{A}.$$

Diese Verknüpfung ist assoziativ, hat ein neutrales Element, nämlich den Einheitsoperator  $\hat{E}=\hat{I}$ :

$$\hat{A}\hat{I}|x\rangle=\hat{A}|x\rangle=\hat{I}\hat{A}|x\rangle, \text{ sie ist i.A. aber nicht kommutativ: } \hat{B}\hat{A}\neq\hat{A}\hat{B} \text{ und besitzt in der Regel}$$

auch kein Inverses.

Für die darstellenden Matrizen von Operatoren: Die Hintereinanderausführung der Operatoren wird hier zur Multiplikation der Matrizen.

$$\hat{s}_x\hat{s}_y\stackrel{\hbar}{=} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}=\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2}i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}i\hat{s}_z$$

bzw. wenn man nur die Paulimatrizen betrachtet:  $\sigma_x\sigma_y=i\sigma_z$

Die Vertauschung der Operatoren ergibt:

$$\hat{s}_y\hat{s}_x\stackrel{\hbar}{=} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}=\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}=-\frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2}i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}=-\frac{\hbar}{2}i\hat{s}_z \text{ bzw. } \sigma_y\sigma_x=-i\sigma_z$$

Man sieht, dass die beiden ersten Paulimatrizen nicht kommutieren.

Um einen Ausdruck zu haben, der Null ist, wenn die Operatoren kommutieren, definiert man

$$\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=:[\hat{A},\hat{B}] \text{ und nennt ihn den **Kommutator** von } \hat{A} \text{ und } \hat{B}.$$

Für die beiden ersten Spinoperatoren gilt:

$$\hat{s}_x \hat{s}_y - \hat{s}_y \hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} i \hat{s}_z + \frac{\hbar}{2} i \hat{s}_z = \hbar i \hat{s}_z \quad \text{also} \quad [\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i \hbar \hat{s}_z \quad \text{oder wenn man die gleiche Definition für}$$

die darstellenden Matrizen wählt:  $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$

Ich gebe noch die Kommutatoren für die anderen Spinmatrizen an:

$$\hat{s}_x \hat{s}_z \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \frac{\hbar}{2} i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} i \hat{s}_y \quad \text{bzw.} \quad \sigma_x \sigma_z = -i \sigma_y$$

$$\hat{s}_z \hat{s}_x \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \frac{\hbar}{2} i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} i \hat{s}_y \quad \text{bzw.} \quad \sigma_z \sigma_x = i \sigma_y$$

$$\hat{s}_x \hat{s}_z - \hat{s}_z \hat{s}_x = -\frac{\hbar}{2} i \hat{s}_y - \frac{\hbar}{2} i \hat{s}_y = -\hbar i \hat{s}_y, \quad \text{also} \quad [\hat{s}_x, \hat{s}_z] = -i \hbar \hat{s}_y \quad \text{und} \quad [\sigma_x, \sigma_z] = -2i \sigma_y$$

$$\hat{s}_y \hat{s}_z \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \frac{\hbar}{2} i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} i \hat{s}_x \quad \text{bzw.} \quad \sigma_y \sigma_z = i \sigma_x$$

$$\hat{s}_z \hat{s}_y \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \frac{\hbar}{2} i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} i \hat{s}_x \quad \text{bzw.} \quad \sigma_z \sigma_y = -i \sigma_x$$

$$\hat{s}_y \hat{s}_z - \hat{s}_z \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} i \hat{s}_x + \frac{\hbar}{2} i \hat{s}_x = \hbar i \hat{s}_x, \quad \text{also} \quad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i \hbar \hat{s}_x \quad \text{und} \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i \sigma_x$$

Ich gebe hier noch die Multiplikationstafel für die Paulimatrizen inklusiv der Einheitsmatrix

$$E = I := \sigma_0 \quad \text{an mit} \quad \sigma_1 := \sigma_x; \quad \sigma_2 := \sigma_y; \quad \sigma_3 := \sigma_z :$$

$\cdot$	$\sigma_0$	$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\sigma_3$
$\sigma_0$	$\sigma_0$	$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\sigma_3$
$\sigma_1$	$\sigma_1$	$\sigma_0$	$i\sigma_3$	$-i\sigma_2$
$\sigma_2$	$\sigma_2$	$-i\sigma_3$	$\sigma_0$	$i\sigma_1$
$\sigma_3$	$\sigma_3$	$i\sigma_2$	$-i\sigma_1$	$\sigma_0$

Kein Spinoperator kommutiert also mit einem anderen.

Was bedeutet das physikalisch?

Man erhält nur sichere Messergebnisse, wenn der Zustand ein Eigenzustand des zugehörigen Operators ist, wenn also  $\hat{A}|x\rangle = \lambda|x\rangle$ .

Will man in einem Zustand zwei Observablen  $A, B$  gleichzeitig sicher messen können, so muss der Zustand ein Eigenzustand beider Operatoren  $\hat{A}, \hat{B}$  sein:

$$\hat{A}|x\rangle = \lambda|x\rangle \quad \text{und} \quad \hat{B}|x\rangle = \mu|x\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{A} \hat{B} |x\rangle = \hat{A} \mu |x\rangle = \mu \hat{A} |x\rangle = \mu \lambda |x\rangle = \lambda \mu |x\rangle = \lambda \hat{B} |x\rangle = \hat{B} \lambda |x\rangle = \hat{B} \hat{A} |x\rangle$$

Damit  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , die Operatoren also kommutieren, muss obiges für alle Eigenvektoren der beiden Operatoren gelten.

Man sieht daher, da die Spinoperatoren nicht kommutieren, dass die Spinkomponenten nicht gleichzeitig sicher (scharf) gemessen werden können.

Noch eine Bemerkung zur klassischen Vertauschungsrelation  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$  (Heisenberg):

Für den Ortsoperator und den Impulsoperator (in der Ortsdarstellung) gilt:

$$(1) \hat{x} \psi(x) = x \psi(x) \quad (2) \hat{p}_x = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{x} \hat{p}_x \psi(x) = \hat{x} \left( -i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) = -i \hbar x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

$$\hat{p}_x \hat{x} \psi(x) = \hat{p}_x x \psi(x) = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x} x \psi(x) .$$

Es gilt  $\frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} = 1$ , denn:

$$\left( \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} \right) f(x) = \frac{\partial}{\partial x} x f(x) - x \frac{\partial}{\partial x} f(x) = 1 f(x) + x \frac{\partial}{\partial x} f(x) - x \frac{\partial}{\partial x} f(x) = f(x) \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} = 1$$

$$\hat{x} \hat{p}_x \psi(x) - \hat{p}_x \hat{x} \psi(x) = \left( -i \hbar x \frac{\partial}{\partial x} + i \hbar \frac{\partial}{\partial x} x \right) \psi(x) = i \hbar \left( \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) = i \hbar \psi(x) , \text{ also}$$

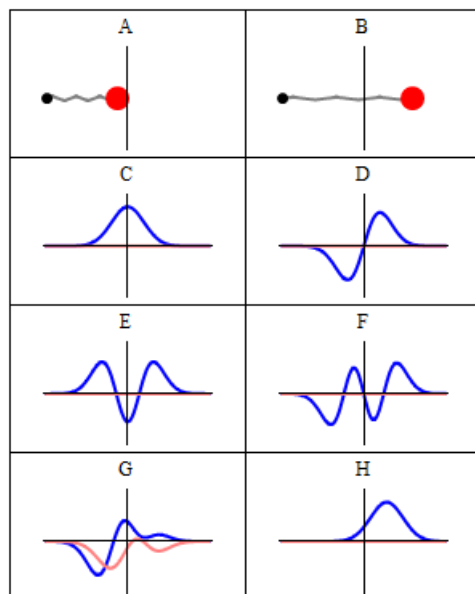
$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i \hbar \psi(x)$$

Dagegen kommutieren  $\hat{x}, \hat{p}_y$  :

$$\hat{x} \hat{p}_y \psi(x) = \hat{x} \left( -i \hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(x) = -i \hbar x \frac{\partial}{\partial y} \psi(x) = -i \hbar \frac{\partial}{\partial y} x \psi(x)$$

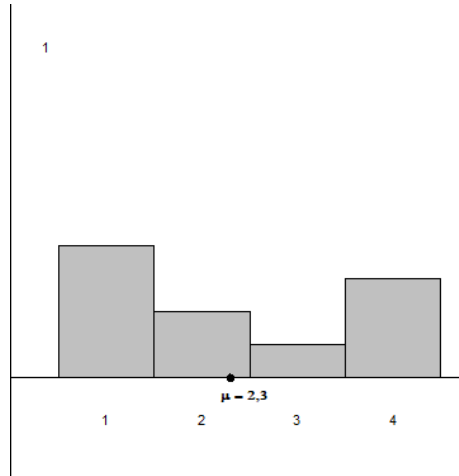
$$\hat{p}_y \hat{x} \psi(x) = \hat{p}_y x \psi(x) = -i \hbar \frac{\partial}{\partial y} x \psi(x) , \text{ also kommutieren sie: } [\hat{x}, \hat{p}_y] = 0 .$$

Das gilt analog für die anderen Komponenten.



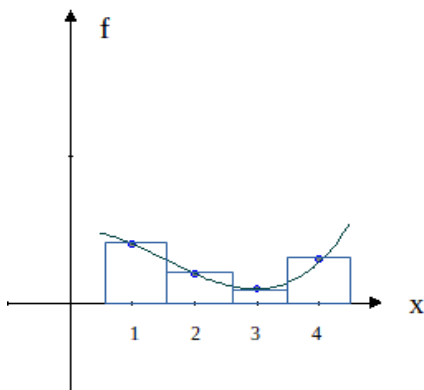
Sei  $f: X(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}; x \mapsto f(x) = P(X=x)$  eine W-Verteilung.

Als Beispiel nehme  $X$  die Werte 1, 2, 3, 4 an.  $f(1)=0,4$   $f(2)=0,2$   $f(3)=0,1$   $f(4)=0,3$

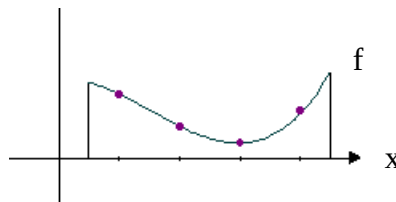


Die Wahrscheinlichkeit 1 als Fläche interpretiert wird auf die Rechteckflächen verteilt:

$$f(1) \cdot 1 + f(2) \cdot 1 + f(3) \cdot 1 + f(4) \cdot 1 = 1 \quad \text{oder} \quad \sum_{i=1}^4 f(x_i) \Delta x = 1$$

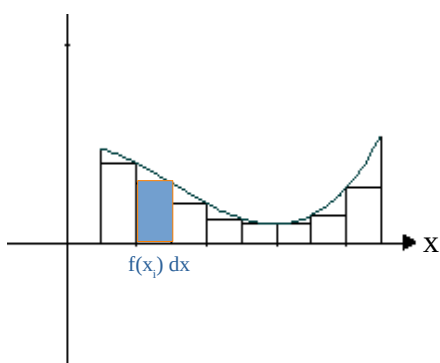


$$f(x) = 0,033x^3 - 0,15x^2 + 0,017x + 0,5$$



$$\int_{0,5}^{4,5} f(x) dx = 1$$

Die Wahrscheinlichkeit 1 ist als Fläche unterhalb des Graphen von  $f$  dargestellt.



$p_i = f(x_i) dx$  sind die einzelnen Rechtecksflächen, sozusagen die Wahrscheinlichkeitsteile von 1.

$\frac{p_i}{dx} = f(x_i)$  ist also die Wahrscheinlichkeitsdichte bzgl.  $dx$ . Wäre  $p_i$  größer bei gleichem  $dx$ , so

wäre die Dichte  $f(x_i)$  an dieser Stelle größer:



$f$  heißt daher die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion.

Das Skalarprodukt zweier komplexwertiger Funktionen  $f$  und  $g$  ist  $\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx$ .

Demnach ist  $\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)f(x)dx} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx}$

Für die Wellenfunktion  $\psi(x)$  gilt  $\|\psi\| = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx}$ .

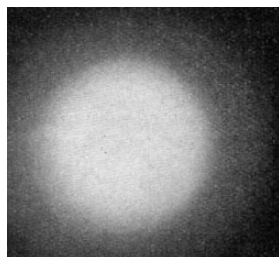
Da  $|\psi(x)|^2$  die Wahrscheinlichkeitsdichte ist, muss gelten:  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$

Also auch  $\|\psi\| = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx} = 1$ .

Ist  $\psi: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}, \mathbf{x} \mapsto \psi(\mathbf{x})$ , dann ist  $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1$  und demnach  $\|\psi\| = \sqrt{\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}} = 1$

Zur Schrödinger-Gleichung:

Nachdem Einstein die These vertreten hatte, dass Licht auch in Form von Teilchen, Quanten (Photonen) auftritt, so beim photoelektrischen Effekt, meinte de Broglie symmetrisch, dann könnten doch auch Materieteilchen Wellencharakter besitzen. Hatte Einstein für Energie eines Photons des Lichts der Wellenlänge  $\lambda$   $E = \frac{hc}{\lambda}$  und für seinen Impuls  $p = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda}$  angesetzt, so übernahm de Broglie diese Gleichungen für Materieteilchen mit Energie  $E$  und Impuls  $p$  und löste sie nach den Welleneigenschaften auf:  $\lambda = \frac{h}{p}$  und  $\nu = \frac{E}{h}$ .



Schrödinger ging einerseits von den elektromagnetischen Wellen der Form  $\psi(\mathbf{x}, t) = A e^{i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega t}$  aus (Wellenzahlvektor:  $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$ ) und interpretierte sie im Sinne von de Broglie als Materiewelle mit wohldefiniertem Impuls und Energie  $E = h\nu = \hbar\omega \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar}$  :

$$\psi(\mathbf{x}, t) = A e^{i\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\mathbf{x} - i\frac{E}{\hbar}t} = A e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et)} \quad \text{oder} \quad \psi(\mathbf{x}, t) = \psi(0, 0) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et)} .$$

Die Ableitung nach der Zeit (die Bewegungsgleichung) ergibt:  $\frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \frac{-i}{\hbar} E \psi(\mathbf{x}, t)$  oder  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = E \psi(\mathbf{x}, t)$  (1)

Desgleichen kann man auch  $\psi(x, t) = \psi(0, 0) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)}$  nach x (eindimensional) differenzieren und erhält:

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = \frac{i}{\hbar} p_x \psi(x, t) \quad \text{bzw.} \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = p_x \psi(x, t) \quad (2)$$

In den Gleichungen (1) und (2) stehen rechts vor  $\psi$  jeweils die reellen Größen E bzw.  $p_x$ , die gemessen werden können, also Messgrößen. Links stehen vor  $\psi$   $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  bzw.  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$  als Operatoren, der Energieoperator  $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  bzw. der Impulsoperator  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ , wobei E und p die Eigenwerte der Operatoren sind mit dem Eigenzustand bzw. Eigenfunktion  $\psi$  .

Dreidimensionaler Fall:

Geht man von der Gesamtenergie  $H = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x)$  aus und im

dreidimensionalen Fall von  $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$  wobei H die Hamiltonfunktion ist (zweiter Ansatz von Schrödinger).

Da die Gesamtenergie erhalten bleibt, gilt  $H = E$  (H ist der Teilchenaspekt und E der Wellenaspekt) und auf  $\psi$  angewandt:

$$H \psi(\mathbf{x}, t) = E \psi(\mathbf{x}, t) \quad \text{oder} \quad H \psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) \quad \text{oder}$$

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) .$$

Wendet man nun die Operatoren auf die klassischen Ausdrücke an:



Da  $\mathbf{p}=(p_x, p_y, p_z)$  ist der Operator für  $\mathbf{p}$ :

$$\hat{\mathbf{p}}=(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)=\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)=-i\hbar\nabla$$

und für  $\mathbf{p}^2=p_x^2+p_y^2+p_z^2$  ist der Operator  $\hat{p}_x^2=\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$  und also

$$\hat{\mathbf{p}}^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)=-\hbar^2\nabla^2=-\hbar^2\Delta \quad \text{mit dem Laplace-Operator} \quad \Delta=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

und  $\mathbf{x}=(x, y, z)$  mit dem Operator  $\hat{\mathbf{x}}$  ergibt die Quantisierung:

$$\left(-\hbar^2\frac{\Delta}{2m}+V(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x}, t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) \quad \text{mit dem Hamiltonoperator} \quad \hat{H}=-\hbar^2\frac{\Delta}{2m}+V(\mathbf{x}) :$$

die Schrödinger-Gleichung:  $\hat{H}\psi(\mathbf{x}, t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t)$  .

**Verändert** sich ein System, notiert man den veränderlichen Zustand mit  $|\psi(t)\rangle$ , der sich aus dem Zustand  $|\psi(0)\rangle$  zur Zeit  $t=0$  durch die Anwendung eines linearen Operators  $U(t)$  ergibt:

$$|\psi(t)\rangle=U(t)|\psi(0)\rangle \quad (*). \quad U \text{ nennt man sinngemäß den } \mathbf{Zeitentwicklungsoperator}.$$

Es gilt:

$$U(0)=1 \quad , \text{ da aus } |\psi(0)\rangle=U(0)|\psi(0)\rangle \text{ folgt } U(0)=1$$

Dann soll die Wahrscheinlichkeitsnormierung  $\|\psi\|=\sqrt{\int_{\mathbb{R}^3}|\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}}=1$ , die Unitarität, über die

Zeit erhalten bleiben:  $\|\psi(t)\|=\|\psi(0)\|=1$ , d.h. es sollte gelten:  $\frac{\partial}{\partial t}\|\psi\|=0$ .

Setzt man (\*) in die Schrödinger-Gleichung  $\hat{H}\psi(t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)$  ein, erhält man

$$\hat{H}U(t)|\psi(0)\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t)|\psi(0)\rangle \quad \text{oder} \quad \hat{H}U(t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t) \quad \text{oder} \quad \frac{\partial}{\partial t}U(t)=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}U(t) .$$

Mehrmaliges Ableiten von  $U(t)$  ergibt:  $\frac{\partial^2}{\partial t^2}U(t)=\frac{\partial}{\partial t}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}U(t)\right)=\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right)^2U(t)$  bzw.

$$\frac{\partial^n}{\partial t^n}U(t)=\frac{\partial^{n-1}}{\partial t^{n-1}}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}U(t)\right)=\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right)^nU(t) ,$$

Das Taylorpolynom von  $U(t)$  an der Stelle  $t=0$  entwickelt ist

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} U^{(n)}(0) t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n \left( \frac{-i}{\hbar} \hat{H} \right)^n \underbrace{U(0)}_1 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{-i}{\hbar} \hat{H} t \right)^n = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \quad \text{und damit}$$

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

Demnach ist  $U^\dagger(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^\dagger t} = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$  da  $\hat{H}$  hermitesch und also

$$U^\dagger(t) U(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = e^0 = I \quad , \text{ d.h. } U \text{ ist „unitär“. Damit gilt wegen } \langle \psi(t) | = \langle \psi(0) | U^\dagger :$$

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | U^\dagger(t) U(t) | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle \quad \text{und damit weiter}$$

$$\|\psi(t)\| = \sqrt{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} = \sqrt{\langle \psi(0) | \psi(0) \rangle} = \|\psi(0)\| = 1 \quad , \text{ d.h. die Erhaltung der Unitarität.}$$

Damit bleiben auch orthogonale Zustände über die Zeit erhalten, aber auch die Beziehung zwischen Zuständen allgemein:

$$\langle x | y \rangle = \langle x | I | y \rangle = \langle x | U^\dagger U | y \rangle = \langle U x | U y \rangle .$$