II.3 Illustration der Postulate anhand des Spin-$\frac{1}{2}$-Systems

II.3.1 Hilbert-Raum und Orthonormalbasis für das Spin-$\frac{1}{2}$-System

In einer Messung kann der Spin-Zustand entlang einer gegebenen Richtung immer nur maximal zwei Werte annehmen. Dazu sieht es unmöglich aus, die Spin-Komponenten entlang unterschiedlicher Richtungen gleichzeitig zu messen. Dementsprechend kann man zunächst versuchen, die möglichen Spin-Zustände als Kets eines zweidimensionalen Hilbert-Raums $\mathscr{H}$ darzustellen.

Am Ausgang der Messung des Spins entlang einer irgendeiner Richtung kommen zwei mögliche Spin-Zustände mit Komponente $+\hbar/2$ oder $-\hbar/2$. Jedes Paar solcher Zustände könnte als Basis des Hilbert-Raums dienen. Traditionell werden die zwei Zustände gewählt, die in einer Messung der z-Komponente des Spins präpariert werden; die entsprechenden Zustandsvektoren bzw. die Orthonormalbasis von $\mathscr{H}$ werden hiernach als

$$\big(|S_z^+\rangle, |S_z^-\rangle\big) \equiv \mathscr{B}_z \tag{II.21a}$$

bezeichnet, wobei die Vektoren auf 1 normiert und orthogonal zueinander sind:

$$\langle S_z^+|S_z^+\rangle = \langle S_z^-|S_z^-\rangle = 1 \quad \text{und} \quad \langle S_z^+|S_z^-\rangle = 0. \tag{II.21b}$$

Die Zerlegung eines beliebigen Kets des Hilbert-Raums auf dieser Basis lautet

$$|\psi\rangle = \alpha_+|S_z^+\rangle + \alpha_-|S_z^-\rangle \tag{II.22a}$$

oder äquivalent in Matrixdarstellung

$$|\psi\rangle \cong \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \quad \text{in der Basis } \mathscr{B}_z, \tag{II.22b}$$

wobei die zwei komplexen Zahlen $\alpha_\pm = \langle S_z^\pm|\psi\rangle$ die Normierungsbedingung

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 = |\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 \tag{II.22c}$$

erfüllen müssen.

II.3.2 Spin-Operatoren

II.3.2 a z-Komponente des Spins

Der Spin-Operator in z-Richtung $\hat{S}_z$ lässt sich aus seiner Spektraldarstellung folgern. Da seine Eigenzustände die Basisvektoren $|S_z^+\rangle$, $|S_z^-\rangle$ mit jeweiligen Eigenwerten $+\hbar/2$, $-\hbar/2$ sind, ergibt Gl. (I.65)

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}|S_z^+\rangle\langle S_z^+| - \frac{\hbar}{2}|S_z^-\rangle\langle S_z^-|. \tag{II.23a}$$

Dies entspricht in der Basis $\mathscr{B}_z$ der diagonalen Matrixdarstellung

$$\hat{S}_z \cong \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}. \tag{II.23b}$$

II.3.2 b x-Komponente des Spins

Den physikalischen Zuständen mit bestimmter Komponente des Spins entlang der x-Richtung werden Zustandsvektoren $|S_x^+\rangle$, $|S_x^-\rangle$ des Hilbert-Raums zugeordnet.

In der Basis $\mathscr{B}_z$ lässt sich $|S_x^+\rangle$ gemäß Gl. (II.22a) in der Form

$$|S_x^+\rangle = \alpha_+|S_z^+\rangle + \alpha_-|S_z^-\rangle \quad \text{mit} \quad \alpha_+ = \langle S_z^+|S_x^+\rangle\ ,\ \alpha_- = \langle S_z^-|S_x^+\rangle$$

und der Normierungsbedingung $|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1$ schreiben. Dabei folgt aus dem Versuch des § II.1.2 b und dem vierten Postulat (II.9), dass der Betragsquadrat der Wahrscheinlichkeitsamplitude $\langle S_z^+ | S_x^+ \rangle$ gleich $\frac{1}{2}$ sein soll:

$$\left| \langle S_z^+ | S_x^+ \rangle \right|^2 = |\alpha_+|^2 = \frac{1}{2}.$$

Dies gibt sofort $|\alpha_-|^2 = 1 - |\alpha_+|^2 = \frac{1}{2}$, d.h. α_+ und α_- sind komplexe Zahlen mit Betrag $1/\sqrt{2}$, so dass $|S_x^+\rangle$ der Form

$$|S_x^+\rangle = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_1}}{\sqrt{2}} \big(|S_z^+\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_2} |S_z^-\rangle \big)$$

mit reellen Zahlen δ_1, δ_2 ist. Dabei ist $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_1}$ ein globaler Phasenfaktor, der keine Rolle spielt, denn Zustandsvektoren sind bis auf einen solchen Faktor definiert. Somit kann man $\delta_1 = 0$ setzen.

Dann wählt man konventionell auch $\delta_2 = 0$ — diese Wahl ist äquivalent zur Entscheidung, welche Richtung in der zur z-Richtung senkrechten Ebene die x-Richtung sein soll —, d.h.

$$|S_x^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \big(|S_z^+\rangle + |S_z^-\rangle \big). \tag{II.24a}$$

Der andere Zustandsvektor mit bestimmter x-Komponente des Spins, $|S_x^-\rangle$, ist normiert:

$$\langle S_x^- | S_x^- \rangle = 1,$$

und soll orthogonal zu $|S_x^+\rangle$ sein:

$$\langle S_x^- | S_x^+ \rangle = 0,$$

denn beide Zustände sind Eigenvektoren zu einem hermiteschen Operator ($\hat{S}_x$). Ein Ansatz, der diesen Bedingungen genügt, ist

$$|S_x^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \big(|S_z^+\rangle - |S_z^-\rangle \big). \tag{II.24b}$$

Dieser Ket könnte noch durch einen Phasenfaktor $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$ multipliziert werden, der aber irrelevant für die Physik ist, und somit weggelassen wird.

Anhand der Eigenzustände $|S_x^+\rangle$, $|S_x^-\rangle$ lässt sich die Spektraldarstellung des Spin-Operators in x-Richtung schreiben:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} |S_x^+\rangle\langle S_x^+| - \frac{\hbar}{2} |S_x^-\rangle\langle S_x^-|.$$

Um diesen Operator in der Basis $\mathscr{B}_z$ der Eigenzustände zu $\hat{S}_z$ zu schreiben, kann man die Ausdrücke (II.24a), (II.24b) benutzen:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \big(|S_z^+\rangle + |S_z^-\rangle \big) \right] \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \big(\langle S_z^+| + \langle S_z^-| \big) \right] - \frac{\hbar}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \big(|S_z^+\rangle - |S_z^-\rangle \big) \right] \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \big(\langle S_z^+| - \langle S_z^-| \big) \right].$$

Das Ausmultiplizieren der (äußeren) Produkte aus Kets und Bras ergibt nach Vereinfachung

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \big(|S_z^+\rangle\langle S_z^-| + |S_z^-\rangle\langle S_z^+| \big), \tag{II.25a}$$

entsprechend in der Basis $\mathscr{B}_z$ der Matrixdarstellung

$$\hat{S}_x \cong \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix}. \tag{II.25b}$$

An dieser Darstellung sieht man sofort den schon in Gl. (II.3) bestimmten Erwartungswert von $\hat{S}_x$ im Zustand $|S_z^+\rangle$:

$$\langle \hat{S}_x \rangle_{S_z^+} \equiv \langle S_z^+ | \hat{S}_x | S_z^+ \rangle \cong \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0,$$

wobei das dritte Postulat (II.7) benutzt wurde.

II.3.2 c y-Komponente des Spins

Schließlich können wir die Zustandsvektoren $|S_y^+\rangle$, $|S_y^-\rangle$ entsprechend Zuständen mit bestimmter y-Komponente des Spins sowie den Operator $\hat{S}_y$ herleiten.

Die Herangehensweise ist die gleiche wie im letzten Paragraph. Diese Zustände lassen sich auf der Basis $\mathscr{B}_z$ zerlegen:

$$|S_y^+\rangle = \alpha_+|S_z^+\rangle + \alpha_-|S_z^-\rangle \quad \text{mit} \quad \alpha_+ = \langle S_z^+|S_x^+\rangle\ ,\ \alpha_- = \langle S_y^-|S_y^+\rangle\ ,\ |\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1,$$

$$|S_y^-\rangle = \beta_+|S_z^+\rangle + \beta_-|S_z^-\rangle \quad \text{mit} \quad \beta_+ = \langle S_z^+|S_y^-\rangle\ ,\ \beta_- = \langle S_z^-|S_y^-\rangle\ ,\ |\beta_+|^2 + |\beta_-|^2 = 1.$$

Dabei kann man für die Komponenten α_+ und β_+ positive reelle Zahlen wählen, weil die globale Phase der Kets $|S_y^+\rangle$, $|S_y^-\rangle$ irrelevant ist. Die zwei Vektoren sollen senkrecht aufeinander sein, denn sie entsprechen physikalischen Zuständen, die sich ausschließen:

$$\langle S_y^-|S_y^+\rangle = \beta_+^*\alpha_+ + \beta_-^*\alpha_- = 0.$$

Die y-Richtung ist orthogonal auf die x- und z-Richtungen, genau wie die x- und z-Richtungen senkrecht aufeinander sind. Dementsprechend ist die Wahrscheinlichkeit, in einer Messung von $\hat{S}_z$ oder $\hat{S}_x$ am Zustand $|S_y^+\rangle$ (oder an $|S_y^-\rangle$) den Wert $+\hbar/2$ zu finden, gleich $\frac{1}{2}$ — wie in der Messung von $\hat{S}_z$ am Zustand $|S_x^+\rangle$ im Versuch des § II.1.2 d. Unter Berücksichtigung des vierten Postulats (II.9) heißt das, dass die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\langle S_z^+|S_y^+\rangle$ oder $\langle S_x^+|S_y^+\rangle$ das Betragsquadrat $\frac{1}{2}$ haben:

$$|\langle S_z^+|S_y^+\rangle|^2 = \alpha_+^2 = \frac{1}{2},$$

wobei die Konvention $\alpha_+ \in \mathbb{R}_+$ benutzt wurde, und, dank der Zerlegung (II.24a) von $|S_x^+\rangle$ auf der Basis $\mathscr{B}_z$

$$|\langle S_x^+|S_y^+\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\alpha_+ + \frac{1}{\sqrt{2}}\alpha_-\right|^2 = \frac{1}{2}|\alpha_+ + \alpha_-|^2 = \frac{1}{2}.$$

Diese Anforderungen und die Normierungsbedingung $|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1$ führen zu $\alpha_+ = 1/\sqrt{2}$ und $\alpha_- = \pm\mathrm{i}/\sqrt{2}$, wobei konventionell $\alpha_- = \mathrm{i}/\sqrt{2}$ gewählt wird:

$$|S_y^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|S_z^+\rangle + \mathrm{i}|S_z^-\rangle\big). \tag{II.26a}$$

Daraus folgt dann für den anderen Zustandsvektor mit bestimmter y-Komponente

$$|S_y^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|S_z^+\rangle - \mathrm{i}|S_z^-\rangle\big). \tag{II.26b}$$

Der Operator $\hat{S}_y$ lässt sich ausgehend von seiner Spektraldarstellung

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}|S_y^+\rangle\langle S_y^+| - \frac{\hbar}{2}|S_y^-\rangle\langle S_y^-|$$

herleiten. Unter Nutzung der Ausdrücke (II.26a) und (II.26b) findet man

$$\hat{S}_y = \mathrm{i}\frac{\hbar}{2}\big(|S_z^-\rangle\langle S_z^+| - |S_z^+\rangle\langle S_z^-|\big), \tag{II.27a}$$

entsprechend in der Basis $\mathscr{B}_z$ der Matrixdarstellung

$$\hat{S}_y \cong \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}\frac{\hbar}{2} \\ \mathrm{i}\frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix}. \tag{II.27b}$$

Sowohl bei diesem Operator als bei den Eigenzuständen (II.26) treten komplexe (sogar rein imaginäre) Komponenten in der Basis $\mathscr{B}$ auf: der Vektorraum der Zustände des Spin-$\frac{1}{2}$-Systems ist ein komplexer Raum, in dem auch die Kets mit komplexen Komponenten physikalisch relevante Zustände darstellen.

II.3.2 d Spin-Komponente entlang einer beliebigen Richtung

Sei $\vec{\mathrm{e}}_{(\theta,\varphi)}$ der Einheitsvektor im Ortsraum in Richtung (θ, φ), wobei θ und φ die üblichen Polar- und Azimutwinkel eines Kugelkoordinatensystems sind Mithilfe dessen kartesischen Komponenten $(\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ und der drei Spin-Operatoren $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$ kann man einen Operator

$$\hat{S}_{(\theta,\varphi)} \equiv \vec{\mathrm{e}}_{(\theta,\varphi)} \cdot \hat{\vec{S}} \equiv \hat{S}_x \sin\theta\cos\varphi + \hat{S}_y \sin\theta\sin\varphi + \hat{S}_z\cos\theta \tag{II.28a}$$

definieren, dessen Matrixdarstellung in der Basis $\mathscr{B}_z$

$$\hat{S}_{(\theta,\varphi)} \cong \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\theta \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{II.28b}$$

lautet. Die Eigenvektoren zu diesem Operator sind die Zustände mit bestimmter Spin-Komponente $+\hbar/2$ oder $-\hbar/2$ entlang der Richtung von $\vec{\mathrm{e}}_{(\theta,\varphi)}$, und zwar

$$|S^+_{(\theta,\varphi)}\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|S^+_z\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|S^-_z\rangle \cong \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \tag{II.29a}$$

$$|S^-_{(\theta,\varphi)}\rangle = \sin\frac{\theta}{2}|S^+_z\rangle - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\cos\frac{\theta}{2}|S^-_z\rangle \cong \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \tag{II.29b}$$

wobei noch einmal eine positive reelle Komponente entlang $|S^+_z\rangle$ gewählt wurde.

II.3.2 e Aufsteige- und Absteigeoperator

Auf dem Hilbert-Raum des Spin-$\frac{1}{2}$-Systems werden noch zwei Operatoren durch

$$\hat{S}^\pm \equiv \hat{S}_x \pm \mathrm{i}\hat{S}_y \tag{II.30a}$$

definiert.

Im Gegensatz zu den Spin-Operatoren $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$ oder $\hat{S}_{(\theta,\varphi)}$ sind diese Operatoren nicht hermitesch. Genauer prüft man sofort, dass

$$(\hat{S}^+)^\dagger = \hat{S}^-.$$

Aus den Spektraldarstellungen (II.25a), (II.27a) von $\hat{S}_x$ und $\hat{S}_y$ folgt

$$\hat{S}^+ = \hbar|S^+_z\rangle\langle S^-_z| \quad , \quad \hat{S}^- = \hbar|S^-_z\rangle\langle S^+_z|. \tag{II.30b}$$

Dabei handelt es sich aber nicht um die Spektraldarstellungen von $\hat{S}^+$ und $\hat{S}^-$ — diese Operatoren sind nämlich nicht diagonalisierbar! In der Basis $\mathscr{B}_z$ lautet deren Matrixdarstellung

$$\hat{S}^+ \cong \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \hat{S}^- \cong \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix}. \tag{II.30c}$$

Der Operator $\hat{S}^+$ bildet den Zustand $|S^-_z\rangle$ auf $|S^+_z\rangle$ ab, d.h. er erhöht die z-Komponente des Spins um eine Einheit von $\hbar$, weshalb er *Aufsteigeoperator* genannt wird. Der Zustand mit maximalem Spin, $|S^+_z\rangle$, wird auf den Null-Ket $|\varnothing\rangle$ abgebildet.

Wiederum ist $\hat{S}^-$ der *Absteigeoperator*, der den Spin-Zustand in z-Richtung um 1 (in Einheiten von $\hbar$) vermindert.