

Kapitel 2

Zustände und Messungen

Jede physikalische Theorie enthält physikalische Konzepte, einen mathematischen Apparat und einen Satz von Korrespondenzregeln, der die Konzepte mit der mathematischen Beschreibung verbindet. Diese Korrespondenzen sind oft so „offensichtlich“, dass man nicht weiter darüber nachdenkt, wie zum Beispiel bei der Beschreibung des Ortes eines Teilchens durch reelle Zahlen. Der mathematische Apparat der Quantenmechanik und die zugehörigen Korrespondenzregeln sind weniger intuitiv und bedürfen sorgfältiger Überlegungen.

2.1 Zustände

Wir haben schon erfahren, dass bei Messungen beliebiger Größen („Observablen“) nur Wahrscheinlichkeiten für die Ergebnisse angegeben werden können. Diese Wahrscheinlichkeiten hängen für eine zu messende physikalische Größe (etwa den Auftreffort eines Elektrons auf einem Schirm) von der Präparation der gemessenen Objekte ab. Der Auftreffort eines Elektrons ist aber nicht deterministisch bestimmt. Zwei gleichartig präparierte Elektronen werden im allgemeinen an verschiedenen Orten auftreffen. Die Wahrscheinlichkeiten für die verschiedenen Auftrefforte sind dagegen wohl determiniert. Es macht daher Sinn, die Elektronen durch solche Wahrscheinlichkeiten zu charakterisieren, oder äquivalent durch die Präparation:

ZUSTAND

Ensemble von Teilchen, die gleichartig präpariert sind.

Äquivalent: Durch die gleichartige Präparation sind die Wahrscheinlichkeitsverteilungen aller Observablen bestimmt.

Der Zustandsbegriff ist eines der meist diskutierten Konzepte der Quantenmechanik. Es gibt dabei vor allem unterschiedliche Zugänge zur Betrachtung einzelner Teilchen, die hier nur ganz kurz angesprochen werden können.

1. In der traditionellen Kopenhagener Interpretation der Quantenmechanik wird auch vom Zustand oder der Wellenfunktion eines einzelnen Teilchens gesprochen. Ein solcher Zustand muss mehrere Messergebnisse (z.B. Auftrefforte) erlauben. Wenn eines dieser Messergebnisse tatsächlich eingetreten ist (das Elektron ist an einem bestimmten Ort gemessen worden) dann spricht man in diesem Zugang von einem „Kollaps der Wellenfunktion“: nach der Messung ist der Ort des einzelnen Teilchens eindeutig bekannt. Seine Wellenfunktion (sein Zustand) hat sich also plötzlich geändert. Dies führt zu Interpretationsschwierigkeiten.
2. Diese Schwierigkeiten verringert man, wenn man darauf verzichtet, von dem Zustand eines einzelnen Teilchens zu sprechen, sondern nur unendlich große Ensembles gleichartig präparierter Teilchen betrachtet. Hierfür sind Wahrscheinlichkeitsverteilungen für alle Messungen wohldefiniert. Das einzelne Messergebnis ändert nichts an diesen Verteilungen. (Wenn man aber Teilchen mit einem bestimmten Messergebnis nach der Messung selektiert, dann ist das Ensemble solcher Teilchen neu präpariert und im allgemeinen anders als zuvor.) Diese Sichtweise wird z.B. im Buch von Ballentine ausführlich diskutiert.

Mehr in
Kap. 10

Wir werden in dieser Vorlesung solche Interpretationsfragen weitgehend zurückstellen und uns auf die tatsächlichen Aussagen der Quantenmecha-

nik für den Ausgang von Experimenten konzentrieren. Hierüber herrscht Einigkeit und Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen.

Abkürzend (und weil dieser Sprachgebrauch sehr üblich ist) werden wir auch gelegentlich vom einem „Teilchen im Zustand ...“ sprechen. Damit soll aber immer das entsprechende Ensemble gemeint sein.

Wir behandeln in dieser Vorlesung die Quantenmechanik von Ensembles einzelner Teilchen, die nicht miteinander wechselwirken. Ein Strahl von Teilchen soll z.B. so verdünnt sein, dass die einzelnen Teilchen nichts voneinander merken. Die Umgebung, wie z.B. magnetische Felder oder das Coulomb-Potential eines Atomkerns, betrachten wir als fest vorgegeben, ohne Rückwirkung der quantenmechanisch behandelten Teilchen auf diese Umgebung. Die Berücksichtigung dieser Rückwirkung bedarf der Vielteilchen-Quantenmechanik, welche in späteren Vorlesungen behandelt werden wird.

2.2 Polarisationsexperimente

Wir werden nun einige einfache Experimente mit polarisiertem Licht diskutieren. Dies wird uns anschließend zur mathematischen Beschreibung der Quantenmechanik führen.

2.2. Polarisierungsexperimente

Wir haben schon gesehen, dass Licht aus Photonen besteht, die einzeln bei einem Detektor eintreffen. Wir werden die Experimente daher mit Photonen beschreiben müssen. Die Experimente kann man bei hohen Lichtintensitäten auch alle im Wellenbild verstehen, d.h. mit elektrischen und magnetischen Feldern. Bei geringen Intensitäten (und deswegen auch im allgemeinen Fall) macht die Beschreibung über Felder wegen der Teilchennatur des Lichtes aber keinen Sinn. Tatsächlich sieht man in der relativistischen Quantenfeldtheorie, dass ein „elektrisches Feld“ eines einzelnen Photons kein vernünftiges Konzept ist. Was wir aus den Experimenten lernen werden, gilt auch anderswo, wo es keine entsprechende klassische Beschreibung durch Felder gibt. Polarisationsexperimente mit Photonen sind günstig, weil sie besonders einfach strukturiert sind, weil sie nahezu ideal durchführbar sind, und weil die Photonen untereinander so gut wie nicht wechselwirken.

s.a.
Kap. 4.9.6
"Kohärente Zustände"

Wir betrachten im Folgenden einen zunächst unpolarisierten Strahl von Photonen mit Intensität I_0 , der sich in z -Richtung bewegt. Er ist durch diese Richtung und seine Frequenz (also die Energie der einzelnen Photonen) charakterisiert.

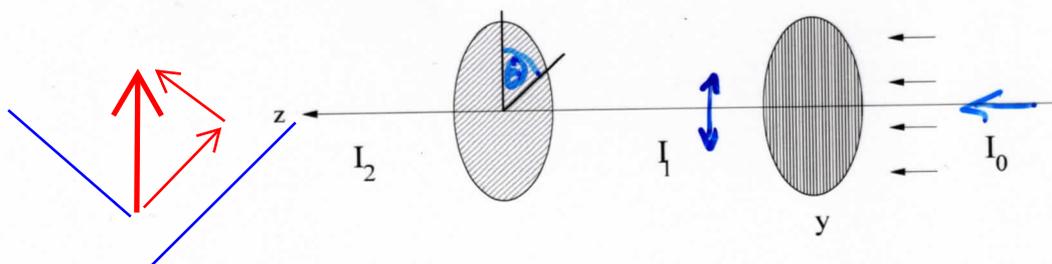


Abbildung 2.1: Ein Lichtstrahl fällt von rechts auf zwei zueinander um den Winkel θ gedrehte lineare Polarisatoren.

Wir schicken ihn durch ein Polarisationsfilter in y -Richtung und stellen so einen linear polarisierten Strahl der Intensität I_1 her. Diesen schicken wir durch ein zweites Polarisationsfilter, das um einen Winkel θ gegen das erste Filter verdreht ist. Wir messen die Intensität und finden

$$I_2 = I_1 \cos^2 \theta .$$

Insbesondere passiert der Strahl den zweiten Polarisator ungeschwächt, wenn dieser so wie der erste ausgerichtet ist, und wird vollständig absorbiert, wenn der Winkel 90° beträgt.

Im Rahmen der klassischen Elektrodynamik ist das Verhalten leicht erklärbar: Eine in z -Richtung laufende ebene elektromagnetische Welle erhält durch den ersten Polarisator eine Polarisation in y -Richtung. Der zweite Polarisator lässt nur den Anteil des Lichtes durch, dessen elektrisches Feld *parallel zur neuen Polarisationsrichtung* ist, also die Projektion von \vec{E} auf die neue Richtung, mit Größe $|\vec{E}| \cos \theta$. Die dazu senkrechte Komponente wird absorbiert. Die Intensität ist proportional zum Quadrat der Amplitude des elektrischen Feldes \vec{E}^2 , d.h. zu $\cos^2 \theta$. Hinter dem zweiten Polarisator zeigt das elektrische Feld dann in Richtung θ .

Wenn wir die Existenz von Photonen berücksichtigen, sehen wir, dass wir mit dem ersten Polarisator ein Ensemble von Teilchen hergestellt haben, das in y -Richtung polarisiert ist. Diese Polarisation können wir mit dem zweiten Polarisator messen:

Das Ensemble ist genau dann in einem Zustand mit Polarisation θ , wenn es den Polarisator in Richtung θ ungeschwächt passiert.

Wir benötigen für diese Charakterisierung nicht das Konzept eines elektrischen Feldes.

Über die Polarisation eines einzelnen gemessenen Photons erhalten wir bei der Messung keine Information, denn es kann aus einem beliebigen, relativ zum messenden Polarisator gedrehten Ensemble stammen (mit Ausnahme einer zum Polarisator genau senkrechten Polarisation).

Wenn die beiden Polarisatoren gegeneinander gedreht sind, könnte man vermuten, dass die Intensität dadurch verringert wird, dass die Photonen vielleicht „gespalten“ werden, und nur ein Teil jedes Photons durch den zweiten Polarisator geht. Dies ist nicht so, denn die Photonen hinter dem 2. Polarisator haben dieselbe Frequenz (und damit dieselbe Energie) wie davor. Eine Abnahme der Intensität bedeutet daher die Abnahme der Anzahl der Photonen: Sie passieren mit der Wahrscheinlichkeit $\cos^2 \theta$ den zweiten Polarisator.

Wir haben gesehen, dass das Ensemble der Photonen hinter dem ersten Polarisator die Polarisation y hat. Hinter dem zweiten Polarisator haben die Photonen aber eine neue Polarisationsrichtung θ ! Dies wissen wir schon aus dem Wellenbild. Wir könnten es mit Hilfe eines dritten Polarisationsfilters verifizieren. Die Messung der Polarisation mit dem zweiten Polarisator verändert selber den Zustand der Photonen !

Wenn ein einzelnes Photon einen Polarisator passiert, kann man nur schließen, dass seine Polarisationsrichtung nicht senkrecht zum Polarisator war. Wenn es nicht passiert, kann man nur schließen, dass die Polarisationsrichtung nicht parallel war. Alle anderen Winkel bleiben möglich. Information über Wahrscheinlichkeiten erhält man erst mit vielen Ereignissen.

D
o

(s.u.)

2.2.1 Analysatoren

Wir erweitern jetzt unseren Messapparat, indem wir statt eines einfachen Polarisators einen doppeltbrechenden Kristall (z.B. Kalkspat) verwenden. Dieser ist anisotrop. Er hat verschiedene Brechungsindizes für horizontale und für vertikale Polarisation. Er spaltet den einlaufenden Lichtstrahl in zwei Strahlen auf, die senkrecht zueinander linear polarisiert sind. (Den dabei zwischen den Strahlen auftretenden Phasenunterschied kann man wieder aufheben). Schematisch ist er in Abb. 2.2 und symbolisch in Abb. 2.3 dargestellt. Der Lichtstrahl läuft von rechts ein. Er wird in zwei Strahlen mit Polarisation in x - bzw. y -Richtung aufgespalten.

≈ Laufzeit-Unterschied ✓

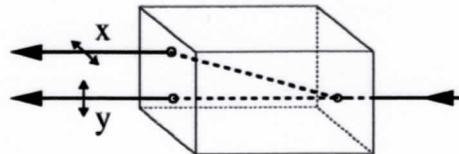


Abbildung 2.2: Schematischer Strahlengang in einem doppeltbrechenden Kristall.

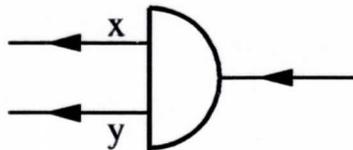


Abbildung 2.3: Symbolische Darstellung eines Polarisationsanalytors.

Wir schalten zwei dieser Kristalle hintereinander, wie in Abb. 2.4 gezeigt. Der erste Kristall stellt einen in x -Richtung polarisierten Strahl der Inten-

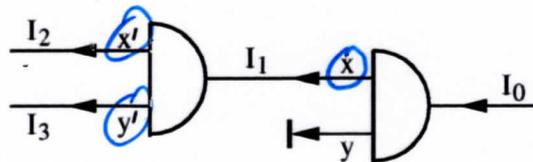


Abbildung 2.4: Zwei hintereinander geschaltete Polarisationsanalytoren.

Kapitel 2. Zustände und Messungen

sität I_1 her. Diesen schicken wir in den zweiten, gegenüber dem ersten gedrehten Kristall, der in Richtung x' und y' polarisiert. Der Winkel zwischen x und x' betrage θ . (Den in y -Richtung polarisierten Strahl des ersten Kristalls blockieren wir.) Wir finden die Intensitäten

$$I_2 = I_1 \cos^2 \theta \quad \text{und} \quad I_3 = I_1 \sin^2 \theta .$$

Zusammen haben die beiden auslaufenden Strahlen die Intensität $I_1 \cos^2 \theta + I_1 \sin^2 \theta = I_1$: Es gehen im Analysator keine Photonen verloren!¹ Mit Wahrscheinlichkeit $\cos^2 \theta$ gelangen die Photonen in den einen Ausgangsstrahl und mit $\sin^2 \theta$ in den anderen.

Wir erkennen auch leicht eine Reihe grundlegender Eigenschaften quantenmechanischer Messungen, die allgemein gelten:

1. Jedes in einen Analysator einlaufende Photon verlässt den Analysator entweder durch den einen oder den anderen Ausgangskanal, nie durch beide. Jede einzelne Messung der Polarisation durch den Analysator ergibt deswegen immer nur einen der hier zwei möglichen Einzelmesswerte, entsprechend den beiden Kanälen des Analysators, nie eine Kombination der beiden. Dies gilt unabhängig vom Zustand des einlaufenden Strahls. Wir werden sehen, dass eine analoge Charakterisierung von Einzelmesswerten für jede Messung gilt!
2. Dagegen enthält der Mittelwert der Messungen Information über den untersuchten Zustand. Quantifiziert man z.B. in obigem Experiment die Polarisationsrichtung x' durch den „Messwert 1“ und y' durch den „Messwert -1“, so ist sein Erwartungswert dort

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\substack{\text{Messwerte} \\ \text{hier } +1, -1}} \left(\text{Messwert} \times \overset{\text{relative}}{\text{Häufigkeit}} \right) = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta$$

und kann, abhängig vom Winkel θ , beliebige Werte zwischen -1 und +1 annehmen.

3. Die Messung (also der Analysator) ändert den Zustand der Photonen, denn hinter dem ersten Kristall sind alle Photonen in x -Richtung polarisiert, hinter dem zweiten Kristall in x' bzw. y' -Richtung. Dies können wir verifizieren, indem wir links einen dritten Analysator

Messung bei den Ausgangskanälen

Teilchen!

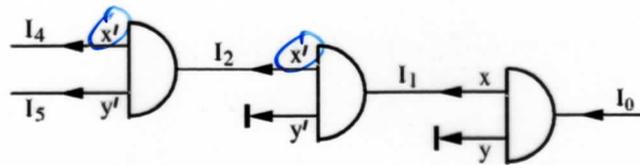


Abbildung 2.5: Der Messapparat ändert den Zustand.

mit unveränderter Richtung hinzufügen (Abb. 2.5). Wir finden

$$\underline{I_4 = I_2} \quad \text{und} \quad \underline{I_5 = 0} :$$

Hinter dem ersten Analysator haben die Photonen die Polarisation x , aber hinter dem zweiten Analysator die Polarisation x' . Die Messung ist selber eine neue Präparation.

Wir sehen auch, dass wir den ganzen Photonenstrahl in zwei Strahlen aufteilen können, welche jeweils genau die zueinander senkrechten Polarisationsrichtungen x und y haben. Dies klassifiziert die Polarisation vollständig, in dem Sinne dass ein in x -Richtung polarisierter Strahl keinen Anteil von y -Polarisation enthält. ($\cos \theta = 0$). Zusätzliche Richtungen benötigen wir bei Photonen deswegen nicht.² Genauso können wir aber die Photonen in die Polarisationsrichtungen x' und y' auftrennen. Offenbar stellen die Richtungen x, y und x', y' jeweils so etwas wie eine Basis dar. Wir werden dies etwas später weiter diskutieren.

Wir können den Analysator auch umgekehrt verwenden, sodass die beiden getrennten Strahlen wieder zu einem Strahl zusammengefügt werden. (Dazu muss man in den einen Kanal ein laufzeitverzögerndes Stück Plastik einfügen, um den Laufzeitunterschied auszugleichen, bzw. in der Beschreibung als Wellen, um die Phasenbeziehung der Einzelstrahlen wiederherzustellen) Die Kombination eines Analysators mit einem gleichartigen umgekehrten Analysator nennen wir einen Analysatorkreis (Abb. 2.6).

Wir verwenden eine solche Anordnung in einem weiteren Versuch (Abb. 2.7), den wir in mehreren Varianten durchführen. Rechts läuft ein Strahl

¹Im experimentell nahezu erreichbaren idealisierten Fall.

²Obwohl die Photonen Spin 1 besitzen, gibt es wegen ihrer Masselosigkeit nur zwei Polarisationsrichtungen

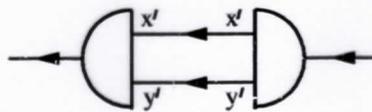


Abbildung 2.6: Analysatorkreis: Analysator und umgekehrter Analysator.

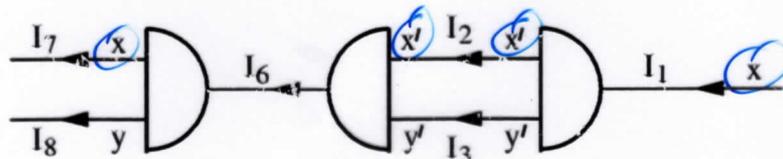


Abbildung 2.7: Experiment mit einem Analysatorkreis.

mit Polarisation x ein. Hinter dem ersten Polarisator gibt es dann einen Strahl mit Polarisation x' und Intensität $I_2 = I_1 \cos^2 \theta$, sowie einen Strahl mit Polarisation y' und Intensität $I_3 = I_1 \sin^2 \theta$. Zunächst blockieren wir den Strahl y' . Dann hat der Strahl bei I_6 weiterhin die Polarisation x' und die Intensität I_2 . Er trifft auf den letzten Analysator, der ihn wieder in x - und y -Richtung polarisiert, mit dem erwarteten Ergebnis $I_7 = I_6 \cos^2 \theta = I_1 \cos^4 \theta$. Analog verläuft das Experiment, wenn der x' -Strahl blockiert wird.

Wenn wir nun vor dem umgekehrten Analysator beide Strahlen freigeben, würden wir für klassische Teilchen erwarten, dass sich die beiden eben ermittelten Intensitäten einfach addieren. Stattdessen finden wir komplette Auslöschung bei I_8 !:

$$I_7 = I_1 \quad \text{und} \quad I_8 = 0 \quad !$$

Der Strahl hinter dem umgedrehten Analysator ist nun offenbar wieder in die ursprüngliche x -Richtung polarisiert. Er hat alle Information über die vorhergehende Polarisation in x' -Richtung und y' -Richtung „vergessen“! In der Teilchenbeschreibung ist dies höchst überraschend.

In der (für Photonen nicht zutreffenden !) Beschreibung über Felder ist dieses Ergebnis aber erwartet: Der Vektor des zunächst in x -Richtung polarisierten elektrischen Feldes wird vom ersten Analysator in Komponenten parallel zu x' und y' aufgespalten. Diese werden vom umgekehrten Analysator wieder zusammengefügt, so dass wieder ein Vektor in x -Richtung entsteht. Für die korrekte quantenmechanische Beschreibung benötigen

wir einen Formalismus, der dies ebenfalls leisten kann.

2.3 Algebraische Beschreibung

Wir beschreiben nun die Ergebnisse der geschilderten Experimente algebraisch. Mathematische Definitionen und Erläuterungen werden im Anhang gegeben. Wir betrachten vorerst nur die Polarisation der Photonen-Ensembles. Ausbreitungsrichtung und Frequenz sind fest vorgegeben und ändern sich nicht. Sie werden deshalb im Folgenden nicht weiter spezifiziert.

Wir haben gesehen, dass sich die Photonen beim Analysator vollständig auf eine von nur zwei Polarisationsrichtungen wie x und y verteilen, oder bei gedrehtem Analysator x' und y' . Man kann den Photonenstrahl spezifizieren, indem man die Stärke des Beitrags beider Richtungen angibt. Dies entspricht der Angabe von Koordinaten für einen Vektorraum. Tatsächlich korrespondieren (reine) Zustände zu Vektoren $|\psi\rangle$ in einer speziellen Klasse von Vektorräumen, den Hilberträumen. Für die Polarisation von Photonen hat dieser Vektorraum lediglich die Dimension 2. Die zugehörigen Basisvektoren stehen für die Polarisationsrichtungen, z.B. soll bei der Diskussion der Photonpolarisationen nun

$$|x\rangle, |y\rangle$$

die Basisvektoren sein, die lineare Polarisation in x bzw. y -Richtung beschreiben. Die Basisvektoren sollen orthonormiert sein:

$$\langle x|y\rangle = 0, \quad \langle x|x\rangle = \langle y|y\rangle = 1 \quad (2.1)$$

Wie wir sehen werden, entspricht dies den Experimenten, die zeigen, dass zwei hintereinandergeschaltete Polarisatoren in gleicher Richtung die Intensität nicht ändern, und in zueinander senkrechter Richtung Intensität Null ergeben.

Ein allgemeiner Vektor in diesem Vektorraum ist dann

$$|\psi\rangle = c_x |x\rangle + c_y |y\rangle \quad (2.2)$$

mit im allgemeinen komplexen Koeffizienten c_x, c_y . Dieser Vektor wird ebenfalls als „Zustand“ bezeichnet.

Hier: Polarisierter Lichtstrahl mit einer Polarisation zwischen $|x\rangle$ und $|y\rangle$, abhängig von den Koeffizienten

Wie kann man einen **Apparat** wie z.B. einen Polarisator, Analysator, oder anderen Messapparat algebraisch beschreiben? Ein Apparat wirkt auf einen Zustand und verändert ihn im allgemeinen. Dies **entspricht algebraisch einem Operator**, der auf einen Zustandsvektor wirkt und wieder einen Zustandsvektor erzeugt.

Besonders einfach der Fall des **Polarisators**. Ein Polarisator (Polarisationsfilter) in x -Richtung erzeugt, so zeigt das Experiment, ein Ensemble von in x -Richtung polarisierten Teilchen, d.h. einen Zustand proportional zu $|x\rangle$. Außerdem ändert er die Intensität eines schon zuvor so polarisierten Ensembles nicht. Der geeignete Operator ist der **Projektionsoperator**:

$$\hat{P}_x = |x\rangle\langle x| \quad (2.3)$$

In der Tat ist $\hat{P}_x |x\rangle = (|x\rangle\langle x|) |x\rangle = |x\rangle \underbrace{\langle x|x\rangle}_1 = |x\rangle$,

$\hat{P}_x |y\rangle = 0$, und $\hat{P}_x |\psi\rangle \sim |x\rangle$ für jeden Vektor $|\psi\rangle$.

Man kann auch \hat{P}_x auf einen Vektor in einer beliebigen anderen Richtung anwenden. Dies beschreibt die Anwendung des Polarisators für die x -Richtung auf einen z.B. in x' -Richtung polarisierten Strahl. Man erhält

$$\hat{P}_x |x'\rangle = |x\rangle \underbrace{\langle x|x'\rangle}_{\text{Zahl}} .$$

Aus dem Koeffizienten $\langle x|x'\rangle$ muss offenbar die Intensität des entstehenden Strahls herauszulesen sein, also die Wahrscheinlichkeit $W(x|x')$ („Wahrscheinlichkeit, x zu erhalten, wenn x' gegeben ist“) dass die Photonen des in x' -Richtung polarisierten Strahls nachher in x -Richtung polarisiert sind. Wir haben schon beim Doppelspaltexperiment gesehen, dass solche Wahrscheinlichkeiten die Gestalt eines Betragsquadrats $|\varphi|^2$ einer Wahrscheinlichkeitsamplitude haben müssen. Die korrekte Identifikation ist

$$W(x|x') = |\langle x|x'\rangle|^2 \quad (2.4)$$

(Postulat !) Dies ist die Wahrscheinlichkeit, bei Vorliegen des Zustands $|x'\rangle$ in einer Messung den Zustand $|x\rangle$ zu finden, durch Projektion mit Hilfe des Polarisators oder Analysators. Sie liegt zwischen 0 und 1. Aus der Struktur von Gl. (2.4) folgt die Symmetrie $W(A|B) = W(B|A)$, was auch allgemein gilt.

2.3. Algebraische Beschreibung

Wir wissen schon, dass diese Wahrscheinlichkeit $W(x|x') = \cos^2 \theta$ ist. Zumindest bis auf einen Phasenfaktor $e^{i\delta}$ des Betrags 1 gilt daher für die Wahrscheinlichkeitsamplitude

(für die Polarisation von Licht / Photonen)

$$\langle x|x' \rangle = \cos \theta, \quad (2.5)$$

wobei θ der Winkel zwischen den Richtungen x und x' ist. Den Phasenfaktor kann man hier zu 1 wählen. (Das ist nicht generell möglich, wie wir bei der allgemeinen Diskussion von Basistransformationen sehen werden.)

Die Beschreibung eines Analysators ist etwas komplexer, denn er präpariert Photonen-Ensembles an zwei unterscheidbaren Ausgängen. Die Ensembles unterscheiden sich in der Polarisation *und* im Ausgangskanal, der deshalb im Zustandsvektor ebenfalls spezifiziert werden muss. An jedem dieser Ausgänge entspricht die Wirkung einem Polarisator. Wir können den Analysator in Abb. 2.3 daher algebraisch als einen Operator

man könnte statt $\langle x|$ und $\langle y|$ auch schreiben: $\langle x, \text{Eingang I}$ und $\langle y, \text{Eingang I}$

$$\hat{A} = |x, 1. \text{ Kanal} \rangle \langle x| + |y, 2. \text{ Kanal} \rangle \langle y| \quad (2.6)$$

beschreiben. Angewandt z.B. auf einen Zustand mit Polarisation in x -Richtung stellt er einen Zustand mit gleicher Polarisation im 1. Ausgangskanal her.

In einem Zustandsvektor wie $|x, 1. \text{ Kanal} \rangle$ ist jetzt sowohl die Polarisationsrichtung $e = x, y$ als auch der Kanal $k = 1, 2$ spezifiziert. Der zu einem solchen Ket-Vektor $|e, k \rangle$ korrespondierende Bra-Vektor $\langle e, k|$ ist eine Abbildung mit der Eigenschaft

$$\langle e, k| |e', k' \rangle = \langle e, k|e', k' \rangle = \langle e|e' \rangle \langle k|k' \rangle = \delta_{ee'} \delta_{kk'}. \quad (2.7)$$

Ein umgekehrter Analysator wie in Abb. 2.6 entspricht einem Operator

$$\hat{A}_U = |x' \rangle \langle x', 1. \text{ Kanal}| + |y' \rangle \langle y', 2. \text{ Kanal}| \quad (2.8)$$

Man kann wahlweise auch links einen "Kanal" angeben

Beim Analysatorkreis in Abb. 2.6 werden die beiden auf x' bzw. y' projizierten Strahlen wieder zu einem einzelnen Strahl zusammengeführt. Die Photonen können dabei auf zwei verschiedenen Wegen zum Ausgang gelangen. Wir hatten im vorigen Kapitel gesehen, dass man dann die Wahrscheinlichkeitsamplituden addieren muss. Die formale Beschreibung erhalten wir, indem wir den Analysator aus Gl. (2.6) und den umgekehrten Analysator aus Gl. (2.8) hintereinanderschalten. Aus einem Vektor $|\psi \rangle$

Kapitel 2. Zustände und Messungen

wird $\hat{A}_U \hat{A} |\psi\rangle$. Der Operator ist, mit den Polarisationsrichtungen x', y' aus Abb. 2.6:

$$\begin{aligned} \hat{A}_U \hat{A} &= (|x'\rangle\langle x', 1. \text{ Kanal}| + |y'\rangle\langle y', 2. \text{ Kanal}|) \times \\ &\quad (|x', 1. \text{ Kanal}\rangle\langle x'| + |y', 2. \text{ Kanal}\rangle\langle y'|) \\ &= \underline{|x'\rangle\langle x'| + |y'\rangle\langle y'|} = \hat{1}. \end{aligned}$$



und $\langle 1. \text{ Kanal} | 2. \text{ Kanal} \rangle = 0$

Hier haben wir benutzt, dass $|x'\rangle\langle x', 1. \text{ Kanal}| |x', 1. \text{ Kanal}\rangle\langle x'| = |x'\rangle\langle x'|$. Wir sehen: der Analysatorkreis entspricht dem Einheitsoperator! In dieser Formulierung ist das Ergebnis des Experiments in Abb. 2.7 einleuchtend: der einlaufende x -polarisierte Strahl wird durch den Analysatorkreis unverändert weitergegeben, bleibt daher in x -Richtung polarisiert. Dieses Ergebnis unterscheidet sich von dem bei klassischen Teilchen, denn es entsteht durch die Addition der Wahrscheinlichkeitsamplituden.

8.3.2021
9.3.2023

Wenn wir zwei Projektionsoperatoren zu verschiedenen Richtungen hintereinanderschalten, z.B. Polarisationsfilter oder Analysatoren zu verschiedenen Richtungen, erhalten wir einen Operator, der kein Projektionsoperator mehr ist:

$$\hat{P}_{x'} \hat{P}_x = |x'\rangle\langle x'| |x\rangle\langle x| = |x'\rangle \underbrace{\langle x'|x\rangle}_{\text{Zahl}} \underbrace{\langle x|}_{\text{Zahl}} \underbrace{\langle x|}_{\text{Operator}} \quad (2.9)$$

Er projiziert zunächst auf die $|x\rangle$ -Richtung, erzeugt aber einen Vektor in Richtung $|x'\rangle$. Schon ohne den Faktor $\langle x'|x\rangle$ ist dieser Operator bei $x \neq x'$ nicht idempotent:

$$|x'\rangle\langle x| |x'\rangle\langle x| = \underbrace{\langle x|x'\rangle}_{\neq 1} |x'\rangle\langle x|.$$

Offensichtlich ist in Gl. (2.9) die Reihenfolge der Projektionen wichtig:

$$\hat{P}_{x'} \hat{P}_x \neq \hat{P}_x \hat{P}_{x'}.$$

Im einen Fall wird ein Vektor in Richtung $|x\rangle$ erzeugt, im anderen Fall ein Vektor in Richtung $|x'\rangle$. ~~Die beiden~~

Unterschiedliche Projektionsoperatoren kommutieren nicht!

2.3. Algebraische Beschreibung

2.3.1 Verallgemeinerungen und Postulate

Bei Systemen mit mehr unabhängigen diskreten Einstellmöglichkeiten lässt sich die bisherige Diskussion leicht verallgemeinern.³

Ein Analysator hat dann N Ausgangskanäle, wie in Abb. 2.8 skizziert. Wenn die einlaufenden Teilchen für jeden beliebigen einlaufenden Zu-

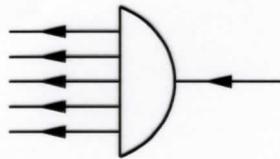


Abbildung 2.8: Analysator mit N Ausgängen.

stand wieder alle in jeweils genau einen der Ausgangskanäle gelangen, wenn somit keine Intensität verloren geht, nennt man die N Zustände vollständig. Beispiel: Pixel auf einem CCD Chip: die Kanäle entsprechen dann den Auftreff-Orten von Photonen.

Der zugehörige Hilbertraum ist dann N -dimensional, mit orthonormalen Basisvektoren $|e_j\rangle, j = 1 \dots N$, die zu den Zuständen an den Ausgängen des Analysators korrespondieren. Ein allgemeiner Vektor ist

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |e_i\rangle \quad (2.10)$$

mit komplexen Koeffizienten c_i . Aus einem Analysator und seiner Umkehrung kann man wieder einen Einheitsoperator bauen, mathematisch ausgedrückt durch die Summe

$$\hat{\mathbb{1}} = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle\langle e_i|. \quad (2.11)$$

Dies korrespondiert dazu, dass keines der einlaufenden Teilchen verloren geht.

³Mathematisch schwieriger wird dies bei Systemen, die durch kontinuierliche Messgrößen wie zum Beispiel einen Ort beschrieben werden müssen. Dies werden wir später diskutieren.

kontin.

Blockiert man alle Ausgangskanäle eines Analysators bis auf den Kanal j , so erhält man einen Polarisator, mathematisch den Projektionsoperator

$$\hat{P}_j = |e_j\rangle\langle e_j| .$$

Das einlaufende Ensemble ist genau dann im "Zustand j ", wenn die auslaufende Intensität hinter diesem Projektor gleich der einlaufenden Intensität ist.

Wir assoziieren nun zum Kanal j des Analysators einen Messwert a_j für die durch den Analysator gemessene Größe, z.B. einen Drehimpuls. Die Messwerte a_j seien alle voneinander verschieden. Jede Einzelmessung ergibt genau einen der Werte a_j , nie eine Mischung, da jedes einlaufende Teilchen durch nur einen Kanal auslaufen kann.

oder einen Ort

Die Wahrscheinlichkeit, bei einem beliebigen einlaufenden Zustand den Messwert a_j zu erhalten, ist per Postulat (s. Gl. (2.4))

WAHRSCHEINLICHKEIT FÜR EIN MESSERGEBNIS a_j IM ZUSTAND $|\psi\rangle$

$$W(a_j|\psi) = |\langle e_j|\psi\rangle|^2 \quad (2.12)$$

Man beachte: diese Wahrscheinlichkeit ändert sich wegen des Betragsquadrats nicht, wenn man $|\psi\rangle$ mit einem Phasenfaktor $e^{i\alpha}$ multipliziert.

Aus den Wahrscheinlichkeiten bei der Messung mit einem Analysator erhalten wir auch den Erwartungswert der Messwerte:

Mittelwert
 ⇒ Stichprobenmittelwert
 ∞ oft

$$\text{Erwartungswert} = \sum_{\text{Messwerte}} \text{Messwert} \times \text{Häufigkeit}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \sum_j a_j |\langle e_j|\psi\rangle|^2 &= \sum_j a_j \langle \psi|e_j\rangle \langle e_j|\psi\rangle \\ &= \langle \psi| \underbrace{\sum_j a_j |e_j\rangle\langle e_j|}_{\hat{A}} |\psi\rangle = \langle \psi| \hat{A} |\psi\rangle \end{aligned}$$

Erwartungswert

(Im Skript noch zu korrigieren !)

2.3. Algebraische Beschreibung

13.3.2023

Der vorletzte Ausdruck ist (bei reellen a_j) die sogenannte „Spektraldarstellung“ eines hermiteschen Operators \hat{A} (s. Anhang). Er hängt offenbar mit der gemessenen physikalischen Größe zusammen.

Wir haben schon gesehen, dass jede Messung in der formalen Beschreibung einem Operator entspricht, der auf einen Zustand wirkt und einen neuen Zustand ergibt.

In der Tat zeigt sich allgemein die Gültigkeit des folgenden **Postulats**:

Jede physikalische „Observable“ (Energie, Ort, Drehimpuls, ...) korrespondiert formal zu einem hermiteschen Operator

$$\hat{A} = \sum_j a_j |a_j\rangle\langle a_j| \quad (2.13)$$

Benennung der Zustände jetzt $|a_j\rangle$ statt $|e_j\rangle$

mit reellen Eigenwerten a_j und orthonormalen Eigenvektoren $|a_j\rangle$.

$$\text{Rechnung: } \hat{A}|a_i\rangle = \sum_j a_j |a_j\rangle \underbrace{\langle a_j|a_i\rangle}_{\delta_{ij}} = a_i |a_i\rangle$$

Die Messung der Observablen entspricht der Anwendung eines Analysators mit Ausgangskanälen für die Zustände $|a_j\rangle$. Jede Einzelmessung korrespondiert zu einer Projektion $|a_j\rangle\langle a_j|$ auf einen der Eigenzustände des Operators (entsprechend einem Kanal des Analysators, durch den das gemessene Teilchen austritt) und liefert den Messwert a_j . Nur die Eigenwerte des Operators kommen als Einzelmesswerte vor! Der obige Operator enthält die Projektion auf die zur Observablen gehörigen Basiszustände (z.B. $|x\rangle, |y\rangle$ bei der Polarisation), zusammen mit der Information über die zugehörigen Messwerte.

Wir fassen die bisherigen Erkenntnisse und Postulate noch einmal zusammen.

POSTULATE

- Jede physikalische Observable korrespondiert zu einem hermiteschen Operator \hat{A} . Er hat (in einem endlichen oder abzählbar unendlichen Hilbertraum) die Spektraldarstellung (mit reellen Eigenwerten)

$$\hat{A} = \sum_j a_j |a_j\rangle\langle a_j| \quad (\text{Basisvektoren } |a_j\rangle \text{ auf 1 normiert}) \quad (2.14)$$

- Jede Einzelmessung der Observablen ergibt einen der Eigenwerte a_j als Ergebnis. Ihre Gesamtheit nennt man das Spektrum des Operators.
- Das Ensemble der Teilchen mit Messergebnis a_j ist nach der Messung im zugehörigen Eigenzustand $|a_j\rangle$ des Messoperators.
- Die Wahrscheinlichkeit, den Eigenzustand $|a_j\rangle$ zu erhalten, ist bei einem Ensemble im ursprünglichen reinen Zustand $|\psi\rangle$

$$W = |\langle a_j | \psi \rangle|^2 \quad (\text{bei normierten Zuständen } |\psi\rangle) \quad (2.15)$$

Wenn der Eigenwert a_j nicht entartet ist, dann ist dies auch die Wahrscheinlichkeit für den Messwert a_j , ansonsten ist die Summe von W über die entarteten Eigenvektoren zu bilden.

- Der Erwartungswert der Messungen der Observablen in einem reinen Zustand $|\psi\rangle$ ergibt sich daraus zu

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (2.16)$$

Zustand $|\psi\rangle$ normiert

Der Zustandsvektor $|\psi\rangle$ selber ist nicht beobachtbar, sondern es sind dies nur Einzel-Messergebnisse, ihre Wahrscheinlichkeiten und ihre Mittelwerte. Diese physikalischen Werte ändern sich nicht, wenn man $|\psi\rangle$ mit einem Phasenfaktor $e^{i\alpha}$ multipliziert. Der Zustandsvektor eines Gesamtsystems ist daher nur bis auf eine Phase bestimmt. Man beachte aber: bei Teilsystemen, die miteinander interferieren können, ist ihre relative Phase wichtig, denn sie beeinflusst die Interferenz.

$$|\psi\rangle \mapsto e^{i\alpha} |\psi\rangle$$

35

$$\Rightarrow \langle \psi | \mapsto e^{-i\alpha} \langle \psi |$$

$$\Rightarrow \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \text{ unverändert}$$



2.4 Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

Es gibt zwei Klassen von elementaren Teilchen, die sich in ihrem intrinsischen Drehimpuls, dem sogenannten „Spin“ (s.u.) unterscheiden. Ein kurzer Ausflug:

Bosonen, insbesondere das Photon, haben einen Spin, der ein ganzzahliges Vielfaches der Einheit \hbar ist. Beim Photon ist der Spin genau \hbar . In einem Quantenzustand können sich beliebig viele elementare Bosonen befinden. Bosonen sind Teilchen, die Wechselwirkung vermitteln (im Sinne der Quantenfeldtheorie). Bei Photonen ist dies die elektromagnetische Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen. Weitere elementare Bosonen mit Spin \hbar sind die Vermittler der starken Wechselwirkung (Gluonen) und der elektroschwachen Wechselwirkung (Z- und W-Bosonen). Das Graviton besitzt Spin $2\hbar$.

Elementare Fermionen, insbesondere Elektronen, haben den Spin $S = \hbar/2$. Für diese Teilchen gilt das Pauli-Prinzip: In jedem Quantenzustand kann sich nur höchstens eines von mehreren gleichartigen (d.h. ununterscheidbaren) Fermionen befinden. Fermionen sind die Bausteine der Materie. Weitere elementare Fermionen sind Quarks, Neutrinos, und schwerere Varianten des Elektrons (Myon und Tau-Lepton).

Alle anderen Teilchen sind aus den elementaren Bosonen und Fermionen zusammengesetzt, wie z.B. Protonen oder Atome. Die zusammengesetzten Teilchen können auch höhere Spins besitzen, wie z.B. $S = \frac{3}{2}\hbar$. Wenn dieser Spin halbzahlig ist, sind die zusammengesetzten Teilchen Fermionen, für die das Pauli-Prinzip gilt. Bei ganzzahligem Spin nennt man auch die zusammengesetzten Teilchen „Bosonen“. 

2.4.1 Das Stern-Gerlach Experiment

Das Stern-Gerlach-Experiment ähnelt den Polarisationsexperimenten bei Photonen. Es wurde ursprünglich von O. Stern und W. Gerlach im Jahre 1922 durchgeführt. Sie schickten einen Strahl von Silber-Atomen in ein inhomogenes Magnetfeld und erhielten ein überraschendes Ergebnis. Das Experiment ist auch mit anderen Atomen und sogar mit Neutronen durchgeführt worden.

Zunächst betrachten wir den Ausdruck für die Energie eines magnetischen Momentes in einem Magnetfeld

$$\underline{E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}} \quad (2.17)$$

Ein geladenes klassisches Teilchen, das sich dreht oder auf einer Kreisbahn läuft, erzeugt ein magnetisches Moment

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2m} \cdot \vec{L} \quad (2.18)$$

\vec{L} ist der Bahndrehimpuls, q die Ladung und m die Masse des Teilchens. Diese Beziehung ist nur dann richtig, wenn die Massenverteilung und die Ladungsverteilung des klassischen Teilchens identisch sind. Ist dies nicht der Fall, so muss noch ein Faktor berücksichtigt werden, das gyromagnetische Verhältnis g .

Elementare Teilchen können aber, obwohl sie punktförmig sind, auch einen intrinsichen Drehimpuls haben, den Spin. Für ein Teilchen mit Spin \vec{S} und ohne Bahndrehimpuls wird Gl. (2.18) zu

$$\underline{\vec{\mu} = g \cdot \frac{q}{2m} \cdot \vec{S}} \quad (2.19)$$

Man findet experimentell $g^{Elektron} \approx 2.0023$. Es wurde versucht, aus dem g -Faktor Rückschlüsse auf eine effektive Massen- und Ladungsverteilung eines klassischen rotierenden Objektes zu schließen, und so den Spin ebenfalls als Bahndrehimpuls zu deuten. Diese Versuche waren jedoch erfolglos. Der Spin ist kein Drehimpuls eines „rotierenden Objekts“! Die richtige Erklärung des Spins als internem Freiheitsgrad des punktförmigen Elektrons gelang Dirac, ausgehend von der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung, mit der Dirac-Gleichung.

Auch zusammengesetzte Teilchen haben einen Spin, z.B. $S = \hbar/2$ bei Proton und Neutron, wobei die magnetischen Momente durch die komplizierten internen Wechselwirkungen bestimmt werden, mit den experimentellen Werten $g^{Proton} \approx 5.5856$ und $g^{Neutron} \approx -3.8264$.

Aus der Energie E (Gl. (2.17)) folgt die Kraft, die auf ein elektrisch neutrales Atom (z.B. die Silber-Atome im Stern-Gerlach Versuch) aufgrund des

2.4. Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

magnetischen Momentes ausgeübt wird⁴:

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} E \quad \leftarrow \text{Energie}$$

$$F_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\sum_{\beta=1}^3 \mu_\beta B_\beta \right) = \sum_{\beta=1}^3 \mu_\beta \cdot \frac{\partial}{\partial x_\alpha} B_\beta \quad (2.20)$$

Daher tritt nur in einem inhomogenen Magnetfeld ($\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \vec{B} \neq 0$) eine Kraft auf.

Für den Stern-Gerlach Versuch wird die in Abbildung (2.9) und (2.10) schematisch skizzierte Anordnung verwendet. Wir legen die Inhomogeni-

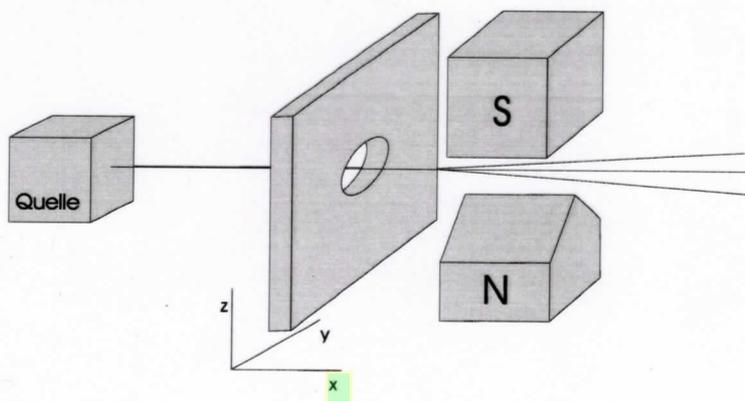


Abbildung 2.9: Aufbau des Stern-Gerlach-Experiments.

tät des Magnetfeldes in z-Richtung. Um das Experiment quantitativ analysieren zu können, machen wir einige Idealisierungen. Wir nehmen an, dass das Magnetfeld außerhalb der Lücke zwischen den Polen verschwindet. Außerdem soll $|B_x| \ll |B_z|$ und $|B_y| \ll |B_z|$ sein und wir verlangen weiter, dass der Feldgradient zwischen den Polschuhen konstant in z-Richtung zeigt. Die Komponenten des magnetischen Feldes sind dann im Idealfall $B_x \approx B_y \approx 0$, $B_z = z B'$, wobei B' der Feldgradient ist.⁵ Dar-

⁴Auf geladene Teilchen wirkt zusätzlich die Lorentz-Kraft.

⁵Man beachte, dass $B_x = B_y = 0$ wegen $\vec{\nabla} \vec{B} = 0$ nicht möglich ist, aber man kann zumindest erreichen, dass diese Komponenten des Feldes gegenüber der z-Komponente vernachlässigbar sind. In diesem Fall werden die Komponenten des magnetischen Moments in der xy-Ebene sehr schnell um die z-Achse präzedieren und die Effekte der x-y-Komponenten sich zu Null mitteln.

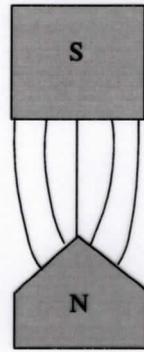


Abbildung 2.10: Verlauf der magnetischen Feldlinien beim Stern-Gerlach-Versuch

aus folgt

$$F_z = \mu_z \cdot B'$$

wobei B' eine vom Magneten vorgegebene Konstante ist. Die z-Komponente μ_z des magnetischen Momentes der einzelnen Silberatome kann hingegen variieren. Die Teilchen werden daher im Bereich des Magneten entsprechend der Ausrichtung ihres magnetischen Momentes in z-Richtung abgelenkt.

Die magnetischen Momente der Silber-Atome, die aus der Quelle kommen, sind statistisch verteilt. Klassisch sollte das magnetische Moment in z-Richtung $\mu_z = |\mu| \cdot \cos \theta$ kontinuierlich alle Werte zwischen $-|\mu|$ und $+|\mu|$ annehmen. Wir messen nun die Anzahl der auftreffenden Silber-Atome in Abhängigkeit von der Ablenkung z . Das Experiment sollte aus Sicht der klassischen Physik eine kontinuierliche Verteilung liefern, wie sie in Abbildung (2.11) links skizziert ist.

Was Stern und Gerlach aber gefunden haben, ist in Abbildung (2.11) rechts dargestellt. Man findet lediglich zwei Häufungspunkte, d.h. es kommen nur zwei Werte für die Ablenkungen vor! Dieses Messergebnis kann nur so gedeutet werden, dass das magnetische Moment im Magnetfeld nur in zwei Einstellungen vorliegen kann. Die dazugehörigen Werte des intrinsischen Drehimpulses (*Spins*) sind $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$. Diese Einstellungen nennen wir *Spin up* und *Spin down*, mit Bezug auf die Richtung des Magnetfeldes.

Messergebnis!

Dieses Ergebnis ist analog zu den beiden linearen Polarisationsrichtungen, die ein Photon haben kann.

2.4. Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

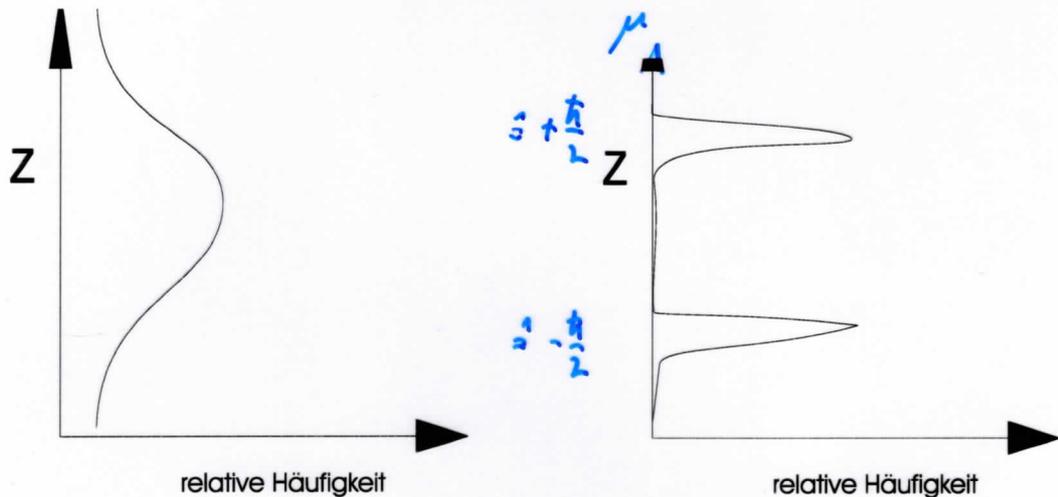


Abbildung 2.11: Skizze der klassisch erwarteten Häufigkeitsverteilung (links) und der tatsächlich beobachteten Häufigkeitsverteilung für μ_z .

Wenn der Stern-Gerlach-Apparat in irgendeine andere Raumrichtung zeigt, findet man ebenfalls nur zwei Ablenkwinkel derselben Größe! Für jede beliebige Richtung bestehen deshalb nur genau zwei mögliche Einstellungen des magnetischen Momentes im jeweiligen Magnetfeld!

Um den Spin genauer zu untersuchen, werden wir vier Stern-Gerlach-Experimente besprechen, die auf Feynman zurückgehen und zu den Polarisationsexperimenten analog sind, die wir bei Photonen besprochen haben.

Experiment 1

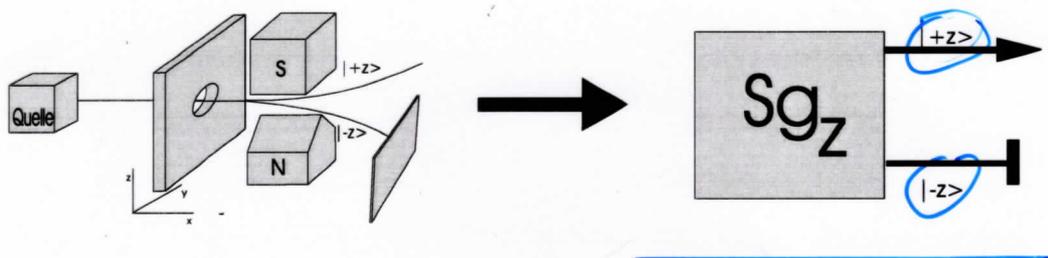


Abbildung 2.12: Auswahl einer Spinrichtung: symbolische Darstellung.

Um die Experimente leichter beschreiben zu können, verwenden wir für einen Stern-Gerlach-Apparat (Abb.2.9) mit Inhomogenität in x (y , z)-Richtung

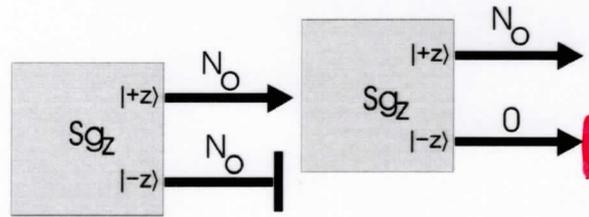


Abbildung 2.13: Zwei SG_z Apparate hintereinander.

die Abkürzung SG_x (SG_y, SG_z).⁶

Wir stellen jetzt hinter SG_z eine Blende auf, die z.B. den unteren Teilstrahl ausblendet. In Abbildung (2.12) haben wir ein schematisches Symbol für einen solchen Stern-Gerlach-Apparat eingeführt.

Nun stellen wir hinter den ersten SG_z , der den unteren Teilstrahl ausblendet, einen zweiten SG_z (siehe Abbildung (2.13)), mit derselben Blende. Wir finden, dass alle Teilchen, die durch den ersten SG_z gegangen sind, auch hinter dem zweiten SG_z nachgewiesen werden. Wenn wir im zweiten Apparat statt des unteren den oberen Weg ausblenden, kommen keine Teilchen mehr durch. Das Teilchenensemble am oberen Ausgang des ersten SG_z ist offenbar in einem Zustand präpariert, den wir mit dem zweiten SG_z überprüfen können und der zum Zustand am unteren Ausgang orthogonal ist. Wir nennen den Zustand am oberen Ausgang $|+z\rangle$, weil die z -Komponente ihres Spins den Wert $+\frac{\hbar}{2}$ hat, und den Zustand am unteren Ausgang $|-z\rangle$.

Das beschriebene Experiment zeigt, dass die Zustände $|+z\rangle$ und $|-z\rangle$ zueinander orthonormal sind:

$$\begin{cases} \langle +z | +z \rangle = \langle -z | -z \rangle = 1 \\ \langle -z | +z \rangle = \langle +z | -z \rangle = 0 \end{cases} \quad (2.21)$$

(Zunächst sind nur die Wahrscheinlichkeiten bekannt, d.h. die Betragsquadrate $|\langle \pm z | \pm z \rangle|^2$. Weil aber das Skalarprodukt $\langle a | a \rangle$ eines Vektors mit sich selbst reell ist, tritt bei den Amplituden in der ersten Zeile von Gl. (2.21) kein Phasenfaktor auf.)

Der obere Kanal des SG_z Apparates erzeugt einen Zustand in $|+z\rangle$ -Richtung.

⁶In Flugrichtung x muss man das Stern-Gerlach Experiment durch eine andere Anordnung zur Messung des magnetischen Moments ersetzen. Um die Notation zu vereinfachen, werden wir dennoch von einem „Stern-Gerlach“ Experiment sprechen.

2.4. Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

Er entspricht daher dem Projektionsoperator $|+z\rangle\langle+z|$, und der untere Kanal dem Projektionsoperator $|-z\rangle\langle-z|$,

Die analogen Ergebnisse erhalten wir, wenn wir im Experiment die z -Richtung durch die x - oder die y -Richtung ersetzen: die entsprechenden Apparate projizieren auf Zustände $|+x\rangle$ und $|-x\rangle$ bzw. auf $|+y\rangle$ und $|-y\rangle$.

Experiment 2

Wir verwenden wieder SG_z als Filter, um ein Ensemble im Zustand $|+z\rangle$ zu präparieren. Im Anschluss platzieren wir einen SG_x -Apparat (siehe Abbildung (2.14)). Das Experiment ergibt: Die Hälfte der Teilchen, die in SG_x

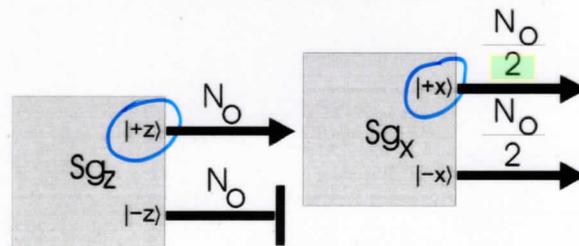


Abbildung 2.14: SG_z und SG_x Apparat hintereinander.

einfallen, liefern den Messwert $S_x = +\frac{\hbar}{2}$, und die Hälfte $S_x = -\frac{\hbar}{2}$. Der $(+x)$ -Zustand und der $(-x)$ -Zustand kommen also gleich häufig vor. Das gleiche Resultat erhalten wir für alle anderen Kombinationen unterschiedlicher Spinrichtungen. Die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsamplituden müssen deshalb

$$\begin{cases} |\langle \pm x | \pm z \rangle|^2 = 1/2 \\ |\langle \pm y | \pm z \rangle|^2 = 1/2 \\ |\langle \pm x | \pm y \rangle|^2 = 1/2 \end{cases} \quad (2.22)$$

erfüllen. Dafür werden wir einen komplexen Vektorraum benötigen.

Bei Photonen haben wir dieselben Wahrscheinlichkeiten von $\frac{1}{2}$ gefunden, wenn der Winkel zwischen zwei Polarisationsrichtungen x und x' 45 Grad betrug. Bei Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen ist der entsprechende Winkel 90 Grad, z.B. zwischen x und z ! Zustände zu um 90 Grad verdrehten Richtungen des Spins stehen bei Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen nicht orthogonal aufeinander!

Die algebraische Beschreibung für den oberen Ausgang des 2. Experiments in Abb. (2.14) ist S_{G_x}

$$\underbrace{|+x\rangle}_{\text{Zustand}} \underbrace{\langle +x|}_{\text{Zahl}} | + z \rangle = \underbrace{|+x\rangle \langle +x|}_{\text{Projektion}} \underbrace{|+z\rangle}_{\text{Zustand nach } SG_z}$$

Experiment 3

Wir bringen jetzt hinter die Versuchsanordnung vom zweiten Experiment eine Blende an, die Zustände mit $(+x)$ herausfiltert. Im Anschluss daran platzieren wir wieder einen SG_z , um die Spinverteilung in z-Richtung zu messen (siehe Abbildung (2.15)). Resultat: Die Hälfte der Teilchen, die in

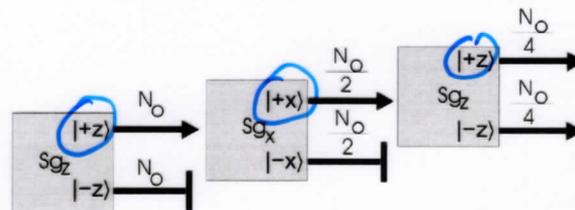


Abbildung 2.15: SG_z , SG_x und SG_z Apparate hintereinander.

den dritten Stern-Gerlach-Apparat hineingehen, liefert den Messwert $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ und die Hälfte liefert $S_z = -\frac{\hbar}{2}$.

Der zweite Apparat, der ein Ensemble in $|+x\rangle$ -Richtung präpariert, hat somit sämtliche Information über die ursprüngliche $|+z\rangle$ -Polarisation vernichtet. Wir schließen, dass es zusätzlich zu einer Polarisation in $\pm x$ -Richtung am Ausgang des zweiten Apparates keine Information über eine $\pm z$ -Polarisation gibt. Daher ist, wie schon zu vermuten war, der Raum der Spin-Polarisationen nur zweidimensional, obwohl Polarisationen bezüglich dreier Koordinatenrichtungen x, y, z möglich sind! Vollständige orthonormale Basissysteme sind daher

$$\{ |+x\rangle, |-x\rangle \}, \quad \text{oder} \quad \{ |+y\rangle, |-y\rangle \}, \quad \text{oder} \quad \{ |+z\rangle, |-z\rangle \}.$$

Wie wir noch sehen werden, ist auch $\{ |+ \vec{n}\rangle, |- \vec{n}\rangle \}$ bezüglich einer beliebigen Richtung \vec{n} ein solches System.

Wegen der Vollständigkeit der Basis sollten auch die entsprechenden Vollständigkeitsrelationen wie

$$\hat{1} = |+x\rangle \langle +x| + |-x\rangle \langle -x| \tag{2.23}$$

2.4. Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

gelten. Dies sehen wir im nächsten Experiment tatsächlich.

Experiment 4

Wir bauen einen Analysatorkreis auf, der in Abbildung (2.16) skizziert ist. Dieser Apparat ist so konstruiert, dass die divergenten Teilchenstrahlen

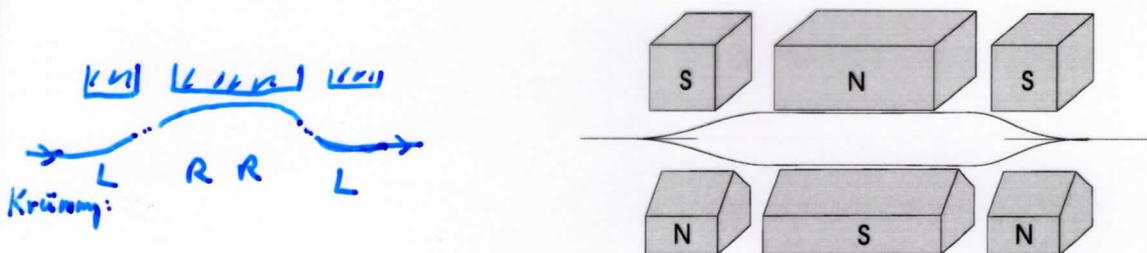


Abbildung 2.16: *Analysatorkreis für ein Stern-Gerlach-Experiment. (Die inhomogenen Magnetfelder bewirken jeweils eine Krümmung der Bahn; ein gerader Bereich tritt, anders als in der Abbildung, nicht auf.)*

wieder zusammengeführt werden.⁷ Wenn man intern keine weiteren Blenden anbringt, sollte dieser Apparat wie der Einheitsoperator wirken.

Wir können mit diesem Apparat dieselben Experimente wie mit dem einfachen Stern-Gerlach-Apparat durchführen. Dazu tauschen wir im Experi-

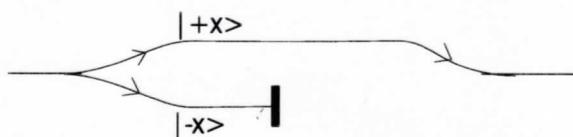


Abbildung 2.17: *Modifiziertes Stern-Gerlach-Experiment mit Blende.*

ment 3 den mittleren Apparat SG_x gegen einen Analysatorkreis mit Inhomogenität in x -Richtung aus. Zunächst blenden wir im mittleren Teil einen der beiden Teilstrahlen aus (siehe Abbildung (2.17)). Wir finden das alte

⁷Als Stern-Gerlach Experiment ist dieser Apparat nicht realisierbar, wohl aber als eine äquivalente Anordnung in einem Interferometer.

Ergebnis: wenn wir den $(-x)$ -Zustand ausblenden, liefern 50 % der Teilchen $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ und 50 % $S_z = -\frac{\hbar}{2}$. Dasselbe gilt, wenn wir $|+x\rangle$ ausblenden.

Wir können aber beide Wege freigegeben. Dann beobachten wir, dass nach dem dritten Apparat alle Teilchen mit $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ herauskommen. Der Analysatorkreis wirkt somit in der Tat wie ein Einheitsoperator, und Gl. (2.23) ist erfüllt! Der Analysatorkreis prägt den Teilchen keine Information bezüglich der x -Richtung auf. Dieses Ergebnis ist völlig analog zum entsprechenden Experiment mit Photonen.

2.4.2 Basisvektoren für Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen

Wir haben aus dem Experiment gelernt, dass der Spin von Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen durch einen zwei-dimensionalen Vektorraum beschrieben wird, mit äquivalenten vollständigen und orthonormalen Basissystemen

$$\{|+x\rangle, |-x\rangle\}, \quad \text{oder} \quad \{|+y\rangle, |-y\rangle\}, \quad \text{oder} \quad \{|+z\rangle, |-z\rangle\}.$$

Aus den beobachteten Wahrscheinlichkeiten können wir auch die Transformationen zwischen den Basissystemen großenteils herleiten. Wir werden $|\pm x\rangle$ bzw. $|\pm y\rangle$ mit Hilfe der Basisvektoren $|\pm z\rangle$ ausdrücken.

Allgemein können wir schreiben

$$\underline{|+x\rangle = c_+ |+z\rangle + c_- |-z\rangle}, \quad \text{mit} \quad c_{\pm} = \langle \pm z | +x \rangle,$$

mit $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$ für die Normierung. Aus dem experimentellen Ergebnis $|\langle \pm x | \pm z \rangle|^2 = \frac{1}{2}$ (Gl. (2.22)) folgt $|c_{\pm}| = \frac{1}{\sqrt{2}}$, also

$$\begin{aligned} c_+ &= \frac{e^{i\delta_+}}{\sqrt{2}} \\ c_- &= \frac{e^{i\delta_-}}{\sqrt{2}} \\ | +x \rangle &= \frac{e^{i\delta_+}}{\sqrt{2}} (| +z \rangle + e^{i\delta} | -z \rangle) \end{aligned} \quad (2.24)$$

wobei δ_{\pm} noch unbekannte Phasen sind und $\delta := \delta_- - \delta_+$.

Genauso folgt aus $|\langle \pm y | \pm z \rangle|^2 = \frac{1}{2}$ (Gl. (2.22)) die Darstellung

$$| +y \rangle = \frac{e^{i\gamma_+}}{\sqrt{2}} (| +z \rangle + e^{i\gamma} | -z \rangle) \quad (2.25)$$

2.4. Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

Nun können wir das Skalarprodukt von $|+x\rangle$ und $|+y\rangle$ bilden:

$$\begin{aligned}\langle +y|+x\rangle &= \frac{e^{-i\gamma_+}e^{i\delta_+}}{2} (\langle +z| + e^{-i\gamma}\langle -z|) (|+z\rangle + e^{i\delta}| -z\rangle) \\ &= \frac{e^{i(\delta_+-\gamma_+)}}{2} (1 + e^{i(\delta-\gamma)}) \\ &\Rightarrow \\ \underline{|\langle +y|+x\rangle|^2} &= \frac{1}{4} |1 + e^{i(\delta-\gamma)}|^2 \\ &= \frac{1}{4} (1 + e^{i(\delta-\gamma)})^* (1 + e^{i(\delta-\gamma)}) \\ &= \frac{1}{2} (1 + \cos(\delta - \gamma))\end{aligned}$$

Um die beobachtete Wahrscheinlichkeitsamplitude $|\langle +y|+x\rangle|^2 = \frac{1}{2}$ zu erhalten, muss $\delta - \gamma = \pm \frac{\pi}{2}$ gelten. Es kann hier noch nicht festgelegt werden, welche Werte δ und γ individuell annehmen. Aus den später behandelten allgemeinen Basistransformationen für Spins wird sich $\delta = 0$ und $\gamma = \frac{\pi}{2}$, sowie $\gamma_+ = \delta_+ = 0$ ergeben. Damit werden die Gleichungen (2.24) bzw. (2.25) zu:

$$|+x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+z\rangle + |-z\rangle) \quad (2.26)$$

$$|+y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+z\rangle + i|-z\rangle) \quad (2.27)$$

Die Orthogonalitätsbeziehungen $\langle -x|+x\rangle = 0$ und $\langle -y|+y\rangle = 0$ legen dann die restlichen Zustände bis auf einen weiteren Phasenfaktor fest, der sich später ebenfalls aus dem Spin-Rotationsoperator ergeben wird.

$$\begin{aligned}|-x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+z\rangle - |-z\rangle) \\ |-y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+z\rangle - i|-z\rangle)\end{aligned}$$

Es ist wichtig zu vermerken, dass die experimentellen Ergebnisse Gl. (2.22) mit rein reellen Zahlen für die Wahrscheinlichkeitsamplituden nicht erklärt werden können. Man benötigt hier zwingend einen zweidimensionalen komplexen Vektorraum.

Kapitel 2. Zustände und Messungen

Wir werden später auch die Spin-Zustände für eine beliebige Quantisierungsrichtung \vec{n} berechnen. Der Vollständigkeit halber seien sie hier schon angegeben. Beide Zustände sind nur bis auf jeweils eine Phase eindeutig.

SPIN-ZUSTÄNDE IN RICHTUNG \vec{n}

$$\begin{aligned} |+\vec{n}\rangle &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |+\zeta\rangle + e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |-\zeta\rangle \\ |-\vec{n}\rangle &= \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |+\zeta\rangle - e^{i\varphi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |-\zeta\rangle, \end{aligned} \quad (2.28)$$

wobei θ und φ die Kugelkoordinaten des Einheitsvektors $\vec{n} = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$ sind: θ ist der Winkel zwischen der z -Achse und dem Vektor \vec{n} ; φ ist der Winkel zwischen der x -Achse und der Projektion von \vec{n} auf die xy -Ebene. Mit der Phasenkonvention von Gl. (2.28) gilt $|+\rangle_{-\vec{n}} = |-\rangle_{\vec{n}}$. Die Kurzschreibweise $|+\vec{n}\rangle$ und $|-\vec{n}\rangle$ ist daher gerechtfertigt.

Charakteristisch für Gl. (2.28) ist das Auftreten des halben Winkels $\frac{\theta}{2}$ bei den Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen. !

Wir überprüfen leicht die Spezialfälle für die drei Koordinatenachsen $\vec{n} = \hat{e}_x$, $\vec{n} = \hat{e}_y$, und $\vec{n} = \hat{e}_z$. Um die übliche Phasenkonvention für $|-\zeta\rangle$ zu reproduzieren, muss man hierbei für die z -Achse $\varphi = \pi$ wählen.

Richtung n	θ	φ	$ +n\rangle$	$ -n\rangle$
x	$\frac{\pi}{2}$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(+\zeta\rangle + -\zeta\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(+\zeta\rangle - -\zeta\rangle)$
y	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(+\zeta\rangle + i -\zeta\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(+\zeta\rangle - i -\zeta\rangle)$
z	0	π	$ +\zeta\rangle$	$ -\zeta\rangle$

phi = pi ?

15.3.2021

2.4.3 Spin $\frac{1}{2}$ Operatoren

Bei Messung des Spins in den Richtungen x, y, z haben wir jeweils genau zwei verschiedene Messergebnisse gefunden, nämlich $\pm\frac{\hbar}{2}$. Nach den Postulaten in Abschnitt 2.3.1 entsprechen diesen Messungen Spin-Operatoren,

2.4. Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

welche auf die jeweils erzeugten Zustände projizieren und die Messwerte als Eigenwerte haben. Bei Messung von S_z zum Beispiel sind die projizierten Zustände $|\pm z\rangle$. Die allgemeine Darstellung in Abschnitt 2.3.1 war die Spektraldarstellung

$$\hat{A} = \sum_j a_j |a_j\rangle\langle a_j| .$$

Die Spin-Operatoren können wir daher sofort angeben:

SPIN-OPERATOREN

$$\begin{aligned}\hat{S}_x &= \frac{\hbar}{2} \left(| + x \rangle \langle + x | - | - x \rangle \langle - x | \right) \\ \hat{S}_y &= \frac{\hbar}{2} \left(| + y \rangle \langle + y | - | - y \rangle \langle - y | \right) \\ \hat{S}_z &= \frac{\hbar}{2} \left(| + z \rangle \langle + z | - | - z \rangle \langle - z | \right) .\end{aligned} \tag{2.29}$$

Wir können den Spin-Operator auch gleich allgemein für eine beliebige Richtung \vec{n} schreiben:

$$\hat{S}_{\vec{n}} = \frac{\hbar}{2} | + \vec{n} \rangle \langle + \vec{n} | + \left(-\frac{\hbar}{2} \right) | - \vec{n} \rangle \langle - \vec{n} | . \tag{2.30}$$

Da die Eigenwerte $\pm \frac{\hbar}{2}$ reell sind, sind die Spin-Operatoren hermitesch.

Darstellung in der z -Basis

Wir berechnen nun die Darstellungen dieser Operatoren in der S_z -Basis $|\pm z\rangle$. Um die Notation zu vereinfachen, werden wir (nur für diese Rechnung) die Vektoren $| + z \rangle$ und $| - z \rangle$ mit $|sz\rangle$ bezeichnen, $s = \pm 1$. Die Eigenwertgleichung für \hat{S}_z ist dann

$$\hat{S}_z |sz\rangle = s \frac{\hbar}{2} |sz\rangle , \quad \text{mit } |sz\rangle \equiv \begin{cases} | + z \rangle & \text{für } s = +1 \\ | - z \rangle & \text{für } s = -1 . \end{cases}$$

Die Matrixelemente dieses Operators in der z-Basis sind

$$\delta_{ij} = \langle e_i | \hat{\sigma}^z | e_j \rangle$$

$$\langle s'z | \hat{S}_z | sz \rangle = s \frac{\hbar}{2} \langle s'z | sz \rangle = s \frac{\hbar}{2} \delta_{ss'}$$

Die Matrixdarstellung des Operators \hat{S}_z in der $|\pm z\rangle$ -Basis lautet somit

$$\hat{S}_z \rightarrow \begin{array}{c} \begin{array}{c|cc} & |+\rangle & |-\rangle \\ \hline s \backslash s' & +1 & -1 \\ \hline |+\rangle & +1 & +\frac{\hbar}{2} & 0 \\ |-\rangle & -1 & 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{array} \end{array} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Der **Pfeil** soll dafür stehen, dass der Operator in der gewählten $|\pm z\rangle$ -Basis in die angegebene Matrix übergeht. (Operator und Matrix sind nicht das Gleiche!)

Analog erhalten wir aus der Spektraldarstellung von \hat{S}_x und der Darstellung der Zustände $|\pm x\rangle$ in der z-Basis

$$|\pm x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+z\rangle \pm |-z\rangle)$$

(woraus man direkt z.B. $\langle -x | -z \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ abliest) die Matrixelemente in der z-Basis:

$$\begin{aligned} \langle s'z | \hat{S}_x | sz \rangle &= \frac{\hbar}{2} \langle s'z | (|+x\rangle \langle +x| - |-x\rangle \langle -x|) |sz\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} (\langle s'z | +x \rangle \langle +x | sz \rangle - \langle s'z | -x \rangle \langle -x | sz \rangle) \\ &= \frac{\hbar}{2} (\langle s'z | +x \rangle \langle sz | +x \rangle^* - \langle s'z | -x \rangle \langle sz | -x \rangle^*) \end{aligned}$$

$$=$$

	s	+1 : $ +\rangle$	-1 : $ -\rangle$
s' \	+1	$\langle +z +x \rangle \langle +z +x \rangle^* - \langle +z -x \rangle \langle +z -x \rangle^*$	$\langle +z +x \rangle \langle -z +x \rangle^* - \langle +z -x \rangle \langle -z -x \rangle^*$
$ +\rangle$	-1	$\langle -z +x \rangle \langle +z +x \rangle^* - \langle -z -x \rangle \langle +z -x \rangle^*$	$\langle -z +x \rangle \langle -z +x \rangle^* - \langle -z -x \rangle \langle -z -x \rangle^*$
$ -\rangle$			

2.4. Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \frac{1 \cdot 1^*}{2} - \frac{1 \cdot 1^*}{2} & \frac{1 \cdot 1^*}{2} - \frac{1 \cdot (-1)^*}{2} \\ \frac{1 \cdot 1^*}{2} - \frac{(-1) \cdot 1^*}{2} & \frac{1 \cdot 1^*}{2} - \frac{(-1) \cdot (-1)^*}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Die Matrixdarstellung von \hat{S}_x in der z -Basis ist demnach

$$\hat{S}_x \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Für die y -Komponenten des Spin-Operators erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle s'z | \hat{S}_y | sz \rangle &= \frac{\hbar}{2} \left(\langle s'z | +y \rangle \langle sz | +y \rangle^* - \langle s'z | -y \rangle \langle sz | -y \rangle^* \right) \\ \hat{S}_y &\rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Zusammenfassend finden wir die

DARSTELLUNG DER SPIN- $\frac{1}{2}$ OPERATOREN IN DER $|\pm z\rangle$ -BASIS: PAULI-MATRIZEN

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &\rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \doteq \frac{\hbar}{2} \sigma_x \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_1 \\ \hat{S}_y &\rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} \doteq \frac{\hbar}{2} \sigma_y \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_2 \\ \hat{S}_z &\rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \doteq \frac{\hbar}{2} \sigma_z \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_3 \end{aligned} \quad (2.31)$$

$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ (alternative Namen: $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$) sind die **Pauli-Matrizen**. Wir stellen einige wichtige Eigenschaften zusammen.

EIGENSCHAFTEN DER PAULI-MATRIZEN

$$\sigma_\alpha \cdot \sigma_\beta = \delta_{\alpha\beta} \hat{1} + i \sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma \quad (\text{z.B. } \sigma_x \cdot \sigma_y = i\sigma_z)$$

$$\sigma_\alpha^2 = \hat{1}$$

$$\{\sigma_\alpha, \sigma_\beta\} = 2\delta_{\alpha\beta} \cdot \hat{1}$$

$$[\sigma_\alpha, \sigma_\beta] = 2i \sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma \quad \text{z.B. } [\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad (2.32)$$

$$\sigma_\alpha = \sigma_\alpha^\dagger$$

$$\det(\sigma_\alpha) = -1$$

$$\text{Sp}(\sigma_\alpha) = 0$$

$\{A, B\}$ steht für den Antikommutator $\{A, B\} := AB + BA$, und $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ ist der total antisymmetrische Levi-Civita-Tensor.

LEVI-CIVITA-TENSOR

$$\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = +1$$

$$\varepsilon_{321} = \varepsilon_{213} = \varepsilon_{132} = -1$$

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = 0 \quad \text{wenn zwei oder mehr Indizes gleich sind} \quad (2.33)$$

Er ist invariant gegen zyklische Vertauschung der Indizes: $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = \varepsilon_{\beta\gamma\alpha} = \varepsilon_{\gamma\alpha\beta}$. Die zweite, dritte, und vierte Zeile in Gl. (2.32) folgen direkt aus der ersten Zeile. Das Summenzeichen wird oft weggelassen (Summationskonvention).

In der vierten Zeile von Gl. (2.32) steht der Kommutator der Pauli-Matrizen.

2.4. Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

Daraus folgt der Kommutator der Spin- $\frac{1}{2}$ Matrizen (Notation ohne „Hut“; hier in der z-Basis)

$$[S_\alpha, S_\beta] = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 [\sigma_\alpha, \sigma_\beta] = \frac{\hbar^2}{4} \cdot 2i \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{\hbar}{2} \sigma_\gamma = \underline{i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_\gamma}$$

Weil in endlich-dimensionalen Räumen ein Isomorphismus zwischen den Operatoren und den Darstellungen besteht, gilt die obige Kommutator-Relation in jeder Basis und auch für die Operatoren:

ALGEBRA DER SPIN-OPERATOREN

$$\underline{[\hat{S}_\alpha, \hat{S}_\beta] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{S}_\gamma} \quad \forall \alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3 \quad (2.34)$$

Diese Beziehung gilt für beliebige Drehimpulse, wie wir später sehen werden. Es handelt sich hier um die sogenannte Lie-Algebra der Drehgruppe.

Eine weitere wichtige Beziehung folgt aus $\sigma_\alpha^2 = \hat{1}$:

$$\underline{\hat{S}_\alpha^2 = \frac{\hbar^2}{4} \hat{1}} \quad (2.35)$$

Dies sieht man auch direkt aus der Spektraldarstellung:

$$\hat{S}_n^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 |n\rangle\langle n| + \left(\frac{-\hbar}{2}\right)^2 |-n\rangle\langle -n| = \frac{\hbar^2}{4} (|n\rangle\langle n| + |-n\rangle\langle -n|) = \frac{\hbar^2}{4} \hat{1}.$$

Anmerkung: Zusammen mit der Einheitsmatrix $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ spannen die Pauli-Matrizen den Vektorraum der 2×2 Matrizen auf. Es lässt sich demnach jede 2×2 Matrix als

$$M = a_0 \hat{1} + a_1 \cdot \sigma_x + a_2 \cdot \sigma_y + a_3 \cdot \sigma_z \quad (2.36)$$

mit komplexen Koeffizienten a_i darstellen (s. Übungen). Man kann daher jeden hermiteschen Operator in einem zweidimensionalen komplexen

(Darstellung in einer Basis)

Vektorraum mit Hilfe der Pauli-Matrizen schreiben. Deswegen sind die Pauli-Matrizen und ihre Rechenregeln nicht nur bei Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen wichtig, sondern in jedem quantenmechanischen System mit nur zwei (für die Anwendung relevanten) Zuständen. Beispiele dafür sind Atome, in denen ein Grundzustand und nur ein angeregter Zustand wichtig sind, was etwa bei NMR und beim Laser vorkommt!

Erwartungswerte und Varianz

Mit Hilfe der Spin-Operatoren können wir Erwartungswerte von Messergebnissen ausrechnen. Es sei zum Beispiel ein Ensemble im Zustand $|+x\rangle$ gegeben. Wir messen die z-Komponente des Spins, z.B. mit einem SG_z Stern-Gerlach-Experiment. Die einzelnen Messergebnisse sind $\pm \frac{\hbar}{2}$, nämlich die Eigenwerte von \hat{S}_z . Wenn wir das Experiment mit vielen unabhängigen identisch präparierten Teilchen wiederholen, konvergiert bei zunehmender Zahl von Wiederholungen der Mittelwert aller Messwerte gegen den Erwartungswert. Dieser ist hier Null;

!

$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

$$\langle \hat{S}_z \rangle = \langle x | \hat{S}_z | x \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle x | (|z\rangle\langle z| - |-z\rangle\langle -z|) | x \rangle \quad (2.37)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \underbrace{|\langle x | +z \rangle|^2}_{W(+z|x)} + \left(-\frac{\hbar}{2} \right) \underbrace{|\langle x | -z \rangle|^2}_{W(-z|x)} \quad (2.38)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right) = 0, \quad (2.39)$$

denn im Zustand $|x\rangle$ werden gleich häufig $\frac{\hbar}{2}$ und $-\frac{\hbar}{2}$ gemessen.

Die einzelnen Messwerte streuen um den Erwartungswert. Das Quadrat der Streuung ist die Varianz (Notation üblicherweise ohne Dach):

$$\begin{aligned} \langle (\Delta S_z)^2 \rangle &:= \left\langle \left(\hat{S}_z - \langle \hat{S}_z \rangle \right)^2 \right\rangle = \langle \hat{S}_z^2 \rangle - 2\langle \hat{S}_z \rangle \langle \hat{S}_z \rangle + \langle \hat{S}_z \rangle^2 \\ &\equiv \langle \hat{S}_z^2 \rangle - \langle \hat{S}_z \rangle^2 \end{aligned}$$

Die Varianz vereinfacht sich weiter, weil $\langle \hat{S}_z \rangle = 0$ und $\hat{S}_z^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \hat{1}$

$$(\Delta S_z)^2 = \langle x | \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 \hat{1} | x \rangle = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2.$$

Im Zustand $|+x\rangle$ findet man daher im Mittel den Messwert $\langle \hat{S}_z \rangle = 0$, aber mit einer großen Streuung von $\Delta S_z = \frac{\hbar}{2}$.