II Der mathematische Rahmen - fortgesetzt

1.) Lineare Operatoren ↗ Observablen

- Wir definieren einen linearen Operator A auf $\mathcal{H}$ folgendermaßen

$$A : \mathcal{H} \to \mathcal{H} \quad |\psi\rangle \mapsto A|\psi\rangle \in \mathcal{H}$$ Bsp. $M \times M$ Matrizen $\mathbb{R}^M \to \mathbb{R}^M$

- Linearität: $A(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$
- Kommutator: $[A,B] := AB - BA$

↳ Berechne Kommutator $[\hat{x}, \hat{p}_x]$:

- Im Ortsraum gilt für $\hat{x}$ und $\hat{p}$ (Vorlesung)

$$\hat{x}\,\psi(\vec{r},t) = x\,\psi(x,t)$$
$$\hat{p}_x\,\psi(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{i}\partial_x\,\psi(x,t)$$

$$\Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}_x]\,\psi(x,t) = x\frac{\hbar}{i}\partial_x\psi(x,t) - \frac{\hbar}{i}\partial_x(x\,\psi(x,t))$$
$$= \frac{\hbar}{i}\left[x\,\partial_x\psi(x,t) - \partial_x(x\,\psi(x,t))\right]$$
$$= \frac{\hbar}{i}\left[\cancel{x\,\partial_x\psi(x,t)} - \cancel{x\,\partial_x\psi(x,t)} - \psi(x,t)\right]$$
$$= -\frac{\hbar}{i}\psi(x,t) = \hbar i\,\psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar}$$

- weitere wichtige Kommutatoren: $[\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0 \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$$

Kommutatorregeln:

$$[\hat{A},\hat{B}] = -[\hat{B},\hat{A}]$$
$$[\hat{A},\hat{B}]^\dagger = [\hat{A}^\dagger, \hat{B}^\dagger]$$
$$[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}] + [\hat{A},\hat{C}]$$
$$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{B}]\hat{C}$$

hermitesche Konjugation: $|\psi\rangle^\dagger \to \langle\psi|$ $\quad A \to A^\dagger$ (adjungierter Operator)

$$\langle\phi|A|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle \qquad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

Hermitesche (selbstadjungierte Operatoren) $\boxed{A^\dagger = A}$

↳ Eigenschaften: reelle Eigenwerte ↗ Observablen

↳ jede messbare Größe wird durch einen hermiteschen Operator beschrieben

$$\hat{x}^+ = \hat{x}, \quad \hat{p}^+ = \hat{p} \qquad \hat{H}^+ = \hat{H}$$

<u>Unitärer Operator</u>: $U^{-1} = U^+ \quad \Rightarrow U^+U = \mathbb{1} = UU^+$

2.) <u>Orthonormierte Basen</u>

- wir können jeden Zustandsvektor $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ eindeutig als Linearkombination von Basisvektoren darstellen:

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i\rangle$$

- Orthonormierungsbedingung $\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}$
- Darstellung der Entwicklungskoeffizienten: $\boxed{\alpha_j = \langle e_j | \Psi \rangle} = \sum_i \alpha_i \underbrace{\langle e_j | e_i \rangle}_{\delta_{ij}} = \alpha_j$
- Darstellung von Zuständen (für kontinuierliche Basen)

  ↳ hier $\{|x\rangle\}$ hier gilt: $\Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle$

- <u>Vollständigkeitsrelation</u>:

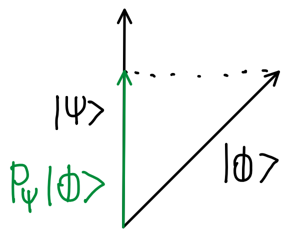
  ↳ wir wissen: $\langle \Phi | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{\Phi^*(x)}_{[\Phi(x)]^* = \langle x|\Phi\rangle^*} \Psi(x)$ (Skalarprodukt der Wellenfunktionen)

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \langle \Phi | x \rangle \langle x | \Psi \rangle$$

$$= \langle \Phi | \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \, |x\rangle\langle x| \right)}_{\stackrel{!}{=} \mathbb{1}} | \Psi \rangle$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx \, |x\rangle\langle x| = \mathbb{1}$$

$\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = 1$ für endliche Basen

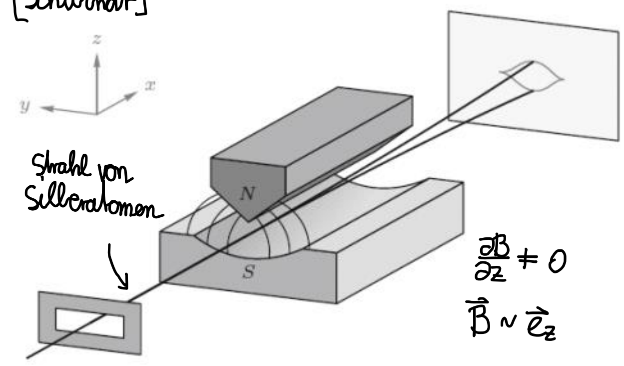


- Projektionsoperator: $\hat{P}_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ projiziert auf den Zustand $|\Psi\rangle$

  ↳ Eigenschaften: $\hat{P}_\Psi^2 = |\Psi\rangle \underbrace{\langle \Psi | \Psi \rangle}_{\mathbb{1}} \langle \Psi | = \hat{P}_\Psi$ ↑ normiert

Stern-Gerlach Experiment

[Schwindt]



$\frac{\partial B}{\partial z} \neq 0$

$\vec{B} \sim \vec{e}_z$

- klassische Erwartung: Magnetfeld übt eine Kraft auf magnetische Momente der Silberatome aus

aber: Silber hat eine e^--Konfiguration $\ell = 0 \Rightarrow$ s-Orbital
→ kein magnetisches Moment
↳ Eigendrehimpuls des e^- (Spin)

Potential des mag Dipols: $U = -\vec{B} \cdot \vec{\mu}$

→ Kraft $\vec{F} = -\vec{\nabla} \cdot U = \mu_z \frac{dB}{dz}$

- erwarte kontinuierlichen Verlauf des Ausgangssignals, da der Spin zufällig orientiert ist
- Messung: Quantisierung des Spins in $S_z = \pm \frac{1}{2}$
[↳ warum $\frac{1}{2}$? $-S \leq m_S \leq S$ für $s = \frac{1}{2}$ bleibt für m_S nur $\pm \frac{1}{2}$]

- Mathematische Beschreibung:

- Darstellung des Spinzustands in der Basis $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ bei Messung in z-Richtung
  (spin up, spin down)

↳ $\langle + | + \rangle = 1 = \langle - | - \rangle$
$\langle + | - \rangle = 0$

Vollständigkeit: $\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = 1 \Rightarrow |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = \mathbb{1}$

- Definition des Spinoperators: $S_z |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle$

↳ Matrixdarstellung: $S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$= \frac{\hbar}{2} \Big[\underbrace{|+\rangle\langle +|}_{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}} - \underbrace{|-\rangle\langle -|}_{\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}} \Big]$$

- analog: Definition von Spinoperatoren in S_x und S_y Richtung

$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\quad$ (ohne Herleitung)

- wir können nun die orthonormierten Eigenvektoren von S_x und S_y bestimmen a.) Eigenwerte : $\det\left[\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\lambda & 0\\ 0 & \lambda\end{pmatrix}\right] \overset{!}{=} 0$

$\Rightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{vmatrix}-\lambda & 1\\ 1 & -\lambda\end{vmatrix} = \frac{\hbar}{2}(\lambda^2 - 1) = 0 \quad \Rightarrow \lambda = \pm 1$

b.) Eigenvektoren : $\lambda = 1$, $\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}-1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix} \quad \Rightarrow |+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}$

$\Rightarrow \beta - \alpha = 0 \Rightarrow \beta = \alpha \qquad = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle + |-\rangle\right)$

$\lambda = -1 \quad \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$

$\Rightarrow \alpha + \beta = 0 \Rightarrow \alpha = -\beta \qquad \Rightarrow |-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}$

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

- Verfahre für S_y analog : $|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle \pm i\,|-\rangle\right)$
- Kommutatoren : $[S_x, S_y] = S_z$
  $[S_i, S_j] = \varepsilon_{ijk} S_k$
- Bemerkung : S_x, S_y, S_z sind hermitesch
- Sei nun ein präparierter Zustand $|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right)|+\rangle + \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)|-\rangle$

↳ Was ist der Erwartungswert für eine S_z Messung ?

$\langle\psi\rangle = \langle\psi| S_z |\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(\cos\frac{\varphi}{2} \;\; \sin\frac{\varphi}{2}\right)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\varphi}{2}\\ \sin\frac{\varphi}{2}\end{pmatrix}$

$= \frac{\hbar}{2}\left(\cos\frac{\varphi}{2} \;\; \sin\frac{\varphi}{2}\right)\begin{pmatrix}\cos\frac{\varphi}{2}\\ -\sin\frac{\varphi}{2}\end{pmatrix}$

$= \frac{\hbar}{2}\left(\cos^2\frac{\varphi}{2} - \sin^2\frac{\varphi}{2}\right) = \frac{\hbar}{2}\cos\varphi$