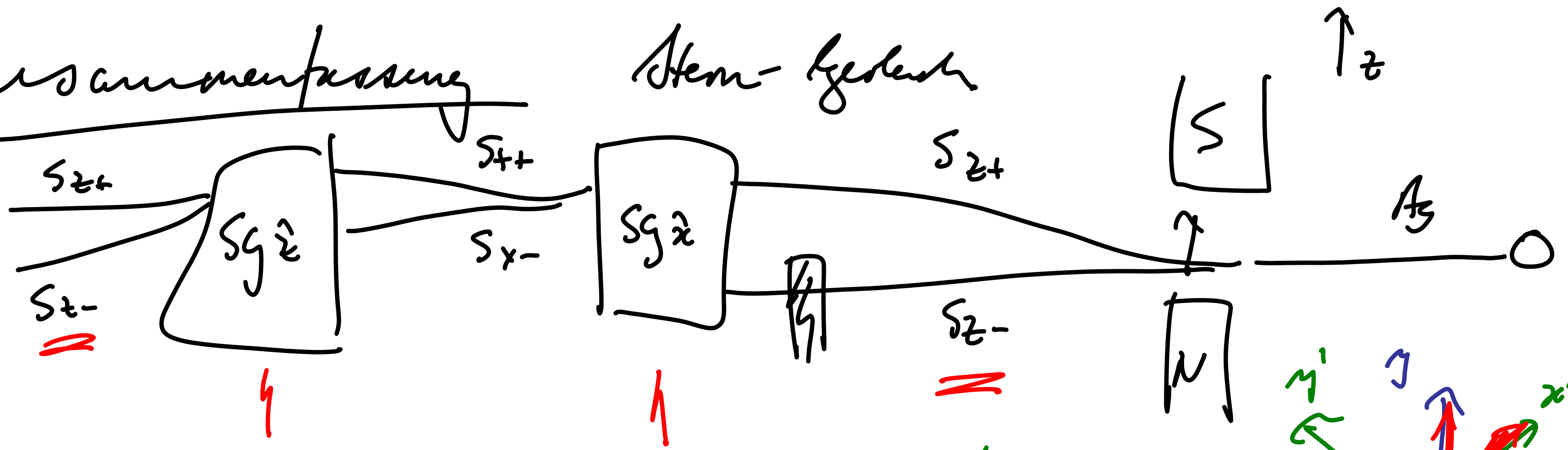
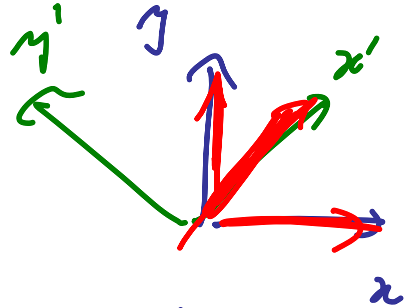
Zusammenfassung

Stern-Gerlach



S_z, S_x nicht gleichzeitig meßbar!



Analogie: polarisiertes Licht:

$S_{z+} \longleftrightarrow E_x \sim \hat x$

$S_{z-} \longleftrightarrow E_y \sim \hat y$

$S_{x+} \longleftrightarrow E_{x'} \sim \hat x + \hat y$

$S_{x-} \longleftrightarrow E_{y'} \sim -\hat x + \hat y$

2-dim Vektorraum:

$|\pm\rangle_z$, $\quad |\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\pm|+\rangle_z + |-\rangle_z\right]$

$$|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle_z \pm i\,|-\rangle_z\right].$$

1.2 Kets, Bras, und Operatoren (S1.2)

Formale Bausteine der Quantentheorie:

Physikalische Zustände werden dargestellt durch Vektoren, und

z.B. Elektron mit Impuls $\vec{p}$ und Spin $S_z = \hbar/2$ $\vec{H}_z$

physikalische Observablen werden dargestellt durch Operatoren

z.B. der Impuls oder Spin eines Elektron

(lineare Transformationen) in einem abstrakten, komplexen Vektorraum.

(Komplexe) Vektorräume: Eigenschaften (G:A.1) [Wiederholung aus linearer Algebra] [und aus P4]

← Griffiths, Anhang A1

Menge von Vektoren $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots\}$ und Skalaren $\{a, b, c, \dots\} \in \mathbb{C}$, geschlossen unter Vektor-Addition und Skalar-Multiplikation:

Vektor-Addition:

Summe ist wieder ein Vektor: $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$

Vektor-Addition ist *kommutitativ*: $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle$

und *assoziativ*: $|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle$

Null-Vektor existiert: $|\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle$, für alle $|\alpha\rangle$

Skalar-Multiplikation:

$a|\alpha\rangle = |\gamma\rangle$

$a(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = a|\alpha\rangle + a|\beta\rangle$

$(a+b)|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle + b|\alpha\rangle$

$a(b|\alpha\rangle) = (ab)|\alpha\rangle$

$0|\alpha\rangle = |0\rangle := 0; \qquad 1|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$

Linearkombination (LiKo): $a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle + \dots$

$|\psi\rangle$ ist *linear unabhängig* von $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots\}$ falls
$|\psi\rangle \neq a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle + \dots$

Basis: Menge von linear unabhängigen Vektoren,
die ganzen Vektorraum aufspannen
(d.h. jedes Element als LiKo darstellen können)

Für n-dimensionalen Vektorraum: Basis: $|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle, \dots, |e_n\rangle$

endlich-dim.

$|\alpha\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle + \dots + a_n|e_n\rangle,\qquad |\beta\rangle = b_1|e_1\rangle + b_2|e_2\rangle + \dots + b_n|e_n\rangle,$

Darstellung als Spaltenvektoren:

$$|\alpha\rangle := \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix},\quad |\beta\rangle := \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix},\quad A|\alpha\rangle + B|\beta\rangle := \begin{pmatrix} Aa_1 + Bb_1 \\ Aa_2 + Bb_2 \\ \vdots \\ Aa_n + Bb_n \end{pmatrix},\quad |0\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

15

Inneres Produkt (G:A.2)

Inneres Produkt oder *Skalarprodukt* von $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ ist komplexe Zahl, $\langle\beta|\alpha\rangle$, mit:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0, \quad \text{und} \quad \langle\alpha|\alpha\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad |\alpha\rangle = |0\rangle$$

$$\langle\alpha|(b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle) = b\langle\alpha|\beta\rangle + c\langle\alpha|\gamma\rangle$$

Norm eines Vektors: $\|\alpha\| \equiv \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle} \geq 0$

normiert: $\|\alpha\| = 1$

Schwarz-Ungleichheit: $|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \leq \langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle$

für *Orthornormale Basis:* $\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$:

Kronecker δ

$$\langle\beta|\alpha\rangle = b_1^* a_1 + b_2^* a_2 + \ldots + b_n^* a_n$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = |a_1|^2 + |a_2|^2 + \ldots + |a_n|^2$$

$$a_i = \langle e_i|\alpha\rangle$$

Basis von nicht-orthonormalen Vektoren kann immer mittels *Gram-Schmidt-Verfahren* orthonormiert werden (siehe Griffiths, Prob. A.4)

Matrizes (G:A.3)

Lineare Transformation: $|\alpha\rangle \mapsto |\alpha'\rangle = \hat{T}|\alpha\rangle$, mit $\hat{T}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a\hat{T}|\alpha\rangle + b\hat{T}|\beta\rangle)$

$|\beta\rangle = \hat{T}|\alpha\rangle$ dargestellt durch *Matrix:*

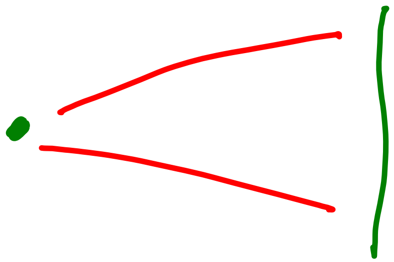
$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \ldots & t_{1n} \\ t_{21} & t_{22} & \ldots & t_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{n1} & t_{n2} & \ldots & t_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

Ket-Raum (nach Dirac)

- $\mathbb{V}_n$ sei n-dimensionaler komplexer Vektorraum
- Dimension n hängt ab vom physikalischen System

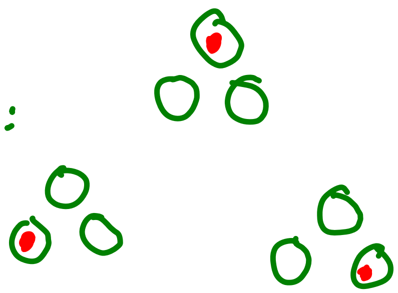
z.B.: • für Spin eines Stern-Gerlach Atoms: zwei mögliche Wege

$n = 2$



• für Elektron auf 3-atomigen Molekül:

$n = 3$



• für Impuls eines freien Elektrons:

kontinuierliches Spektrum

Dimension = nicht-abzählbar unendlich

Mathe-Name für so ein V_∞ : "Hilbert-Raum"

- In QM wird jeder physikalischer Zustand (z.B. Ag-Atom mit Spin $S_z = \hbar/2$)
  dargestellt durch einen "Zustandsvektor" $|\alpha\rangle \in \mathbb{V}_n$
- Dirac's Name für $|\alpha\rangle$: "ket"
- Superpositions-Prinzip: $|\alpha\rangle, \ |\beta\rangle \in \mathbb{V}_n$
  $\Rightarrow a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle \in \mathbb{V}_n$

Physikalische Interpretation:

"Überlagerung zweier physikalischer Zustände ist wieder ein physikalischer Zustand" !! $\boxed{\text{Welleneigenschaft}}$

- Skalar-Multiplikation: $c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c \in \mathbb{V}_n$

"$|\alpha\rangle$ und $c|\alpha\rangle$ stellen denselben Zustand dar"

$\Rightarrow$ nur "Richtung" von $|\alpha\rangle$ ist relevant.

- Observable (z.B. Impuls oder Spin-Komponenten) wird dargestellt durch linearen Operator $A: \mathbb{V}_n \to \mathbb{V}_n$

$$A(|\alpha\rangle) = A|\alpha\rangle$$

- Für "Eigenkets" von A ist $A|\alpha\rangle$ proportional zu $|\alpha\rangle$:

"Eigenwert"

$$A|\alpha_j\rangle = \alpha_j |\alpha_j\rangle$$

"Eigenket"

- "Spektrum" v. A: $\{\alpha_j\}$, Menge aller Eigenwerte

- „Eigenzustand" = physikalische Zustand, der durch Eigenket dargestellt wird.

[aber die Begriffe Eigen<u>ket</u> (math. Begriff) und Eigen<u>zustand</u> (phys. Zustand) werden oft austauschbar benutzt.]

$|+\rangle_z = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad |-\rangle_z = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

Beispiel: Spin ½

$$S_z |+\rangle_z = \frac{\hbar}{2} |+\rangle_z \quad ; \quad S_z |-\rangle_z = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle_z$$

Explizit in Matrix-Darstellung (Seite 12): $S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad ; \quad \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

Analog: $S_x |\pm\rangle_x = \pm \hbar/2 \, |\pm\rangle_x$

Check: $S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$; $|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} = \pm\frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- Axiom: die Eigenkets $\{|\alpha_j\rangle\}$ einer Observablen bilden eine vollständige Basis für $\mathbb{V}_n$.

$\Rightarrow$ jedes $|\alpha\rangle \in \mathbb{V}_n$ kann geschrieben werden als

$$|\alpha\rangle = \sum_j c_{\alpha_j} |\alpha_j\rangle$$

komplexe Koeff. $\in \mathbb{C}$

Beispiel: $|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\pm |+\rangle_z + |-\rangle_z \right)$

Bra-Raum

- Für gegebenen Ket-Raum $\mathbb{V}_n$ wird ein dualer "Bra-Raum" $\tilde{\mathbb{V}}_n$ definiert, isomorph zu $\mathbb{V}_n$.

$\Rightarrow$ für jeden ket $|\alpha\rangle \in \mathbb{V}_n$ existiert ein "bra" $\langle\alpha| \in \tilde{\mathbb{V}}_n$ $\Big\}$ $|\alpha\rangle \xrightarrow[\text{Korrespondenz (DK)}]{\text{duale}} \langle\alpha|$

- Eigenkets $\{|\alpha_j\rangle\} \xleftrightarrow{DK} \{\langle\alpha_j|\}$ Eigenbras (21.1)

z.B.: $\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$ ↯ Basis für $\mathbb{V}_n$ ↯ Basis für $\tilde{\mathbb{V}}_n$ z.B.: $(1,0,0)$ $(0,1,0)$ $(0,0,1)$

- Postulat: $c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle \xleftrightarrow{DK} c_\alpha^*\langle\alpha| + c_\beta^*\langle\beta|$ (21.2)

Inneres Produkt (auch "Skalarprodukt")

- gebildet aus bra und ket: $\langle\beta|\alpha\rangle = (\langle\beta|)\cdot(|\alpha\rangle)$
  "bra c ket"
- definiert durch folgende Postulate: (22.2)

(i) $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$ $[\Rightarrow \langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle^* = \text{reell}]$

(ii) $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$ "Postulat der positiv. definiten Metrik"

- Falls $\langle\alpha|\alpha\rangle = 0$, ist $|\alpha\rangle = |0\rangle$ ("Null-Ket")
- $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$: "$|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ sind orthogonal"
- Normierung: (diskretes Spektrum) $|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}|\alpha\rangle$ hat $\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1$ (Norm = 1)

[Eigenkets v. Observablen mit kont. Spektrum werden anders normiert]

Operatoren

- Wie bereits erwähnt, werden <u>Observable</u> dargestellt durch Operatoren; $A : \mathbb{V}_n \to \mathbb{V}_n$.

- Allgemeiner, sei $X : \mathbb{V}_n \to \mathbb{V}_n$ linearer Operator

nicht unbedingt einer Observablen zugeordnet

wirkt v. links auf ket: $$X(|\alpha\rangle) = x|\alpha\rangle \in \mathbb{V}_n \quad (23.1)$$

- $X = Y$ falls $X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle \quad \forall\, |\alpha\rangle \in \mathbb{V}_n$

- $X = 0$ (Nulloperator), falls $X|\alpha\rangle = 0 \quad \forall\, |\alpha\rangle \in \mathbb{V}_n$

- Addition v. Operatoren ist
  Kommutativ: $X + Y = Y + X$
  Assoziativ: $X + (Y + Z) = (X + Y) + Z$

- Linearität: $X\big(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle\big) = c_\alpha X|\alpha\rangle + c_\beta X|\beta\rangle$

- Operatoren wirken von rechts auf bra's: $(\langle\alpha|)\cdot X = \langle\alpha|X \in \tilde{V}_n$ (24.1)

(24.4)

- Im Allgemeinen ist $|\alpha'\rangle = X|\alpha\rangle$ <u>nicht</u> dual zu $\langle\alpha|X \neq \langle\alpha'|$

$\text{"}\langle\tilde{\alpha}'|\text{"}$

"X-Kreuz" "X-dagger"

- Definition v. "<u>hermitisch konjugiertem Operator</u>" $X^\dagger$:

$$\begin{array}{ccc} X|\alpha\rangle & \xleftrightarrow{DK} & \langle\alpha|X^\dagger \\ \shortparallel & & \shortparallel \\ |\alpha'\rangle & \xleftrightarrow{DK} & \langle\alpha'| \end{array} \qquad (24.2)$$

- "X ist hermitisch" falls $X = X^\dagger$ (24.3)

Matrix-Beispiele: $X := \begin{pmatrix} x & y \\ v & w \end{pmatrix}$, $|\alpha\rangle := \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$, $\langle\alpha| := (\alpha^*, \beta^*)$

Op. wirkt n. rechts:

$$X|\alpha\rangle \overset{(23.1)}{:=} \begin{pmatrix} x & y \\ v & w \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x\alpha + y\beta \\ v\alpha + w\beta \end{pmatrix} \equiv |\alpha'\rangle = |X\alpha\rangle \qquad (25.1)$$

Op. wirkt nach links:

$$\langle\alpha|X \overset{(24.1)}{:=} (\alpha^*, \beta^*)\begin{pmatrix} x & y \\ v & w \end{pmatrix} = (\alpha^* x + \beta^* v,\ \alpha^* y + \beta^* w) \overset{(24.4)}{\equiv} \langle\tilde{\alpha}'| \qquad (25.2)$$

duales bra zu $|X\alpha\rangle$:

$$\langle\alpha'| \overset{(21.1)}{\underset{(25.1)}{:=}} (x^*\alpha^* + y^*\beta^*,\ v^*\alpha^* + w^*\beta^*) \overset{(24.2)}{\equiv:} \langle\alpha|X^+$$

$$= (\alpha^*, \beta^*)\begin{pmatrix} x^* & v^* \\ y^* & w^* \end{pmatrix} \qquad (25.3)$$

$$\Rightarrow \quad X^+ = \begin{pmatrix} x^* & v^* \\ y^* & w^* \end{pmatrix}$$

X hermitisch falls: $X = X^+ \Rightarrow$ $\left.\begin{matrix} x = x^* \\ w = w^* \end{matrix}\right\} = \text{Reell}$, $\quad y = v^*$

Multiplikation (wie Matrix-Multiplikation)

- i.A. ist Multiplikation nicht kommutativ: $XY \neq YX$

  aber assoziativ: $X(YZ) = (XY)Z$

- Notation: $X(Y|\alpha\rangle) = (XY)|\alpha\rangle = XY|\alpha\rangle$

  $(\langle\beta|X)Y = \langle\beta|(XY) = \langle\beta|XY$

- $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$ $\quad \left[XY|\alpha\rangle = X(Y|\alpha\rangle) \overset{DK}{\longleftrightarrow} (\langle\alpha|Y^\dagger)X^\dagger = \langle\alpha|Y^\dagger X^\dagger \right]$

- Äußeres Produkt: $(|\beta\rangle)\cdot(\langle\alpha|) = |\beta\rangle\langle\alpha|$

  [= Operator]

  $$:= \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} (\alpha_1^*, \alpha_2^*) = \begin{pmatrix} \beta_1\alpha_1^* & \beta_1\alpha_2^* \\ \beta_2\alpha_1^* & \beta_2\alpha_2^* \end{pmatrix}$$

- illegale Produkte: $|\alpha\rangle X$, $\quad X\langle\alpha|$, $\quad |\alpha\rangle|\beta\rangle$ ✗

Assoziatives Axiom : "Assoziative Eigenschaft gilt für alle legalen Multiplikationen" (27.1)

Beispiel 1

$$\text{(27.1a)} \quad \big(|\beta\rangle\langle\alpha|\big)\cdot|\gamma\rangle \overset{(27.1)}{=} |\beta\rangle\cdot\big(\langle\alpha|\gamma\rangle\big) \quad \text{(27.1b)}$$

Äußeres Produkt mal Ket = Ket mal $\underbrace{\text{inneres Produkt}}_{\text{Zahl}}$

$\Rightarrow$ Äußeres Produkt ist ein Operator !!

Kurznotation für sowohl (27.1a) als auch (27.1b) : $|\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle$

- Interpretation v. (27.1): $|\beta\rangle\langle\alpha|$ rotiert $|\gamma\rangle$ in die Richtung $|\beta\rangle$

- Hermitisch Konjugierte : $\big(|\beta\rangle\langle\alpha|\big)^{+} = |\alpha\rangle\langle\beta|$ [check selber!]

Beispiel 2:

$$\underbrace{(\langle\beta|)}_{\text{bra}}\cdot\underbrace{(X|\alpha\rangle)}_{\text{ket}} \overset{(27.1)}{=} \underbrace{(\langle\beta|X)}_{\text{bra}}\cdot\underbrace{(|\alpha\rangle)}_{\text{ket}} = \underbrace{\langle\beta|X|\alpha\rangle}_{\text{Kurznotation}} \qquad (28.1)$$

Aber $|\alpha'\rangle = X|\alpha\rangle \overset{(24.2)}{\underset{DK}{\longleftrightarrow}} \langle\alpha|X^\dagger = \langle\alpha'|$

also: $$\langle\beta|X|\alpha\rangle \overset{(28.1)}{=} \langle\beta|\cdot(\overbrace{X|\alpha\rangle}^{|\alpha'\rangle}) = \langle\beta|\alpha'\rangle$$

$$\overset{(22.2)}{=} \langle\alpha'|\beta\rangle^* = \left((\langle\alpha|X^\dagger)\cdot|\beta\rangle\right)^*$$

$$\overset{(28.1)}{=} \langle\alpha|X^\dagger|\beta\rangle^*$$

- Falls X hermitisch: $\langle\beta|X|\alpha\rangle \overset{(24.3)}{=} \langle\alpha|X|\beta\rangle^*$