

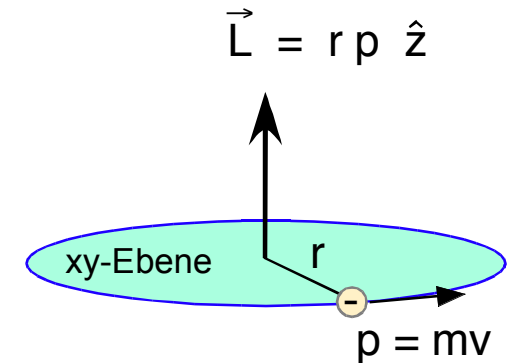
9. Magnetisches Moment & Spin

Drehimpuls und magnetisches Moment

Klassisch: Stromschleife mit Fläche $A = \pi r^2$, $e > 0$ Elementarladung

Strom: $I = -e / T$, $T = 2\pi r / v \equiv$ Umlaufzeit der Ladung $-e$

$$I = \frac{-e v}{2\pi r} = \frac{-e}{2m} \frac{|\vec{L}|}{A}$$



Magnetisches Moment: $\vec{M}_L \equiv I A \hat{z} = \frac{-e}{2m} \vec{L}$ hängt nur vom Drehimpuls $\vec{L}$ ab

Quantenmechanisch: $\vec{M}_L \equiv g_L \frac{-e}{2m} \vec{L} = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}$

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} = \hbar \cdot 2\pi \cdot 1.4 \text{ MHz / Gauss} = \text{Bohr'sches Magneton (natürliche Einheit von } \vec{M}_L \text{)}$$

$g_L =$ gyromagnetisches Verhältnis (kurz: g-Faktor) ($g_L = 1$ für Bahn-Drehimpuls)

Atome im Magnetfeld: (normaler Zeeman-Effekt)

Klassisch:

Energie des magnetischen Moments $\vec{m}_L$ in einem magnetischen Feld $\vec{B}$: $W = - \vec{m}_L \vec{B}$

Quantenmechanisch: $W = - \vec{M}_L \vec{B} = \omega_B \hat{B} \vec{L}$, $\omega_B \equiv g_L \frac{\mu_B}{\hbar} |\vec{B}|$, $\hat{B} \equiv \frac{\vec{B}}{|\vec{B}|}$

ω_B = Larmor-Frequenz
 g_L = gyromagnetisches Verhältnis

BSP: $\vec{B} = (0, 0, B_z)$, $B_z > 0 \Rightarrow W = \omega_B L_z$, $\omega_B \equiv g_L \frac{\mu_B}{\hbar} B_z$

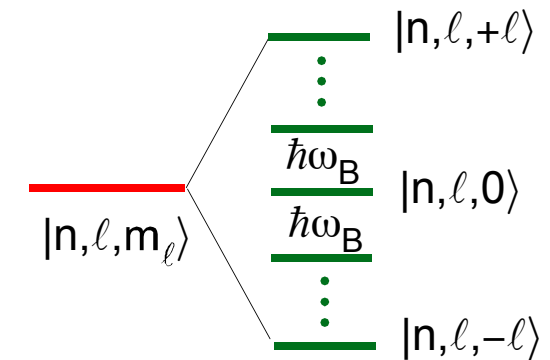
Betrachte Eigenzustand $|n, \ell, m_\ell\rangle$ des Wasserstoff-Atoms

Gesamt-Hamiltonoperator: $H + W$

$$H |n, \ell, m_\ell\rangle = E_n |n, \ell, m_\ell\rangle$$

$$W |n, \ell, m_\ell\rangle = \hbar \omega_B m_\ell |n, \ell, m_\ell\rangle$$

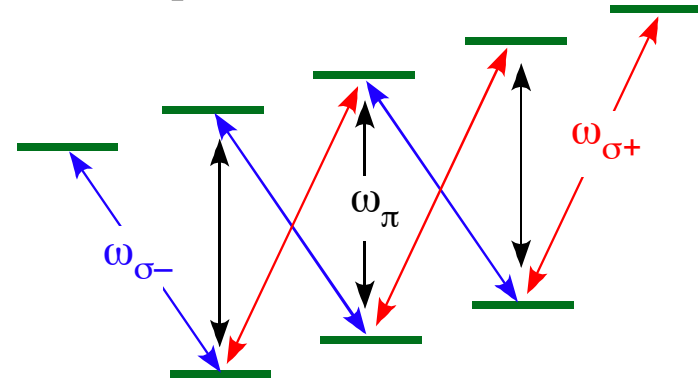
$$E_{n, m_\ell} = E_n + \hbar \omega_B m_\ell$$



Die Energie-Entartung bzgl. der magnetischen Quantenzahl m_ℓ der $|n, \ell, m_\ell\rangle$ Zustände wird aufgehoben: $g_L = 1 \Rightarrow \omega_B = B[\text{Gauss}] * 2\pi * 1.4 \text{ MHz}$

E Beobachtung des normalen Zeeman-Effekts

$$|n=3, \ell=2, m_2\rangle: E_{3,m_2} = E_3 + \hbar \omega_B m_2, m_2 = 0, \pm 1, \pm 2$$

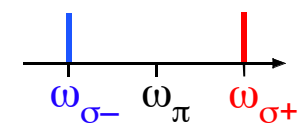
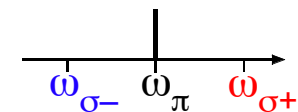
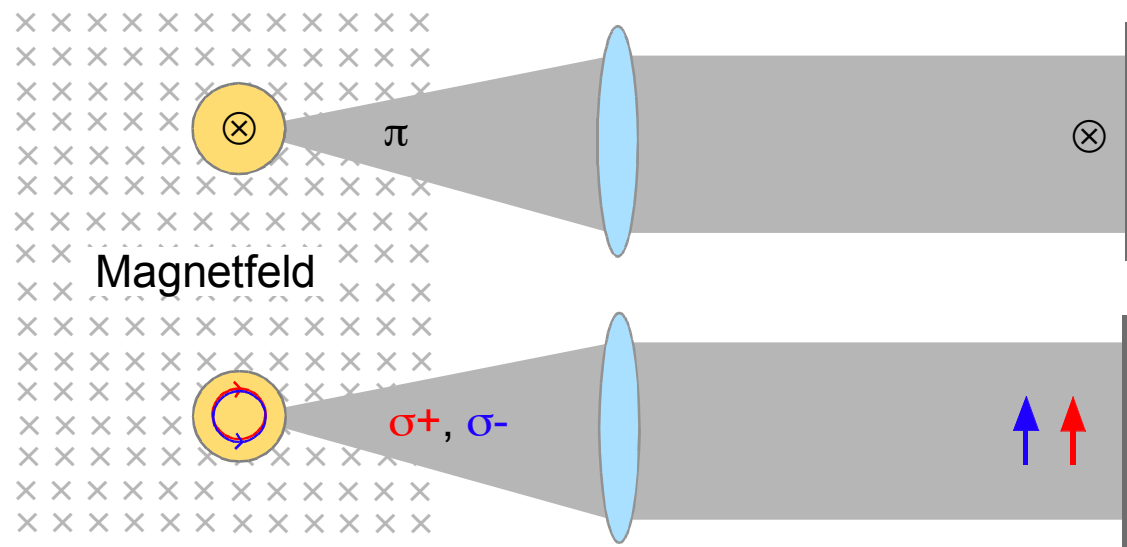


$$\omega_\pi = (E_3 - E_2)/\hbar$$

$$\omega_{\sigma+} = \omega_\pi + \omega_B$$

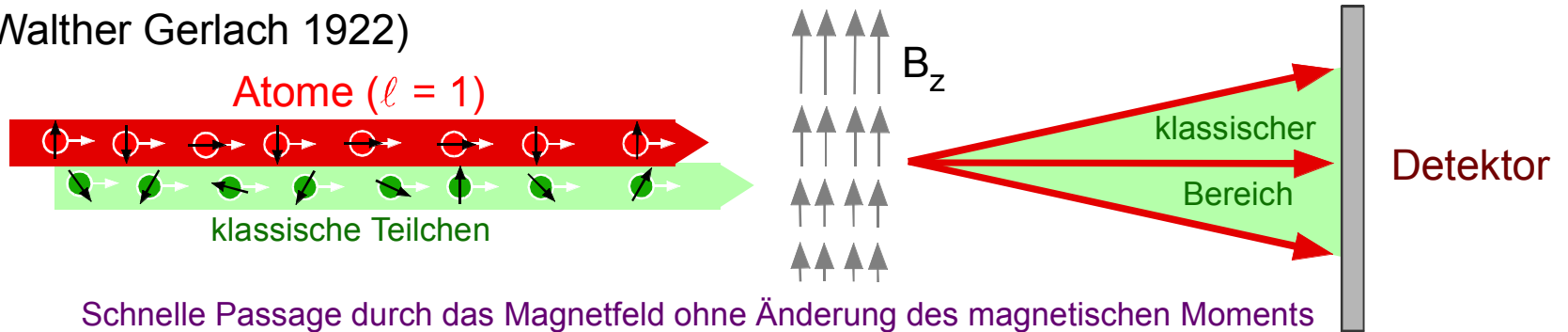
$$\omega_{\sigma-} = \omega_\pi - \omega_B$$

$$|n=2, \ell=1, m_1\rangle: E_{2,m_1} = E_2 + \hbar \omega_B m_1, m_1 = 0, \pm 1$$



Stern-Gerlach-Experiment: Ablenkung von Atomen im inhomogenen Magnetfeld

(Otto Stern, Walther Gerlach 1922)



Klassisch: $W = - \vec{m}_L \cdot \vec{B}$, $\vec{F} = -\vec{\nabla}W$, Gleichverteilung der Orientierung von $\vec{m}_L$ bezgl. $\vec{B}$

$\Rightarrow$ Kontinuierliche Verteilung der Atome auf Detektionsschirm

Quantenmechanik: Magnetisches Moment $\vec{M}$ in einem inhomogenen magnetischen Feld $\vec{B}$
 Magnetfeld konstant auf atomarer Skala: $\vec{B} = \vec{B}(\vec{R} + \vec{r}) = \vec{B}(\vec{R})$, $\vec{R}$ = Schwerpunktskoordinate

Potentielle Energie: $W = - \vec{M} \cdot \vec{B}(\vec{R})$

Wirkt auf Schwerpunktskoordinate R

Wirkt auf Relativkoordinate r

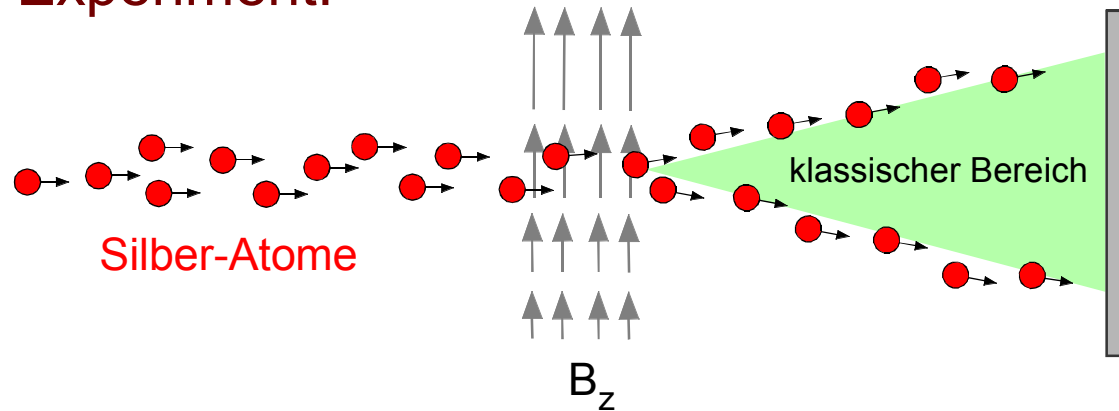
Kraft: $\vec{F} = -\vec{\nabla}_R W = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{\nabla}_R (\vec{L} \cdot \vec{B}) = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \left(\vec{L} \frac{\partial B}{\partial x}, \vec{L} \frac{\partial B}{\partial y}, \vec{L} \frac{\partial B}{\partial z} \right)$

Beispiel: $B = (0,0,B_z(z)) \Rightarrow \langle F_z \rangle = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \frac{\partial B_z}{\partial z} \langle L_z \rangle = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \frac{\partial B_z}{\partial z} m_\ell \hbar$

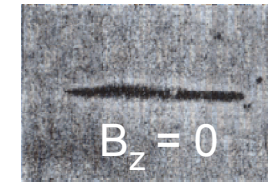
s-Zustand $\Rightarrow \ell = 0, m_\ell = 0 \Rightarrow$ keine Ablenkung erwartet

p-Zustand $\Rightarrow \ell = 1, m_\ell = 0, \pm 1 \Rightarrow$ zwei abgelenkte und eine unabgelenkte Fraktion

Experiment:



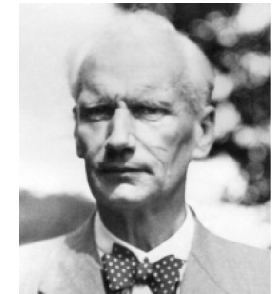
W. Gerlach and O. Stern
Ann. d. Physik, 74, 673 (1924)



FAZIT:

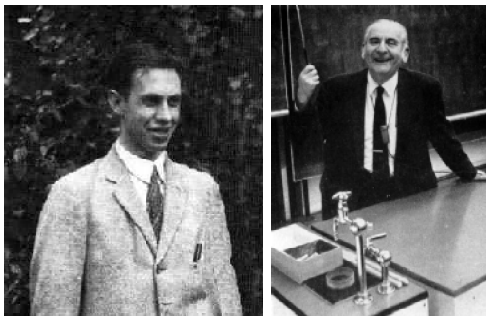
- Bestätigung der Richtungsquantisierung
- Der Grundzustand von Silber zeigt Drehimpuls $\ell = 1/2$

$$\langle F \rangle = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \frac{\partial B_z}{\partial z} m_\ell \hbar, \quad m_\ell = \pm 1/2, \quad g_L = 2$$



Walther Gerlach
(1889 - 1979)

Erklärung: Das Elektron hat einen Eigendrehimpuls (Spin) $s = 1/2$
Uhlenbeck and Goudsmit, Nature, 117, 264 (1926)



George Eugene Uhlenbeck
(1900-1988)
Samuel Abraham Goudsmit
(1902-1978)



Otto Stern
(1888 - 1969)
Nobelpreis 1943

Der Spin des Elektrons

$$\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$$

$$S_{\vec{A}} \equiv \vec{A} \cdot \vec{S} \quad \text{Operator des Spins bezüglich der Richtung } \vec{A}$$

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z$$

$$[S_z, S_x] = i\hbar S_y$$

$$[S_y, S_z] = i\hbar S_x$$

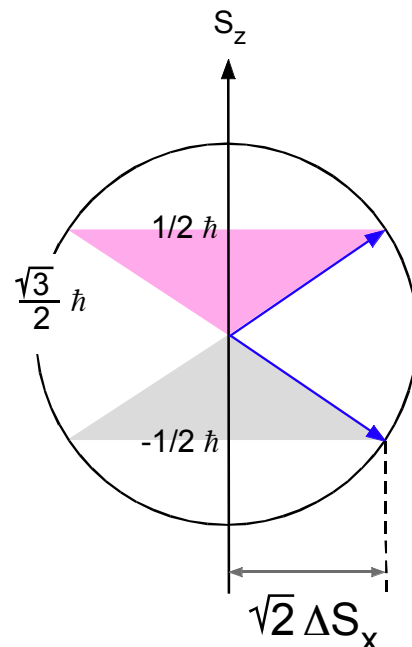
$$S^2 |s, m_s\rangle = s(s+1) \hbar^2 |s, m_s\rangle$$

$$S_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle$$

Im Allgemeinen kann “s” halbzahlig oder ganzzahlig sein

für Elektron: $s = 1/2$

Es gibt zwei Eigenzustände, die als Basis einen zweidimensionalen Hilbertraum aufspannen



$$S^2 |m_s\rangle = 3/4 \hbar^2 |m_s\rangle$$

$$S_z |m_s\rangle = m_s \hbar |m_s\rangle$$

$$m_s = \pm 1/2$$

$$|1/2\rangle_z = |\uparrow_z\rangle \quad \text{“spin-up”}$$

$$|-1/2\rangle_z = |\downarrow_z\rangle \quad \text{“spin-down”}$$

Matrixelemente von S_z in Basis $\{|\uparrow_z\rangle, |\downarrow_z\rangle\}$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{für Eigenzustände } |m_s\rangle \text{ gilt: } \Delta S_x = \Delta S_y = \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$$

Matrix-Darstellung von S_x, S_y, S_z in Eigenbasis $|m_s\rangle, m_s = \pm 1/2$:

$$S^2 |m_s\rangle = 3/4 \hbar^2 |m_s\rangle$$

$$S_z |m_s\rangle = m_s \hbar |m_s\rangle, m_s = \pm 1/2 \Rightarrow \langle m_s | S_z | m_s \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

S_x, S_y, S_z definiert auf zweidimensionalem Hilbertraum

Gesucht: hermitesche 2x2 Matrizen, welche die gewünschten Vertauschungsrelationen erfüllen

Vorschlag von W. Pauli: (eindeutig bis auf unitäre Transformation)



Wolfgang Pauli
(1900 - 1958)
Nobelpreis 1945

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x \quad \sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad |1/2\rangle = \chi_+ \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |1/2\rangle_z = |\uparrow_z\rangle$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y \quad \sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad |-1/2\rangle = \chi_- \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |-1/2\rangle_z = |\downarrow_z\rangle$$

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

σ_j heißen Pauli-Matrizen

$\chi_{\pm}$ heißen Pauli-Spinoren

Nützliche Beziehungen zwischen Pauli-Matrizen:

$$(i) \quad \sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} \mathbf{1} + i \sum_{l=x,y,z} \varepsilon_{jkl} \sigma_l \quad \det(\sigma_j) = -1 \quad \text{Spur}(\sigma_j) = 0$$

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2 \varepsilon_{jkl} \sigma_l$$

$$(ii) \quad (\vec{A} \cdot \vec{\sigma})(\vec{B} \cdot \vec{\sigma}) = \vec{A} \cdot \vec{B} \mathbf{1} + i (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{\sigma} \quad \text{für} \quad \vec{A}, \vec{B} \in \mathbb{C}^3, \vec{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

$$(iii) \quad \mathbf{M} = a_0 \mathbf{1} + \vec{a} \cdot \vec{\sigma} \quad \text{für beliebige } 2 \times 2 \text{ Matrix } \mathbf{M} \text{ und } a_0 \equiv \frac{1}{2} \text{Spur}(\mathbf{M}), \vec{a} \equiv \frac{1}{2} \text{Spur}(\mathbf{M} \vec{\sigma})$$

Das magnetische Moment des Elektrons

Analog zum Bahn-Drehimpuls: $\vec{M}_s \equiv g_s \frac{-e}{2m} \vec{S} = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}$
gyromagnetisches Verhältnis: g_s

Aus dem Stern-Gerlach-Experiment folgt: $M_{s,z} \approx \pm \mu_B \rightarrow g_s \approx 2$

Moderne Messung in einer Penning-Falle ergeben $g_s = 2.0023193044$

Theoretische Erklärung für $g_s = 2 \rightarrow$ relativistische Quantenmechanik, Dirac-Gleichung
(relativistische Geschwindigkeiten der Elektronen)

Die kleine Abweichung von 2 wird durch die Quanten-Elektrodynamik erklärt. (Polarisation des Vakuums)

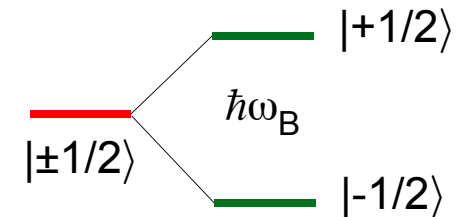
Wechselwirkung des magnetischen Moments $\vec{m}_s$ mit einem magnetischen Feld $\vec{B} = |\vec{B}| \hat{B}$:

$$\mathbf{W} = - \vec{M}_s \vec{B} = \omega_B \hat{B} \vec{S} \quad \omega_B \equiv g_s \frac{\mu_B}{\hbar} |\vec{B}| \quad \text{Larmor-Frequenz}$$

BSP: $\vec{B} = (0, 0, B_z), B_z > 0 \Rightarrow \mathbf{W} = \omega_B \mathbf{S}_z, \quad \omega_B \equiv g_s \frac{\mu_B}{\hbar} B_z$

Die Energie-Entartung der Spin-Zustände $|\pm 1/2\rangle$ wird aufgehoben:

$$\mathbf{W} |s, m_s\rangle = \hbar \omega_B m_s |s, m_s\rangle$$



⊗ Messung des g-Faktors des Elektrons

(D. Wilkinson, H. Crane, Phys. Rev. 130, 852 (1962))

(R. van Dyck P. Schwinberg, H. Dehmelt, Phys. Rev. Lett. 47, 1679 (1981))

Betrachte Spin-Zustand $|\uparrow_z\rangle$ in einem Magnetfeld $B = (B_x, 0, 0)$:

$$W = -\mathbf{M}_{s,x} B_x = \omega_B \mathbf{S}_x = \omega_B \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2} \omega_B (|\uparrow_z\rangle\langle\downarrow_z| + |\downarrow_z\rangle\langle\uparrow_z|)$$

mit Larmor-Frequenz $\omega_B \equiv g_s \frac{\mu_B}{\hbar} B_x$

Spin-Präzession:

Die Schrödinger-Gleichung $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\chi\rangle = W |\chi\rangle$ wird gelöst durch

$$|\chi(t)\rangle = |\uparrow_z\rangle \cos(\frac{1}{2} \omega_B t) - i |\downarrow_z\rangle \sin(\frac{1}{2} \omega_B t) \text{ mit } |\chi(0)\rangle = |\uparrow_z\rangle$$

⇒ Spin oszilliert zwischen $|\uparrow_z\rangle$ und $|\downarrow_z\rangle$ mit Larmor-Frequenz ω_B

Wahrscheinlichkeit $m_z = +1/2$ zu messen: $|\langle\uparrow_z|\chi(t)\rangle|^2 = \cos^2(\frac{1}{2} \omega_B t) = \frac{1}{2} (1 + \cos(\omega_B t))$

Zyklotron-Bewegung:

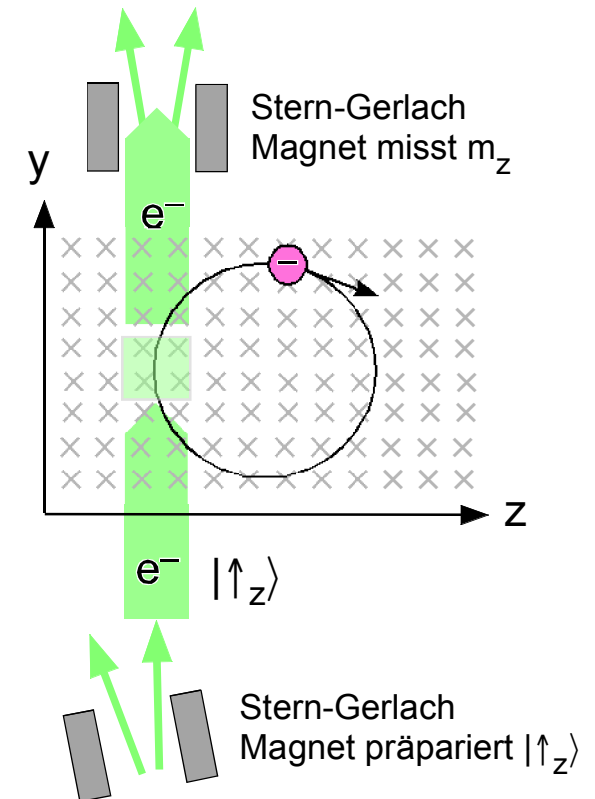
Elektronen der Ladung e kreisen in homogenem Magnetfeld B_x :

Bahn-Winkelgeschwindigkeit: $e v B_x = m \omega^2 r \Rightarrow \omega = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} B_x \Rightarrow \omega_B = \omega \frac{g_s}{2}$

Lorentz-Kraft = Zentrifugal-Kraft
($v = \omega r$, $\mu_B = e \hbar / 2m$)

⇒

$$g_s = 2 \frac{\omega_B}{\omega}$$



Der Gesamt-Drehimpuls: Addition von Bahn-Drehimpuls und Spin



$$\vec{L}: \mathbf{H}_L \rightarrow \mathbf{H}_L$$

$$\text{Basis: } \{ |\ell, m_\ell\rangle \}$$

$$\vec{S}: \mathbf{H}_S \rightarrow \mathbf{H}_S$$

$$\text{Basis: } \{ |s, m_s\rangle \}$$

$$\vec{L}: \mathbf{H}_L \otimes \mathbf{H}_S \rightarrow \mathbf{H}_L \otimes \mathbf{H}_S, \quad L \equiv L \otimes 1$$

$$\text{Basis: } \{ |\ell, m_\ell, s, m_s\rangle \equiv |\ell, m_\ell\rangle \otimes |s, m_s\rangle \}$$

$$\vec{S}: \mathbf{H}_L \otimes \mathbf{H}_S \rightarrow \mathbf{H}_L \otimes \mathbf{H}_S, \quad S \equiv 1 \otimes S$$

$$\text{Basis: } \{ |\ell, m_\ell, s, m_s\rangle \equiv |\ell, m_\ell\rangle \otimes |s, m_s\rangle \}$$

$$\vec{J}: \mathbf{H}_L \otimes \mathbf{H}_S \rightarrow \mathbf{H}_L \otimes \mathbf{H}_S, \quad \vec{J} \equiv \vec{L} + \vec{S}$$

Gesamt-Drehimpuls

$$\text{Basis: } \{ |\ell, m_\ell, s, m_s\rangle \equiv |\ell, m_\ell\rangle \otimes |s, m_s\rangle \}$$

(i) Für J gelten die für Drehimpulse maßgeblichen Vertauschungsrelationen:

$$[J_\nu, J_\mu] = i\hbar \varepsilon_{\nu\mu\kappa} J_\kappa, \quad \varepsilon_{\nu\mu\kappa} \equiv \text{Levi-Civita Symbol}$$

$$[J^2, J_\mu] = 0$$

(ii) Es vertauschen J^2, L^2, S^2 wechselseitig

BEH: Es gibt eine Basis von $\mathbf{H}_L \otimes \mathbf{H}_S$ aus gemeinsamen Eigenzuständen von J^2, J_z, L^2, S^2 

Mögliche Eigenwerte von J^2 sind $\hbar^2 j(j+1)$ mit $j \in \{ |\ell - s|, |\ell + s| \}$

Für jeden Eigenwert j gibt es $2j + 1$ gemeinsame Eigenzustände $|j, \ell, m_j\rangle$ von J^2, J_z, L^2, S^2

mit $m_j \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$, sodass

$$J^2 |j, \ell, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, \ell, m_j\rangle$$

$$J_z |j, \ell, m_j\rangle = \hbar m_j |j, \ell, m_j\rangle$$

$$L^2 |j, \ell, m_j\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |j, \ell, m_j\rangle$$

 **BEW:** Theorievorlesung

Basis-Wechsel in $\mathbf{H}_L \otimes \mathbf{H}_S$ zwischen $\{ |\ell, m_\ell, s, m_s\rangle \}$ und $\{ |j, \ell, m_j\rangle \}$:

$$|j, \ell, m_j\rangle = \sum_{m_\ell, m_s} \langle \ell, m_\ell, s, m_s | j, \ell, m_j \rangle |\ell, m_\ell, s, m_s\rangle$$

 **Clebsch-Gordan Koeffizienten**

BSP: $\ell=2$

m_ℓ -2 -1 0 1 2 -2 -1 0 1 2
 
 $m_s = -1/2$ $m_s = +1/2$

Eigenbasis zu L^2, L_z, S^2, S_z

m_j $-\frac{3}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{3}{2}$ $-\frac{5}{2} -\frac{3}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{3}{2} \frac{5}{2}$
 
 $j = \ell - s$ $j = \ell + s$

Eigenbasis zu J^2, J_z

Eigenschaften des Gesamtdrehimpuls



$|j, \ell, m_j\rangle$ Eigenzustände von $\{J^2, J_z\}$, $\sqrt{\langle J^2 \rangle} = \hbar \sqrt{j(j+1)}$, $\hat{J} \equiv \frac{\vec{J}}{\sqrt{\langle J^2 \rangle}}$

Beh: $|j, \ell, m_j\rangle$ sind Eigenzustände der Projektionen von $\vec{L}$ bzw. $\vec{S}$ auf $\vec{J}$

$$\hat{J} \vec{L} |j, \ell, m_j\rangle = \frac{\hbar (j(j+1) + \ell(\ell+1) - 3/4)}{2 \sqrt{j(j+1)}} |j, \ell, m_j\rangle$$

$$\hat{J} \vec{S} |j, \ell, m_j\rangle = \frac{\hbar (j(j+1) - \ell(\ell+1) + 3/4)}{2 \sqrt{j(j+1)}} |j, \ell, m_j\rangle$$

Bew: Verwende $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, $2 \vec{L} \vec{S} = J^2 - L^2 - S^2$, $\vec{J} \vec{L} = (\frac{1}{2} J^2 + \frac{1}{2} L^2 - \frac{1}{2} S^2)$
 $\vec{J} \vec{S} = (\frac{1}{2} J^2 - \frac{1}{2} L^2 + \frac{1}{2} S^2)$

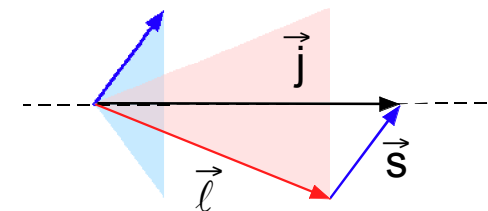
Für die Zustände $|j, \ell, m_j\rangle$ gilt:

$\vec{J}, \vec{L}, \vec{S}$ verhalten sich wie klassische Vektoren bzgl. ihrer Projektionen auf $\vec{J}$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{S} \text{ mit } |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \\ \vec{\ell} \text{ mit } |\vec{\ell}| = \sqrt{\ell(\ell+1)} \\ \vec{J} \text{ mit } |\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)} \\ \vec{J} = \vec{\ell} + \vec{S} \end{array} \right\}$$

$$\hat{J} \vec{\ell} = \frac{j(j+1) + \ell(\ell+1) - 3/4}{2 \sqrt{j(j+1)}}$$

$$\hat{J} \vec{S} = \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + 3/4}{2 \sqrt{j(j+1)}}$$



Vektormodell des Drehimpuls: $\vec{S}$ und $\vec{\ell}$ präzidieren um $\vec{J}$

Addition der magnetischen Momente von Bahn-Drehimpuls und Spin

Bahn-Drehimpuls: $\vec{M}_L = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}$

Spin: $\vec{M}_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}$

Gesamt: $\vec{M} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (g_L \vec{L} + g_s \vec{S}) \approx -\frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{L} + 2\vec{S})$

Beh: $|j, \ell, m_j\rangle$ sind Eigenzustände der Projektion von $\vec{M}$ auf $\vec{J}$:

$$\vec{M} \hat{J} |j, \ell, m_j\rangle = -g_{j\ell} \frac{\mu_B}{\hbar} \hbar \sqrt{j(j+1)} |j, \ell, m_j\rangle$$

$$\text{mit } g_{j\ell} = \frac{3}{2} + \frac{3/4 - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)}$$

Landé-Faktor

Bew: Verwende $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, $2\vec{L} \cdot \vec{S} = J^2 - L^2 - S^2$, $\hat{J} = \frac{\vec{J}}{\hbar \sqrt{j(j+1)}}$

$$\Rightarrow \vec{M} \hat{J} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \left(\frac{3}{2} J^2 + \frac{1}{2} S^2 - \frac{1}{2} L^2 \right)$$

Klassisches Vektormodell



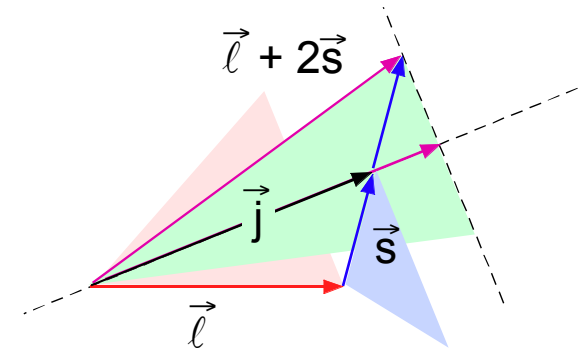
Für die Zustände $|j, \ell, m_j\rangle$ gilt:

$\vec{J}, \vec{L}, \vec{S}, \vec{L} + 2\vec{S}$ verhalten sich wie klassische Vektoren bzgl. ihrer Projektionen auf $\vec{J}$

$$\left. \begin{aligned} \vec{S} \text{ mit } |\vec{S}| &= \sqrt{s(s+1)} \\ \vec{\ell} \text{ mit } |\vec{\ell}| &= \sqrt{\ell(\ell+1)} \\ \vec{j} \text{ mit } |\vec{j}| &= \sqrt{j(j+1)} \\ \vec{j} &= \vec{\ell} + \vec{S} \end{aligned} \right\}$$

$$\hat{j} \vec{\ell} = \frac{j(j+1) + \ell(\ell+1) - 3/4}{2\sqrt{j(j+1)}}$$

$$\hat{j} \vec{S} = \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + 3/4}{2\sqrt{j(j+1)}}$$



$$\hat{j} (\vec{\ell} + 2\vec{S}) = g_{j\ell} \sqrt{j(j+1)} \quad \text{mit Landé-Faktor} \quad g_{j\ell} = \frac{3}{2} + \frac{3/4 - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)}$$

Wigner-Eckart-Theorem:

Tatsächlich kann man die stärkere Aussage beweisen:

In jedem Unterraum $\{|j, \ell, m_j\rangle : m_j \in \{-j, \dots, j\}\}$ sind $\vec{M}$ und $\vec{J}$ proportional mit der Konstante $g_{j\ell} \frac{\mu_B}{\hbar}$

$$\text{also} \quad \langle j, \ell, m_j' | \vec{M} | j, \ell, m_j \rangle = -g_{j\ell} \frac{\mu_B}{\hbar} \langle j, \ell, m_j' | \vec{J} | j, \ell, m_j \rangle$$



(Cohen-Tannoudji Bd. II, Theorievorlesung)

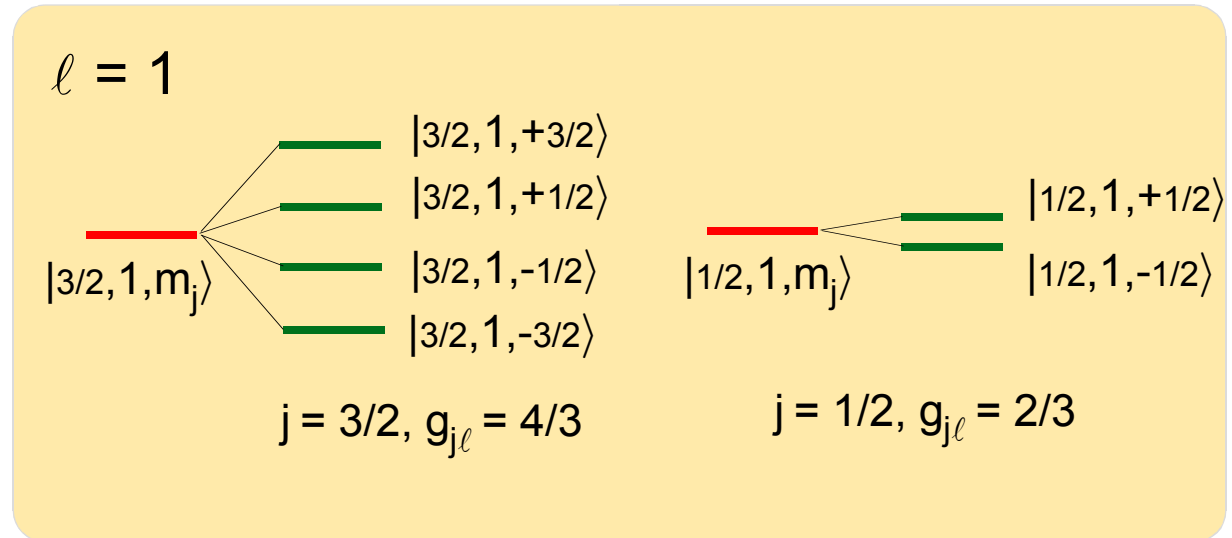
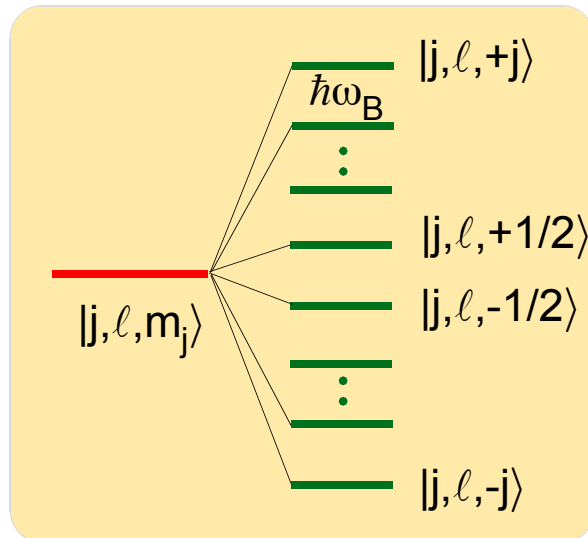
Einfluss des Spins auf den Zeeman-effekt: (anormaler Zeeman-Effekt)

$$W = - \vec{M} \vec{B} = g_{j\ell} \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{J} \vec{B} = \omega_B \vec{J} \hat{B}, \quad \omega_B \equiv g_{j\ell} \frac{\mu_B}{\hbar} |\vec{B}| \quad \text{Larmor-Frequenz}$$

in jedem Unterraum $\{|j, \ell, m_j\rangle : m_j \in \{-j, \dots, j\}\}$

BSP: $\vec{B} = (0, 0, B_z) \Rightarrow W = \omega_B J_z, \quad \omega_B \equiv g_{j\ell} \frac{\mu_B}{\hbar} B_z$

Betrachte Eigenzustände $|j, \ell, m_j\rangle : W |j, \ell, m_j\rangle = -\hbar \omega_B m_j |j, \ell, m_j\rangle$

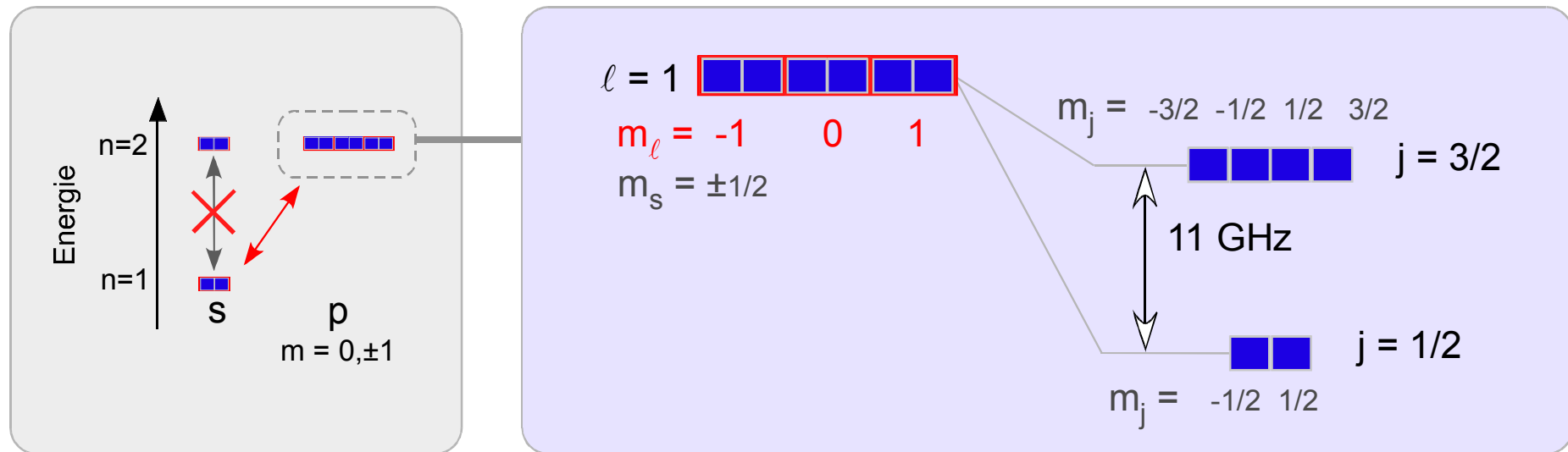


! 10. Die Feinstruktur des Wasserstoff-Atoms

Experimenteller Befund zur Feinstruktur

BSP: 2P-Niveau

W. Lamb, R. Retherford, Phys. Rev. 72, 241 (1947)



Alle Niveaus erfahren eine Absenkung der Energie, die nur von j aber nicht von ℓ abhängt

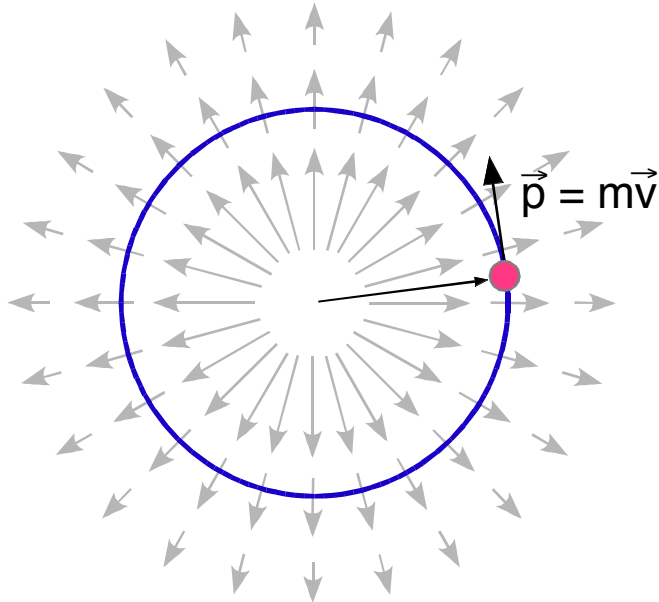
Erklärung: Spin-Bahn-Wechselwirkung

Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten von Bahndrehimpuls und Spin

Die Spin-Bahn-Wechselwirkung

Kopplung zwischen Spin-Raum und Ortsraum

Elektron mit Geschwindigkeit $\vec{v}$ im isotropen elektrischen Feld: $\vec{E} = -\frac{1}{e} \frac{\partial V(r)}{\partial r} \frac{\vec{r}}{r}$



Im Ruhesystem des Elektrons: $\vec{B} = -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E}$

Energie des Elektrons: $W_{LS} = -\vec{M}_s \vec{B}$

$$\vec{B} = \frac{-1}{mec^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V(r)}{\partial r} \vec{r} \times \vec{p} = \frac{-1}{mec^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V(r)}{\partial r} \vec{L}$$

$$W_{LS} = \frac{g_s}{2} \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V(r)}{\partial r} \vec{L} \vec{S}$$

Berücksichtigung des beschleunigten Charakters der Elektronen-Bewegung: $\vec{B} = -\frac{1}{2c^2} \vec{v} \times \vec{E}$

Der dabei auftretende zusätzliche Faktor 1/2 wird als Thomas-Faktor bezeichnet, er kann als Folge einer zusätzlichen Präzession des Elektrons interpretiert werden

(L. H. Thomas, Nature (London) 117, 514 (1926), siehe auch H. Kroemer, Am. J. Phys. 72 (1), January 2004)

$$\Rightarrow W_{LS} = \frac{g_s}{4} \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V(r)}{\partial r} \vec{L} \vec{S}$$

Exakte relativistisch quantenmechanische Herleitung → folgt direkt aus Dirac-Gleichung

Wasserstoff mit Spin-Bahn-Wechselwirkung

Coulomb-Feld: $\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \frac{\vec{r}}{r} \Rightarrow W_{LS} = \frac{g_S}{2} \frac{\mu_0}{8\pi} \frac{Ze^2}{m^2} \frac{1}{r^3} \vec{L} \vec{S}$

$$2 \vec{L} \vec{S} = J^2 - L^2 - S^2, \quad \vec{J} \equiv \vec{L} + \vec{S} \quad \text{Gesamt-Drehimpuls}$$

$$\Rightarrow H = H_0 + W_{LS}$$

$$H_0 = \left(\frac{p^2}{2m} + V(R) \right)$$

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2m r^2}$$

$$V(R) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{R}$$

$$W_{SL} = \frac{g_S}{4} \frac{\mu_0}{8\pi} \frac{Ze^2}{m^2} \frac{1}{R^3} (J^2 - L^2 - S^2)$$

Erweiterter Zustandsraum:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_r \otimes \mathbf{H}_\Omega \otimes \mathbb{C}^2$$

$\nearrow R_{n,\ell}(r) \quad \uparrow Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi) \quad \nwarrow \chi_\pm \text{ Spinoren}$

H_0 wirkt auf $\mathbf{H}_r \otimes \mathbf{H}_\Omega$

W_{LS} wirkt auf $\mathbf{H}_\Omega \otimes \mathbb{C}^2$

W_{LS}, H_0 vertauschen nicht $\Rightarrow$

Sowohl die Eigenzustände als auch die Eigenwerte von H und H_0 unterscheiden sich. Eine Näherungslösung für die Eigenwerte erhält man man aus der zeitunabhängigen Störungstheorie

Basis-Wechsel im erweiterten Zustandsraum des Wasserstoff-Atoms

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_r \otimes \mathbf{H}_\Omega \otimes \mathbb{C}^2$$

$\nearrow R_{n,\ell}(r)$
 $\nearrow Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)$
 $\nwarrow \chi_\pm$
Spinoren

Basis von $\mathbf{H}_\Omega \otimes \mathbb{C}^2$: $|\ell, m_\ell, m_s\rangle \equiv |\ell, m_\ell\rangle \otimes |m_s\rangle = Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) \chi_\pm$

Verwende neue Basis $|j, \ell, m_j\rangle$ in $\mathbf{H}_\Omega \otimes \mathbb{C}^2 \Rightarrow$ neue Basis $|n, j, \ell, m_j\rangle$ in $\mathbf{H}$

Die bekannten Eigenwerte von H_0 hängen nur von n aber nicht von m_ℓ bzw. m_s ab
 $\Rightarrow$ die neuen Basis-Zustände $|n, j, \ell, m_j\rangle$ sind Eigenzustände von H_0 :

$$H_0 |n, j, \ell, m_j\rangle = E_n |n, j, \ell, m_j\rangle$$

$$E_n = -\alpha^2 \frac{mc^2}{2} Z^2 \frac{1}{n^2} \quad \alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx 1/137$$

$$n = 1, 2, \dots \quad \ell = 0, 1, \dots, n-1 \quad , \quad j = |\ell \pm 1/2|$$

Zeitunabhängige Störungstheorie für Störoperator W_{SL} :

$$H_0 |n, j, \ell, m_j\rangle = E_n |n, j, \ell, m_j\rangle, \quad H = H_0 + W_{LS}$$

$$E_{n,j,\ell} \approx E_n + E^{(LS)}_{n,j,\ell}, \quad E^{(LS)}_{n,j,\ell} = \langle n, j, \ell, m_j | W_{LS} | n, j, \ell, m_j \rangle$$

$$W_{LS} = \frac{g_S}{8} \frac{\hbar}{m^2 c} \alpha Z (J^2 - L^2 - S^2) \frac{1}{R^3}$$

$$\Rightarrow E^{(LS)}_{n,j,\ell} = \frac{g_S}{8} \frac{\hbar^3}{m^2 c} \alpha Z (j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4) \underbrace{\int_0^\infty r^2 dr \frac{1}{r^3} R_{n\ell}(r)^2}_{\frac{Z^3 \alpha^3 (mc)^3 / \hbar^3}{n^3 \ell(\ell+1) (2\ell+1)}}$$

$$= \alpha^4 Z^4 mc^2 \frac{g_S}{4} \frac{(j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4)}{n^3 \ell(\ell+1) (2\ell+1)}$$

Relativistische Korrektur der kinetischen Energie

$$E_{\text{kin}} = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} - mc^2 = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2mc^2} \left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 + \dots$$

$$H_0 |n, j, \ell, m_j\rangle = E_n |n, j, \ell, m_j\rangle, \quad H = H_0 + W_R, \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(R), \quad V(R) = -\alpha \hbar c Z \frac{1}{R}$$

$$W_R = -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 = -\frac{1}{2mc^2} (H_0 - V(R))^2 = -\frac{1}{2mc^2} (H_0^2 - H_0 V(R) - V(R) H_0 + V(R)^2)$$

$$E_{n,j,\ell} \approx E_n + E_{n,j,\ell}^{(R)}, \quad E_{n,j,\ell}^{(R)} = \langle n, j, \ell, m_j | W_R | n, j, \ell, m_j \rangle$$

$$\langle n, j, \ell, m_j | H_0^2 | n, j, \ell, m_j \rangle = E_n^2$$

$$\langle n, j, \ell, m_j | H_0 V(R) | n, j, \ell, m_j \rangle = \langle n, j, \ell, m_j | V(R) H_0 | n, j, \ell, m_j \rangle = E_n \langle n, j, \ell, m_j | V(R) | n, j, \ell, m_j \rangle$$

$$\langle n, j, \ell, m_j | V(R) | n, j, \ell, m_j \rangle = -\alpha \hbar c Z \int_0^\infty dr \, r R_{n\ell}(r)^2 = -\alpha^2 Z^2 mc^2 \frac{1}{n^2}$$

$$\langle n, j, \ell, m_j | V(R)^2 | n, j, \ell, m_j \rangle = (\alpha \hbar c Z)^2 \int_0^\infty dr \, R_{n\ell}(r)^2 = \alpha^4 Z^4 m^2 c^4 \frac{1}{n^3 (\ell + 1/2)}$$

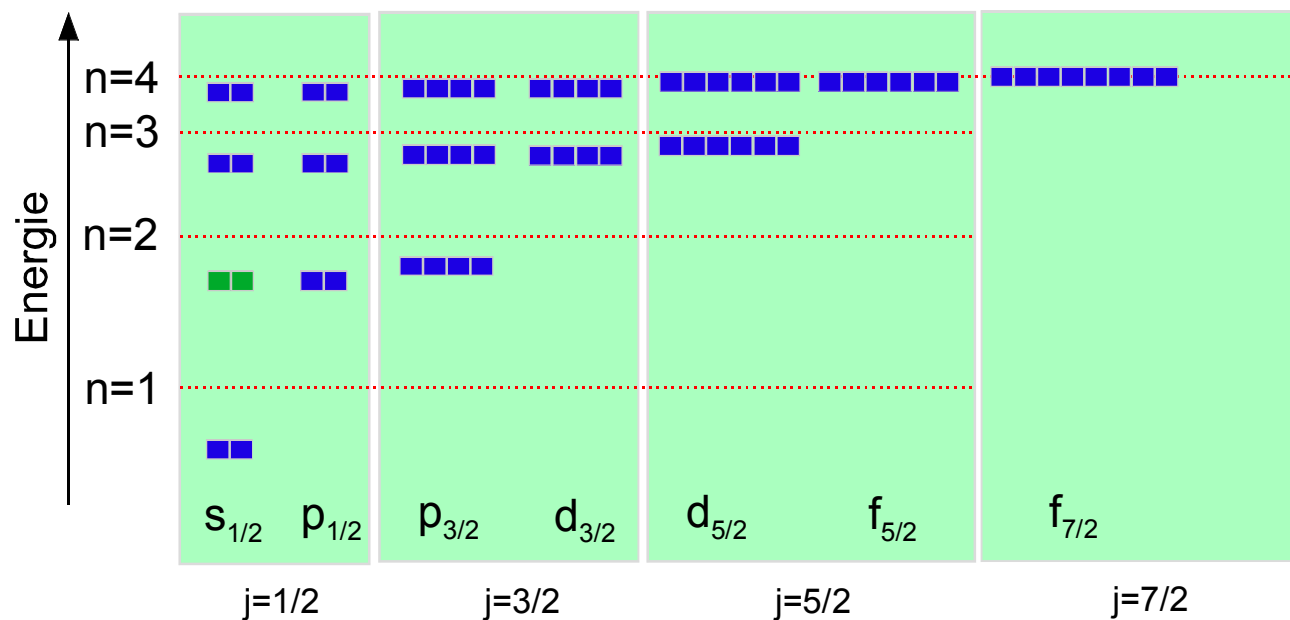
$$\Rightarrow E_{n,j,\ell}^{(R)} = -\frac{1}{2mc^2} \left(E_n^2 - 2E_n \langle n, j, \ell, m_j | V(R) | n, j, \ell, m_j \rangle + \langle n, j, \ell, m_j | V(R)^2 | n, j, \ell, m_j \rangle \right)$$

$$= -\alpha^4 Z^4 mc^2 \frac{1}{2} \frac{1}{n^4} \left(\frac{2n}{(2\ell+1)} - 3/4 \right)$$

Die Feinstruktur von Wasserstoff:

$$E_{n,j} \approx E_n + E^{(R)}_{n,j,\ell} + E^{(LS)}_{n,j,\ell} = E_n - \alpha^4 Z^4 mc^2 \frac{1}{2} \frac{1}{n^4} \left(\frac{2n}{(2j+1)} - 3/4 \right)$$

Die Energie der Eigenzustände hängt nur von j , nicht aber von ℓ ab



Spektroskopische Notation:

$$n \quad 2s+1 \quad X_j$$

n = Haupt-Quantenzahl

$X \in \{s,p,d,f,g,\dots\}$ Bahn-Drehimpuls

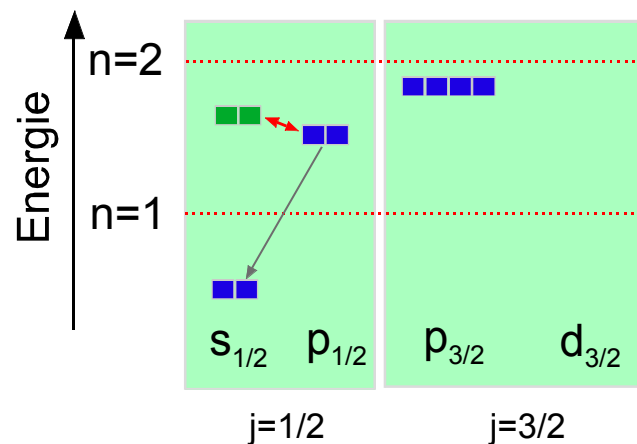
j = Gesamt-Drehimpuls

s = Gesamt-Spin

Weitere Korrekturen:

- Höhere Ordnungen in der Störungsreihe: → Dirac-Gleichung
 ℓ - Entartung bleibt bestehen
- Korrekturen der Quantenelektrodynamik:
→ Lamb-Verschiebung (hebt ℓ - Entartung auf)

Wechselwirkung des elektromagnetischen Vakuums (Vakuumfluktuationen) führt zu einer Energieverschiebung der Niveaus. Die Lamb-Verschiebung zwischen $2 s_{1/2}$ und $2 p_{1/2}$ wurde 1949 (von Lamb & Retherford) experimentell nachgewiesen. Sie hat eine wichtige Rolle für die Entwicklung der QED gespielt.



Erst die Lamb-Verschiebung macht die stabile Präparation metastabiler $2 s_{1/2}$ Atome möglich. Lamb & Retherford maßen die Radiofrequenz (≈ 1 GHz), die man benötigt, um das $2 s_{1/2}$ Niveau über die resonante Kopplung an das $2 p_{1/2}$ Niveau und Spontan-Zerfall nach $1 s_{1/2}$ zu entvölkern

Hyperfeinstruktur: Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten von Proton und Elektron → Aufspaltung

Drehimpuls des Kerns (Proton) $\vec{I}$: $i = 1/2, m_i \in \{-1/2, 1/2\}$

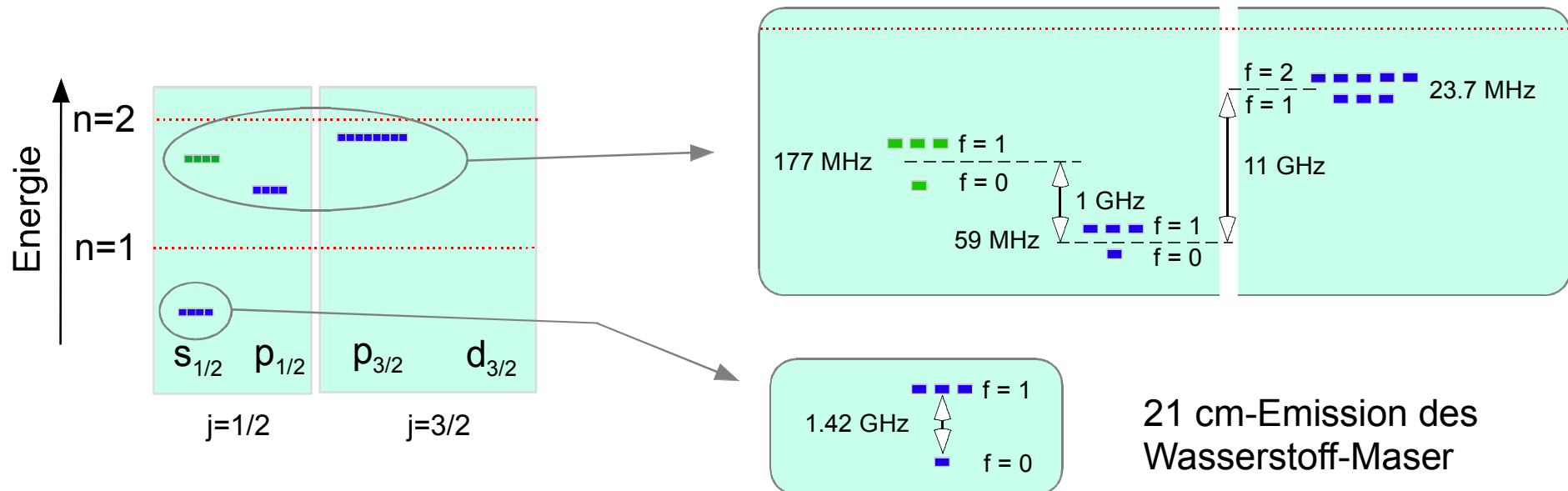
Gesamtdrehimpuls: $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$

Mögliche Eigenwerte von F^2 sind $\hbar^2 f(f+1)$ mit $f \in \{|j - i|, |j + i|\}$

Für jeden Eigenwert f gibt es $2f + 1$ gemeinsame Eigenzustände $|f, j, \ell, m_f\rangle$ von F^2, F_z, J^2, L^2, S^2 mit $m_f \in \{-f, -f+1, \dots, f-1, f\}$, sodass

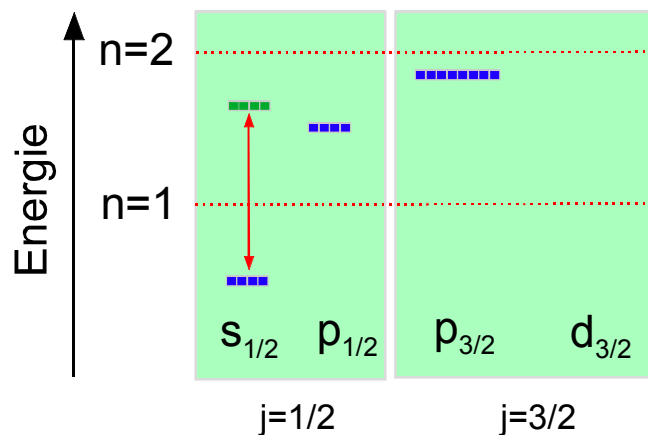
Neue Basis: $|n, j, \ell, m_j\rangle \otimes |I, m_i\rangle \rightarrow |n, f, j, \ell, m_f\rangle$

Magnetische Momente von Elektron und Proton wechselwirken → Aufspaltung (Hyperfeinstruktur)



Moderne Präzisionsspektroskopie am Wasserstoff

Ermittlung der $1s_{1/2}$ Lamb-Shift durch direkte Messung der Übergangs-Frequenz des $1s_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ Zwei-Photonen-Übergangs: Arbeitsgruppe T. W. Hänsch
(Th. Udem et al., Phys. Rev. Lett. 79, 2646–2649 (1997))



$$\nu [1S_{1/2} - 2S_{1/2}] = 2\,466\,061\,413\,187.34(84) \text{ kHz}$$

$$\text{Lamb-Shift}(1S_{1/2}) = 8172.876(29) \text{ MHz}$$



Theodor Hänsch
Nobelpreis 2005

11. Vielteilchensysteme

Bosonen & Fermionen

Mehrteilchen-Wellenfunktionen

BSP zwei Teilchen:

Gegeben seien zwei Einteilchen-Wellenfunktionen $\phi(r_1), \psi(r_2) \in \mathbf{H}$, die zwei voneinander unabhängige Teilchen (1) und (2) beschreiben.

Die gemeinsame Zweiteilchen-Wellenfunktion ist das Produkt $\phi(r_1) \cdot \psi(r_2)$. In diesem Fall ist

$$|\phi(r_1) \cdot \psi(r_2)|^2 = |\phi(r_1)|^2 |\psi(r_2)|^2$$

i.e., man hat unkorrelierte Wahrscheinlichkeitsdichten. Position von Teilchen (1) hängt nicht von Position von Teilchen (2) ab und umgekehrt.

Gemäß Superpositionsprinzip sind alle Superpositionen von Produktwellenfunktionen zulässige Wellenfunktionen. Diese bilden den Produktraum:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} \otimes \mathbf{H} &\equiv \{ \text{Alle Linear-Kombinationen von } \phi(r_1) \cdot \psi(r_2) \} \\ &= \{ \text{Alle quadrat-integrierbaren Funktionen } \chi(r_1, r_2) \text{ der Variablen } r_1, r_2 \} \end{aligned}$$

Die allermeisten Mitglieder von $\mathbf{H} \otimes \mathbf{H}$ sind keine Produktzustände und werden als verschränkt bezeichnet.

BSP für verschränkten Zustand: $\frac{1}{\sqrt{2}} (\phi(r_1) \cdot \psi(r_2) + \psi(r_1) \cdot \phi(r_2))$

Produkt-Räume:

Seien $\mathbf{H}_A$ und $\mathbf{H}_B$ zwei Hilberträume, $|a\rangle \in \mathbf{H}_A$, $|b\rangle \in \mathbf{H}_B$:

Produkt-Zustände: $|a\rangle \otimes |b\rangle \equiv |a\rangle|b\rangle \equiv |a, b\rangle$

mit $\lambda |a\rangle \otimes |b\rangle \equiv (\lambda|a\rangle) \otimes |b\rangle \equiv |a\rangle \otimes (\lambda|b\rangle)$

$$|a_1\rangle \otimes |b\rangle + |a_2\rangle \otimes |b\rangle \equiv (|a_1\rangle + |a_2\rangle) \otimes |b\rangle$$

$$|a\rangle \otimes |b_1\rangle + |a\rangle \otimes |b_2\rangle \equiv |a\rangle \otimes (|b_1\rangle + |b_2\rangle)$$

$$\langle |a_1\rangle \otimes |b_1\rangle \mid |a_2\rangle \otimes |b_2\rangle \rangle \equiv \langle a_1|a_2\rangle \langle b_1|b_2\rangle$$

Produkt-Raum: $\mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B \equiv \{ \text{Alle Linear-Kombinationen von Produkten } |a\rangle \otimes |b\rangle \}$

Bemerkung: Die meisten Zustände in $\mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B$ sind keine Produkte

$$\text{z. B. : } |\psi\rangle \equiv |a_1\rangle \otimes |b_1\rangle + |a_2\rangle \otimes |b_2\rangle$$

Solche Zustände heißen verschränkt

Es seien $A : \mathbf{H}_A \rightarrow \mathbf{H}_A$, $B : \mathbf{H}_B \rightarrow \mathbf{H}_B$ Operatoren auf $\mathbf{H}_A$ bzw. $\mathbf{H}_B$:

Produkt-Operator: $A \otimes B : \mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B \rightarrow \mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B$

$$A \otimes B |a\rangle \otimes |b\rangle \equiv A |a\rangle \otimes B |b\rangle$$

$$A \otimes B \sum_{n \in \mathbf{N}} c_n |a_n\rangle \otimes |b_n\rangle \equiv \sum_{n \in \mathbf{N}} c_n A |a_n\rangle \otimes B |b_n\rangle$$

Natürliche Erweiterung eines Operators $A : \mathbf{H}_A \rightarrow \mathbf{H}_A$: $A \otimes 1_B |a\rangle \otimes |b\rangle \equiv A |a\rangle \otimes |b\rangle$
 $1_B \equiv$ Einheitsoperator auf $\mathbf{H}_B$

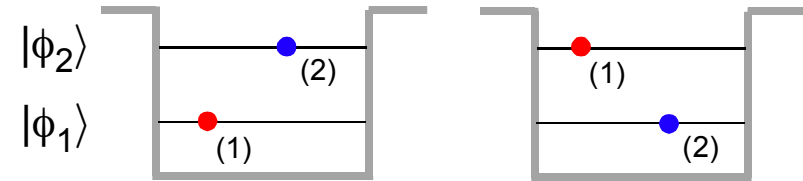
Funktionen von Produkt-Operatoren:

$$C = \sum_{n \in \mathbf{N}} c_n A_n \otimes B_n \Rightarrow C |a\rangle \otimes |b\rangle \equiv \sum_{n \in \mathbf{N}} c_n A_n |a\rangle \otimes B_n |b\rangle$$

Ununterscheidbare Teilchen:

Zwei unterscheidbare Teilchen:

→ Produktzustände $|\phi_1(1)\rangle \otimes |\phi_2(2)\rangle$
 $|\phi_2(1)\rangle \otimes |\phi_1(2)\rangle$



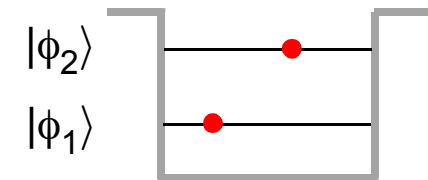
Zwei ununterscheidbare Teilchen:

T sei Operator, der beide Teilchen vertauscht

Gesucht: Zustand für zwei Teilchen $|\psi\rangle$,

sodass $T |\psi\rangle = e^{i\xi} |\psi\rangle$, i.e., $|\psi\rangle$ ist Eigenzustand von T

$$T T = 1 \Rightarrow e^{i\xi} = \pm 1$$



Produktzustände nicht invariant gegen Vertauschung der Teilchen

$$T |\phi_1(1)\rangle \otimes |\phi_2(2)\rangle = |\phi_1(2)\rangle \otimes |\phi_2(1)\rangle = |\phi_2(1)\rangle \otimes |\phi_1(2)\rangle \neq |\phi_1(1)\rangle \otimes |\phi_2(2)\rangle$$

$$\text{aber } |\psi_{\pm}\rangle \equiv |\phi_1(1)\rangle \otimes |\phi_2(2)\rangle \pm |\phi_2(1)\rangle \otimes |\phi_1(2)\rangle \quad \text{verschränkter Zustand !}$$

$$T |\psi_{\pm}\rangle = \pm |\psi_{\pm}\rangle \quad \text{zwei Varianten der Ununterscheidbarkeit}$$

$$\begin{aligned} \text{Rechne } T |\psi_{\pm}\rangle &= |\phi_1(2)\rangle \otimes |\phi_2(1)\rangle \pm |\phi_2(2)\rangle \otimes |\phi_1(1)\rangle = |\phi_2(1)\rangle \otimes |\phi_1(2)\rangle \pm |\phi_1(1)\rangle \otimes |\phi_2(2)\rangle \\ &= \pm |\phi_1(1)\rangle \otimes |\phi_2(2)\rangle + |\phi_2(1)\rangle \otimes |\phi_1(2)\rangle = \pm |\psi_{\pm}\rangle \end{aligned}$$

Antisymmetrischer Fall: $|\phi_1(1)\rangle \otimes |\phi_2(2)\rangle - |\phi_2(1)\rangle \otimes |\phi_1(2)\rangle$

$$|\phi_1\rangle = |\phi_2\rangle \Rightarrow |\psi_-\rangle = |\phi_1(1)\rangle \otimes |\phi_1(2)\rangle - |\phi_1(1)\rangle \otimes |\phi_1(2)\rangle = 0$$

Einteilchenzustände können nicht mehrfach besetzt werden $\Rightarrow$ **FERMIONEN**

Pauli-Prinzip: Zwei Fermionen können nicht denselben Zustand besetzen

N Teilchen:

$$|\psi_-\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} p(\sigma) |\phi_{\sigma(1)}(1)\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{\sigma(N)}(N)\rangle$$

Symmetrischer Fall: $|\phi_1(1)\rangle \otimes |\phi_2(2)\rangle + |\phi_2(1)\rangle \otimes |\phi_1(2)\rangle$

$$|\phi_1\rangle = |\phi_2\rangle \Rightarrow |\psi_+\rangle = 2 |\phi_1(1)\rangle \otimes |\phi_1(2)\rangle \neq 0$$

Einteilchenzustände können mehrfach besetzt werden $\Rightarrow$ **BOSONEN**

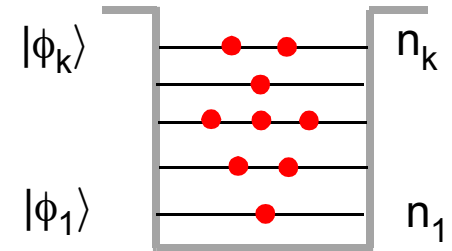
N Teilchen:

$$|\psi_+\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} |\phi_{\sigma(1)}(1)\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{\sigma(N)}(N)\rangle$$

Vereinfachte Notation für Mehrteilchenzustände

Es seien k Einteilchenzustände $|\phi_1\rangle, \dots, |\phi_k\rangle$ gegeben, die mit $n_1, \dots, n_k$ Teilchen besetzt werden sollen.

$$\text{Gesamtteilchenzahl: } N = \sum_{i=1}^k n_i$$



unterscheidbare Teilchen:

$$|n_1, \dots, n_k\rangle \equiv$$

$$\underbrace{|\phi_1(1)\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_1(n_1)\rangle}_{n_1\text{-mal}} \otimes \underbrace{|\phi_2(n_1+1)\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_2(n_1+n_2)\rangle}_{n_2\text{-mal}} \otimes \dots \otimes \underbrace{|\phi_k(N-n_k+1)\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_k(N)\rangle}_{n_k\text{-mal}}$$

Fermionen:

$$|n_1, \dots, n_k\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} p(\sigma) |\phi_1(\sigma(1))\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_1(\sigma(n_1))\rangle \otimes |\phi_2(\sigma(n_1+1))\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_2(\sigma(n_1+n_2))\rangle \otimes \dots$$

$$\Rightarrow n_i \in \{0, 1\}$$

Bosonen:

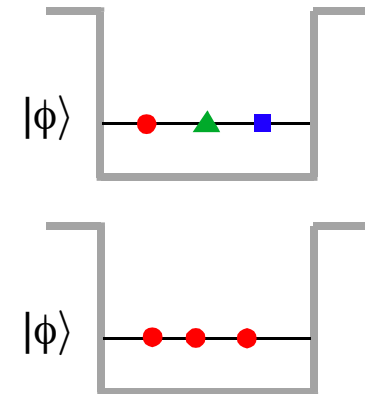
$$|n_1, \dots, n_k\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} |\phi_1(\sigma(1))\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_1(\sigma(n_1))\rangle \otimes |\phi_2(\sigma(n_1+1))\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_2(\sigma(n_1+n_2))\rangle \otimes \dots$$

BSP1: N unterscheidbare Teilchen besetzen denselben Einteilchenzustand $|\phi\rangle$

$$|\psi\rangle \equiv |\phi(1)\rangle \otimes \dots \otimes |\phi(N)\rangle$$

N Bosonen besetzen denselben Einteilchenzustand $|\phi\rangle$

$$|\psi\rangle \equiv |\phi(1)\rangle \otimes \dots \otimes |\phi(N)\rangle$$

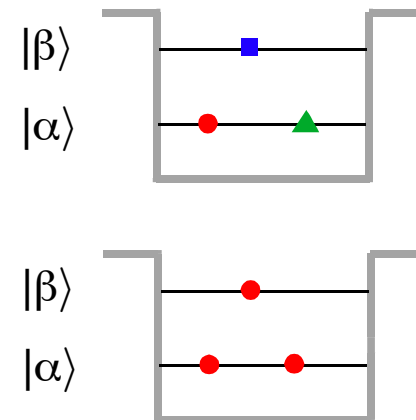


BSP2: 3 unterscheidbare Teilchen: zwei in $|\alpha\rangle$, eins in $|\beta\rangle$

$$|\alpha(1)\rangle \otimes |\alpha(2)\rangle \otimes |\beta(3)\rangle$$

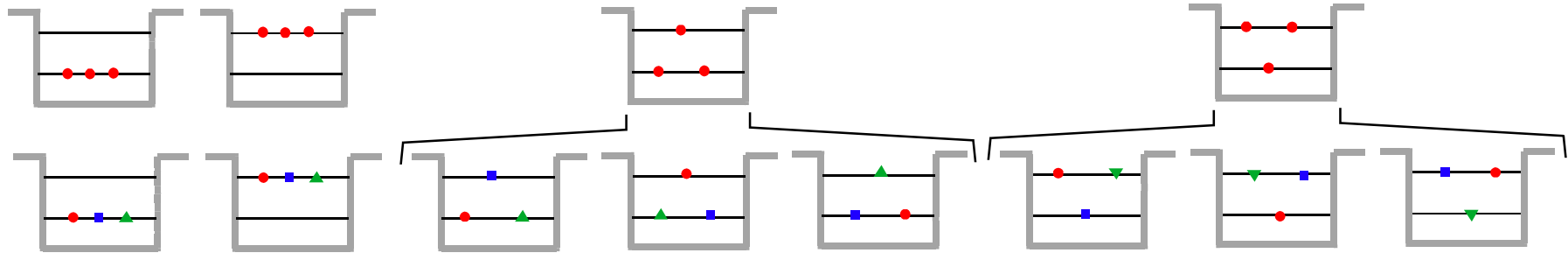


3 Bosonen: zwei in $|\alpha\rangle$, eins in $|\beta\rangle$



$$|2,1\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\alpha(1)\rangle \otimes |\alpha(2)\rangle \otimes |\beta(3)\rangle + |\alpha(1)\rangle \otimes |\beta(2)\rangle \otimes |\alpha(3)\rangle + |\beta(1)\rangle \otimes |\alpha(2)\rangle \otimes |\alpha(3)\rangle \right)$$

BSP3: Unterscheidbare Teilchen $\leftrightarrow$ Bosonen



Mehrfachbesetzung ist viel wahrscheinlicher für Bosonen

$$|\alpha\rangle \otimes |\alpha\rangle \otimes |\alpha\rangle$$

$$|\beta\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\beta\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\alpha\rangle \otimes |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle + |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle + |\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle \otimes |\alpha\rangle \right)$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\beta\rangle + |\beta\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle + |\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \right)$$

$$|\alpha\rangle \otimes |\alpha\rangle \otimes |\alpha\rangle$$

$$|\beta\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\beta\rangle$$

$$|\alpha\rangle \otimes |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$$

$$|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle$$

$$|\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle \otimes |\alpha\rangle$$

$$|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\beta\rangle$$

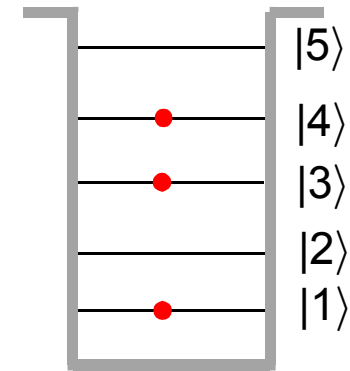
$$|\beta\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle$$

$$|\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$$

BSP4: 3 Fermionen

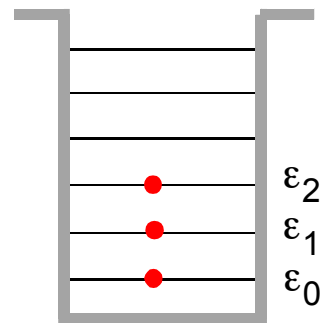
$$|1,0,1,1,0\rangle \equiv$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}} \left(|1\rangle \otimes |3\rangle \otimes |4\rangle + |4\rangle \otimes |1\rangle \otimes |3\rangle + |3\rangle \otimes |4\rangle \otimes |1\rangle \right. \\ \left. - |3\rangle \otimes |1\rangle \otimes |4\rangle - |4\rangle \otimes |3\rangle \otimes |1\rangle - |1\rangle \otimes |4\rangle \otimes |3\rangle \right)$$

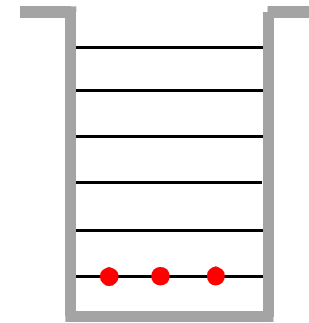


BSP5: Grundzustand für N Fermionen bzw. N Bosonen ohne Wechselwirkung

$$E = \sum_{v=0}^{N-1} \varepsilon_v$$



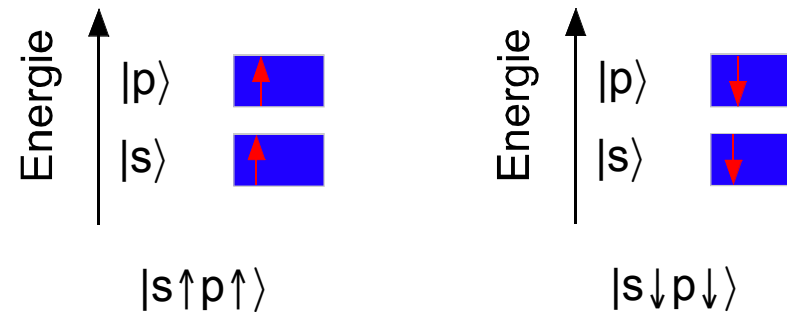
$$E = N \varepsilon_0$$



ohne Wechselwirkung: der fermionische Grundzustand hat größere Energie.

jedoch: bei stark abstoßender Wechselwirkung kann der fermionische Grundzustand die kleinere Energie besitzen, da Fermionen “sich besser aus dem Weg gehen”

BSP6: Zwei Elektronen mit parallelen Spins in zwei Einteilchen-Niveaus



$$|s\uparrow p\uparrow\rangle = |s,\uparrow\rangle_1 \otimes |p,\uparrow\rangle_2 - |p,\uparrow\rangle_1 \otimes |s,\uparrow\rangle_2 = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \otimes \left(|s\rangle_1 \otimes |p\rangle_2 - |p\rangle_1 \otimes |s\rangle_2 \right)$$

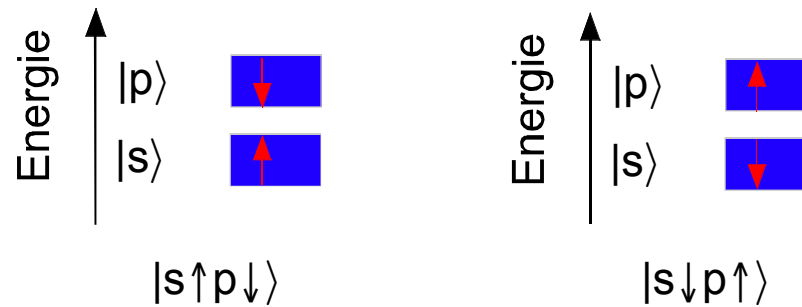
$$|s\downarrow p\downarrow\rangle = |s,\downarrow\rangle_1 \otimes |p,\downarrow\rangle_2 - |p,\downarrow\rangle_1 \otimes |s,\downarrow\rangle_2 = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 \otimes \left(|s\rangle_1 \otimes |p\rangle_2 - |p\rangle_1 \otimes |s\rangle_2 \right)$$

symmetrisch bzgl. Spin-Freiheitsgrad ($|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$),

antisymmetrisch bzgl. orbitalem Freiheitsgrad ($|s\rangle, |p\rangle$)

und somit antisymmetrisch bzgl. der Vertauschung der Elektronen

BSP7: Zwei Elektronen mit antiparallelen Spins in zwei Einteilchen-Niveaus

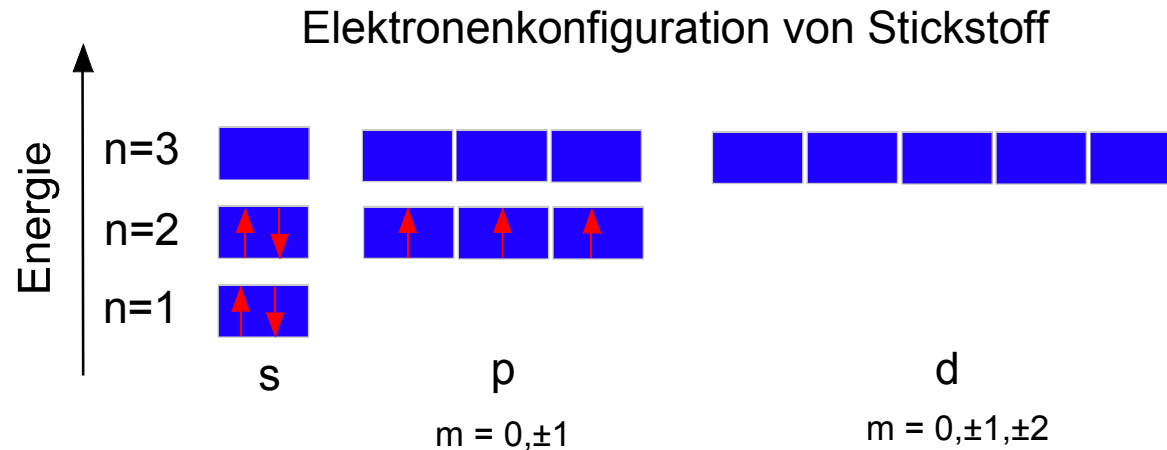


$$|s\uparrow p\downarrow\rangle = |s,\uparrow\rangle_1 \otimes |p,\downarrow\rangle_2 - |p,\downarrow\rangle_1 \otimes |s,\uparrow\rangle_2$$

$$|s\downarrow p\uparrow\rangle = |s,\downarrow\rangle_1 \otimes |p,\uparrow\rangle_2 - |p,\uparrow\rangle_1 \otimes |s,\downarrow\rangle_2$$

Verschränkung bzgl. Spin-Zustand ($|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$) und orbitalem Zustand ($|s\rangle, |p\rangle$),
antisymmetrisch bzgl. der Vertauschung der Elektronen

BSP8: Mehrelektronenatome

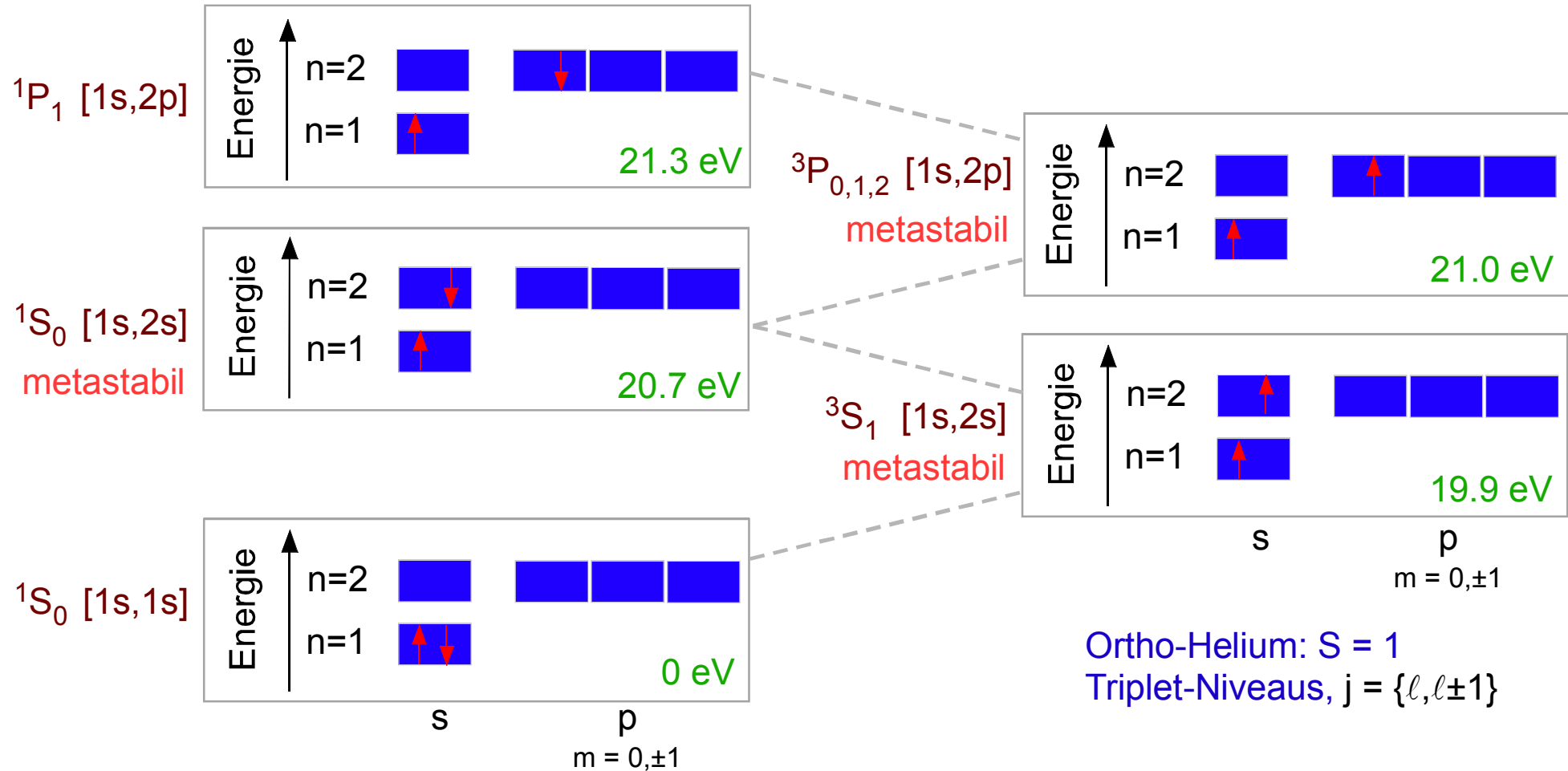


1. Elektronen sind Fermionen, es gilt das Pauli-Prinzip: Zwei Elektronen unterscheiden sich durch mindestens eine der Quantenzahlen: n , L , m_L , m_S
2. Hund'sche Regel: Spins innerhalb eines Niveaus mit gleichem L paaren sich maximal parallel

Begründung:

Parallele Spins $\Rightarrow$ Elektronen haben gleiche Spin-Funktion $\Rightarrow$ Antisymmetrische Ortsfunktion, denn Gesamtwellenfunktion ist antisymmetrisch $\Rightarrow$ Elektronen gehen sich maximal aus dem Weg, Coulomb-Abstoßung der Elektronen minimiert

BSP9: Das Heliumatom



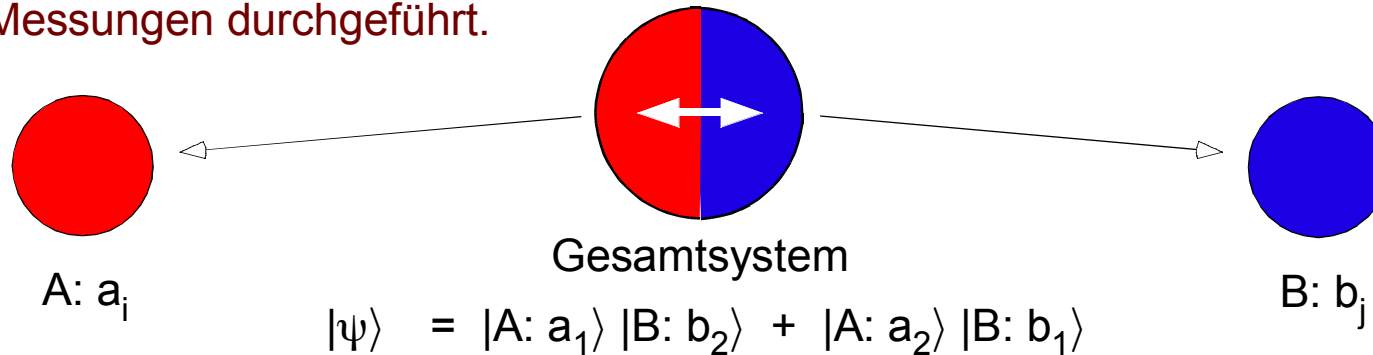
Ortho-Helium: $S = 1$
Triplet-Niveaus, $j = \{\ell, \ell \pm 1\}$

Para-Helium: $S = 0$, Singlet-Niveaus: $j = \ell$

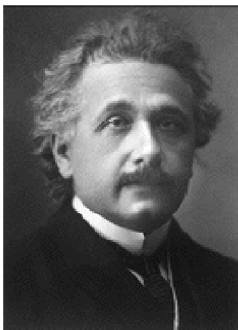
Parallele Spins $\Rightarrow$ Elektronen haben gleiche Spin-Funktion $\Rightarrow$ Antisymmetrische Ortsfunktion, denn Gesamtwellenfunktion ist antisymmetrisch $\Rightarrow$ Elektronen gehen sich maximal aus dem Weg, Coulomb-Abstoßung der Elektronen minimiert $\Rightarrow$ Triplet-Niveaus haben geringere Energie als Singlet-Niveaus

Das EPR Problem (1935)

Zwei durch einen gemeinsamen verschränkten Quantenzustand $|\psi\rangle$ beschriebene Teilsysteme werden nach Wechselwirkung raumartig getrennt. An beiden Teilsystemen werden nach der Trennung Messungen durchgeführt.



Wird z.B. am linken roten Teilsystem a_1 gemessen, erfolgt Zustandsreduktion $|\psi\rangle \rightarrow |A: a_1\rangle |B: b_2\rangle$. Danach erfolgt bei einer Messung am rechten blauen Teilsystem zwangsläufig das Ergebnis b_2 .



Albert Einstein
(1879 – 1955)



Boris Podolsky
(1896 – 1966)



Nathan Rosen
(1909 – 1995)

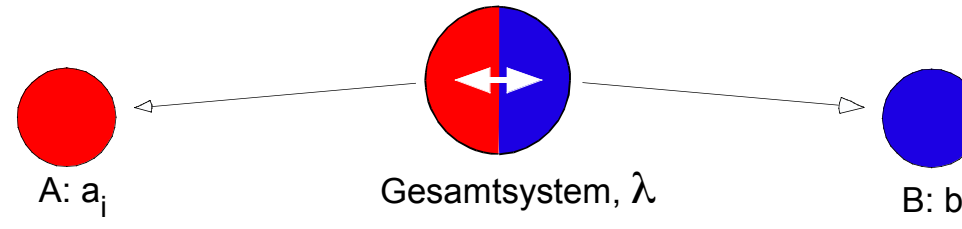
Kann das Ergebnis einer Messung von B durch Messung von A beeinflusst werden? → Spukhafte Fernwirkung ?

Ist die probabilistische Natur der QM ein Zeichen ihrer Unvollständigkeit? Kann man durch Einführung von zusätzlichen (fluktuierenden) “verborgenen” (evtl. experimentell unzugänglichen) Parametern Vollständigkeit erzielen, sodass Wahrscheinlichkeiten nur als Ausdruck von klassischer Unkenntnis in Erscheinung treten?

A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen: “Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?”
Physical Review 41, 777 (15 May 1935).

Vervollständigung durch verborgene Parameter

Zwei Teilsysteme (rot & blau) werden nach Wechselwirkung raumartig getrennt. An beiden Teilsystemen können Messungen der physikalischen Größen A, B mit möglichen Messergebnissen a_i , b_j durchgeführt werden.



Im allgemeinen ist die Beschreibung des Gesamtsystems unvollständig. Vervollständigung wird erreicht durch **einen (beliebig komplexen) Parameter λ** , so dass bei Kenntnis von λ die Teilsysteme vollständig beschrieben sind durch Wahrscheinlichkeiten $p_A(\lambda, a_i)$ und $p_B(\lambda, b_j)$ mit

$$1 = \sum_i p_A(\lambda, a_i), \quad 0 \leq p_A(\lambda, a_i) \leq 1 \quad \text{bzw.} \quad 1 = \sum_j p_B(\lambda, b_j), \quad 0 \leq p_B(\lambda, b_j) \leq 1$$

Lokaler Realismus

In einer vollständigen Beschreibung sind die Eigenschaften der Teilsysteme nach der Trennung unabhängig von einander wohldefiniert. Der Ausgang einer Messung der Eigenschaft A beim linken bzw. B beim rechten System hängt ausschließlich vom linken bzw. rechten System ab. Für jeden Wert von λ muss gelten: Die Wahrscheinlichkeit $p_{AB}(\lambda, a_i, b_j)$ für A den Wert a_i und für B den Wert b_j zu messen ist durch die Produktwahrscheinlichkeit $p_A(\lambda, a_i) p_B(\lambda, b_j)$ gegeben

$$p_{AB}(\lambda, a_i, b_j) = p_A(\lambda, a_i) p_B(\lambda, b_j). \quad (11.1)$$

Im Allgemeinen ist λ nicht bekannt. Stattdessen kennt man nur eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\lambda) \geq 0$ dafür, dass der Wert λ während der Messung realisiert ist.

$$\rho(\lambda) \geq 0, \quad 1 = \int d\lambda \rho(\lambda)$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür für A den Wert a_i und für B den Wert b_j zu messen ist dann

$$P_{AB}(a_i, b_j) = \int d\lambda \rho(\lambda) p_{AB}(\lambda, a_i, b_j) \stackrel{(11.1)}{=} \int d\lambda \rho(\lambda) p_A(\lambda, a_i) p_B(\lambda, b_j) \quad (11.2a)$$

lokaler Realismus

Es folgt

$$P_A(a_i) \stackrel{(11.2a)}{=} \sum_j P_{AB}(a_i, b_j) = \int d\lambda \rho(\lambda) p_A(\lambda, a_i) \sum_j p_B(\lambda, b_j) = \int d\lambda \rho(\lambda) p_A(\lambda, a_i) \quad (11.2b)$$

$$P_B(b_j) = \sum_i P_{AB}(a_i, b_j) = \int d\lambda \rho(\lambda) p_B(\lambda, b_j) \sum_i p_A(\lambda, a_i) = \int d\lambda \rho(\lambda) p_B(\lambda, b_j)$$

Im Allgemeinen gilt: $P_{AB}(a_i, b_j) \neq P_A(a_i) P_B(b_j)$, i.e., es gibt Korrelationen zwischen den Messergebnissen an den Teilsystemen A und B, kompatibel mit lokalem Realismus

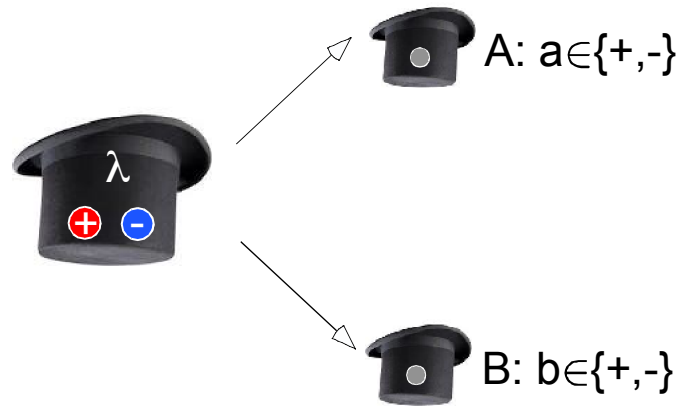
Spezialfall: $p_A(\lambda, a_i), p_B(\lambda, b_j)$ unabhängig von $\lambda \Rightarrow$ keine Korrelation: $P_{AB}(a_i, b_j) = P_A(a_i) P_B(b_j)$

Bsp: triviale klassische Korrelation



$$\lambda \in \{1,2\}$$

$$\rho(1) = \rho(2) = 1/2$$



	A	B
λ=1	$p_A(1,+) = 1$ $p_A(1,-) = 0$	$p_B(1,+) = 0$ $p_B(1,-) = 1$
λ=2	$p_A(2,+) = 0$ $p_A(2,-) = 1$	$p_B(2,+) = 1$ $p_B(2,-) = 0$

$$P_{AB}(a,b) \stackrel{(11.2a)}{=} \int d\lambda \rho(\lambda) p_A(\lambda,a) p_B(\lambda,b)$$

$$= \rho(1) p_A(1,a) p_B(1,b) + \rho(2) p_A(2,a) p_B(2,b), \quad a,b \in \{+,-\} \quad (11.3)$$

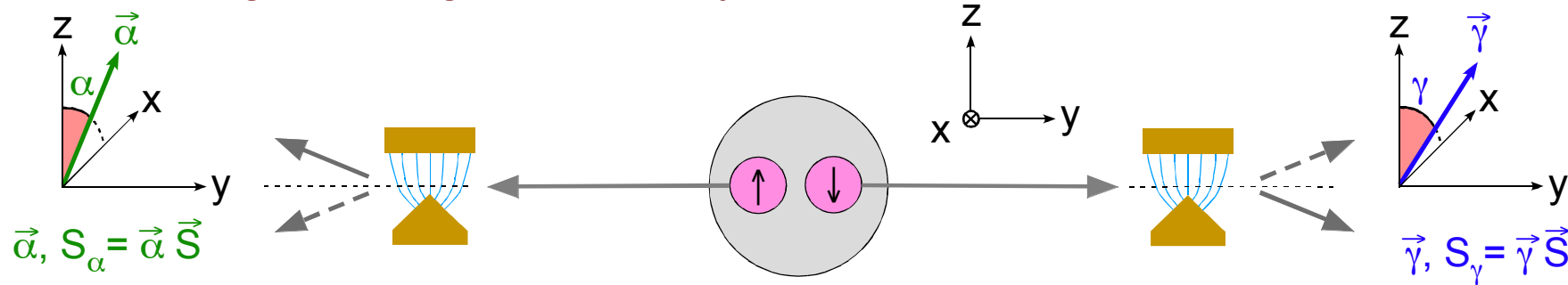
$$\begin{aligned} \Rightarrow P_{AB}(+,+) &= P_{AB}(-,-) = 0 \\ \stackrel{(11.3) \text{ \& Tabelle}}{\Rightarrow} P_{AB}(+,-) &= P_{AB}(-,+) = 1/2 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} P_A(+) &= P_{AB}(+,+) + P_{AB}(+,-) = 1/2 \\ P_A(-) &= P_{AB}(-,+) + P_{AB}(-,-) = 1/2 \\ P_B(+) &= P_{AB}(-,+) + P_{AB}(+,+) = 1/2 \\ P_B(-) &= P_{AB}(-,-) + P_{AB}(+,-) = 1/2 \end{aligned} \quad (11.2b)$$

$\Rightarrow$ Messungen von A und B sind korreliert: $P_{AB}(a,b) \neq P_A(a) P_B(b) = 1/4$, $a,b \in \{+,-\}$
 aber kompatibel mit lokalem Realismus (11.3)

Bell'sche Ungleichung für Spin-System:



Ein Teilchen mit Gesamt-Drehimpuls 0 zerfalle in zwei Spin=1/2 Teilchen:

Für jedes Messergebnis gibt es vier Alternativen: $(\alpha: +, \gamma: +)$, $(\alpha: +, \gamma: -)$, $(\alpha: -, \gamma: +)$, $(\alpha: -, \gamma: -)$

Wiederholte Messungen führen zu relativen Messhäufigkeiten: $P(\alpha: +, \gamma: +)$, $P(\alpha: +, \gamma: -)$ etc.

mit $P(\alpha: +, \gamma: -) \stackrel{(*)}{=} \int d\lambda \rho(\lambda) p_\alpha(\lambda, +) p_\gamma(\lambda, -)$, $1 = p_\theta(\lambda, -) + p_\theta(\lambda, +)$, $0 \leq p_\theta(\lambda, \pm) \leq 1$ für $\theta \in \{\alpha, \beta, \gamma\}$
 (11.2a)
 Lokaler Realismus

$$\text{BEH: } p_\alpha(\lambda, +) p_\gamma(\lambda, -) \leq p_\alpha(\lambda, +) p_\beta(\lambda, -) + p_\beta(\lambda, +) p_\gamma(\lambda, -)$$

$$\text{BEW: } a, b, c \in [0, 1] \Rightarrow a c = a (1 - b + b) c = a (1 - b) c + a b c \leq a (1 - b) + b c$$

Behauptung folgt mit $a = p_\alpha(\lambda, +)$, $b = p_\beta(\lambda, +)$, $1 - b = p_\beta(\lambda, -)$, $c = p_\gamma(\lambda, -)$

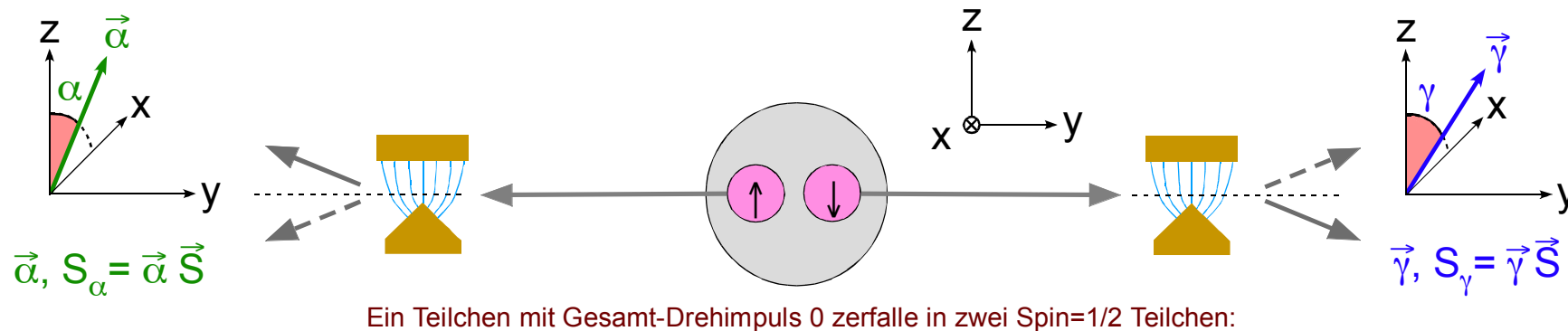
Mit (*) folgt: $P(\alpha: +, \gamma: -) \leq P(\alpha: +, \beta: -) + P(\beta: +, \gamma: -)$

Definiere: $B(\alpha, \beta, \gamma) \equiv P(\alpha: +, \beta: -) + P(\beta: +, \gamma: -) - P(\alpha: +, \gamma: -)$

$\Rightarrow$ **Bell'sche Ungleichung:** $B(\alpha, \beta, \gamma) \geq 0$



Experiment zeigt Verletzung der Bell'schen Ungleichung



Quantenmechanische Quelle produziert verschränkten Spin-Zustand:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle |\downarrow_z\rangle - |\downarrow_z\rangle |\uparrow_z\rangle)$$

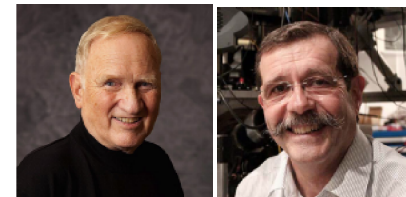
Durch Drehen der Stern-Gerlach Magneten können die Richtungen $\vec{\alpha}$, $\vec{\beta}$, $\vec{\gamma}$ gewählt werden, längs welcher die Spins gemessen werden mit dem jeweils möglichen Ergebnis “ $\pm$ ”. Auf diese Weise werden die Wahrscheinlichkeiten $P(\alpha: +, \beta: -)$, $P(\beta: +, \gamma: -)$, $P(\alpha: +, \gamma: -)$ ermittelt.

Es zeigt sich im Experiment, dass die Bell'sche Ungleichung

$$B(\alpha, \beta, \gamma) \equiv P(\alpha: +, \beta: -) + P(\beta: +, \gamma: -) - P(\alpha: +, \gamma: -) \geq 0 \quad \text{verletzt ist!}$$

⇒ Kein lokaler Realismus

John F. Clauser
Alain Aspect
Nobelpreis 2022



Quantentheorie sagt Verletzung der Bell'schen Ungleichung vorher

Wir betrachten die gegenüber der z-Achse um einen Winkel θ in der xz-Ebene verkippte Richtung des Spins:

$$\vec{z} \equiv (0, 0, z)$$

$$\vec{\theta} \equiv (\sin(\theta), 0, \cos(\theta)) \Rightarrow$$

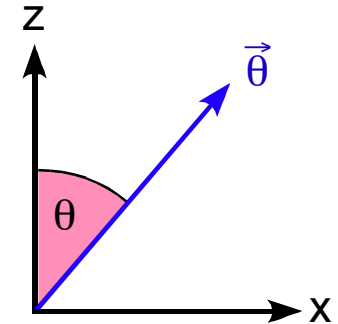
$$\vec{S} \equiv (S_x, S_y, S_z)$$

Operator des Spins in $\vec{\theta}$ -Richtung:

$$S_{\theta} \equiv \vec{\theta} \cdot \vec{S} = \sin(\theta) S_x + \cos(\theta) S_z$$

Messung von S_{θ} :

Stern-Gerlach Magnet in $\vec{\theta}$ Richtung orientiert



Ü Eigenbasis S_z : $S_z |\uparrow_z\rangle = +1/2 \hbar |\uparrow_z\rangle$

$$S_z |\downarrow_z\rangle = -1/2 \hbar |\downarrow_z\rangle$$

Eigenbasis S_{θ} : $S_{\theta} |\uparrow_{\theta}\rangle = +1/2 \hbar |\uparrow_{\theta}\rangle$

$$S_{\theta} |\downarrow_{\theta}\rangle = -1/2 \hbar |\downarrow_{\theta}\rangle$$

$$\begin{aligned} |\uparrow_{\theta}\rangle &= \cos(\theta/2) |\uparrow_z\rangle + \sin(\theta/2) |\downarrow_z\rangle \\ |\downarrow_{\theta}\rangle &= -\sin(\theta/2) |\uparrow_z\rangle + \cos(\theta/2) |\downarrow_z\rangle \end{aligned} \quad (11.4)$$

θ	0°	180°	360°
$ \uparrow_{\theta}\rangle$	$ \uparrow_z\rangle$	$ \downarrow_z\rangle$	$- \uparrow_z\rangle$
$ \downarrow_{\theta}\rangle$	$ \downarrow_z\rangle$	$- \uparrow_z\rangle$	$- \downarrow_z\rangle$

Bemerkung: Drehung um $\theta = 2\pi$ führt zu einer Drehung der Spinoren um $\theta/2 = \pi$

Es gilt für beliebige θ : $|\uparrow_z\rangle |\downarrow_z\rangle - |\downarrow_z\rangle |\uparrow_z\rangle = |\uparrow_{\theta}\rangle |\downarrow_{\theta}\rangle - |\downarrow_{\theta}\rangle |\uparrow_{\theta}\rangle \quad (11.5)$

Quantenmechanisch: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle |\downarrow_z\rangle - |\downarrow_z\rangle |\uparrow_z\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_\alpha\rangle |\downarrow_\alpha\rangle - |\downarrow_\alpha\rangle |\uparrow_\alpha\rangle)$

Gesamt-Spin $\vec{J} = \vec{S}_{(1)} + \vec{S}_{(2)}$ von $|\psi\rangle$ ist 0, i.e., $J^2|\psi\rangle = 0$, aber $S_{(n)}^2|\psi\rangle = s(s+1)\hbar^2|\psi\rangle$ mit $s=1/2$

$$P(\alpha: +, \beta: -) = |\langle \uparrow_\alpha | \downarrow_\beta \rangle|^2 = \frac{1}{2} |\langle \uparrow_\alpha | \uparrow_\alpha \rangle|^2 |\langle \downarrow_\beta | \downarrow_\alpha \rangle|^2 = \frac{1}{2} |\langle \downarrow_\beta | \downarrow_\alpha \rangle|^2 \stackrel{(11.4)}{=} \frac{1}{2} \cos^2((\alpha-\beta)/2)$$

↑
verwende: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_\alpha\rangle |\downarrow_\alpha\rangle - |\downarrow_\alpha\rangle |\uparrow_\alpha\rangle)$

$$B(\alpha, \beta, \gamma) \equiv P(\alpha: +, \beta: -) + P(\beta: +, \gamma: -) - P(\alpha: +, \gamma: -)$$

$$= \frac{1}{2} (\cos^2((\alpha-\beta)/2) + \cos^2((\beta-\gamma)/2) - \cos^2((\alpha-\gamma)/2))$$



John Bell
(1928 - 1990)

BSP: $\gamma = \alpha$

$$B(\alpha, \beta, \alpha) = P(\alpha: +, \beta: -) + P(\beta: +, \alpha: -) - P(\alpha: +, \alpha: -)$$

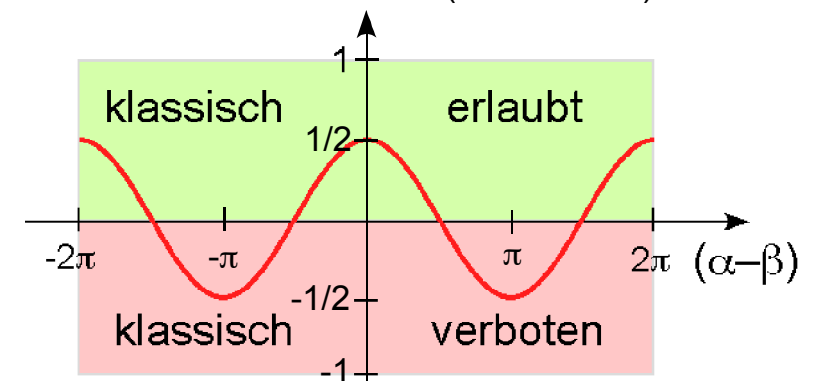
$$= \cos^2((\alpha-\beta)/2) - 1/2 = \frac{1}{2} \cos(\alpha-\beta)$$

Weiterführend:

J. Bell: "On the problem of hidden variables in quantum mechanics"
Reviews of Modern Physics 38, 3, 447 (July 1966).

Experimentelle Bestätigung:

Aspect, Dalibard, Roger: "Experimental test of Bell's inequalities using time-varying analyzers"
Physical Review Letters 49, 25, 1804 (20 Dec 1982).



Ü Es gilt für $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle|\downarrow_z\rangle - |\downarrow_z\rangle|\uparrow_z\rangle)$, $\vec{J} = \vec{S}_{(1)} + \vec{S}_{(2)}$

$$J^2|\psi\rangle = 0, \text{ aber } S_{(n)}^2|\psi\rangle = s(s+1)\hbar^2|\psi\rangle \text{ mit } s = 1/2, n \in \{1,2\}$$

Bew: Verwende $S_x|\uparrow_z\rangle = \hbar/2|\downarrow_z\rangle, S_x|\downarrow_z\rangle = \hbar/2|\uparrow_z\rangle$
 $S_y|\uparrow_z\rangle = i\hbar/2|\downarrow_z\rangle, S_y|\downarrow_z\rangle = -i\hbar/2|\uparrow_z\rangle$
 $S_z|\uparrow_z\rangle = \hbar/2|\uparrow_z\rangle, S_z|\downarrow_z\rangle = -\hbar/2|\downarrow_z\rangle$

$$S_{(n)}^2 = S_{(n),x}^2 + S_{(n),y}^2 + S_{(n),z}^2$$

$$\vec{S}_{(1)}\vec{S}_{(2)} = S_{(1),x}S_{(2),x} + S_{(1),y}S_{(2),y} + S_{(1),z}S_{(2),z}$$

$$\sqrt{2} S_{(1)}^2|\psi\rangle = (S_{(1)}^2|\uparrow_z\rangle)|\downarrow_z\rangle - (S_{(1)}^2|\downarrow_z\rangle)|\uparrow_z\rangle = 3(\hbar/2)^2(|\uparrow_z\rangle|\downarrow_z\rangle - |\downarrow_z\rangle|\uparrow_z\rangle) = \sqrt{2} 3(\hbar/2)^2|\psi\rangle$$

$$\text{Entsprechend folgt } S_{(2)}^2|\psi\rangle = 3(\hbar/2)^2|\psi\rangle$$

$$\vec{S}_{(1)}|\uparrow_z\rangle\vec{S}_{(2)}|\downarrow_z\rangle = 3(\hbar/2)^2|\downarrow_z\rangle|\uparrow_z\rangle, \vec{S}_{(1)}|\downarrow_z\rangle\vec{S}_{(2)}|\uparrow_z\rangle = 3(\hbar/2)^2|\uparrow_z\rangle|\downarrow_z\rangle$$

$$\Rightarrow \vec{S}_{(1)}\vec{S}_{(2)}|\psi\rangle = -3(\hbar/2)^2|\psi\rangle$$

$$\text{Mit } J^2 = S_{(1)}^2 + S_{(2)}^2 + 2\vec{S}_{(1)}\vec{S}_{(2)} \text{ folgt } J^2|\psi\rangle = 0$$

Ü Mit $|\uparrow_\theta\rangle = \cos(\theta/2) |\uparrow_z\rangle + \sin(\theta/2) |\downarrow_z\rangle$ und $|\downarrow_\theta\rangle = -\sin(\theta/2) |\uparrow_z\rangle + \cos(\theta/2) |\downarrow_z\rangle$ und , $\theta \in \{\alpha, \beta\}$
(11.4) (11.4)

folgt

$$\begin{aligned} \langle \downarrow_\beta | \downarrow_\alpha \rangle &= \sin(\alpha/2) \sin(\beta/2) \langle \uparrow_z | \uparrow_z \rangle + \cos(\alpha/2) \cos(\beta/2) \langle \downarrow_z | \downarrow_z \rangle \\ &\quad - \sin(\alpha/2) \cos(\beta/2) \langle \downarrow_z | \uparrow_z \rangle - \sin(\beta/2) \cos(\alpha/2) \langle \uparrow_z | \downarrow_z \rangle \\ &= \sin(\alpha/2) \sin(\beta/2) + \cos(\alpha/2) \cos(\beta/2) = \cos((\alpha-\beta)/2) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |\langle \downarrow_\beta | \downarrow_\alpha \rangle|^2 = \cos^2((\alpha-\beta)/2)$$

und

$$\begin{aligned} |\uparrow_\theta\rangle |\downarrow_\theta\rangle &= -\sin(\theta/2) \cos(\theta/2) |\uparrow_z\rangle |\uparrow_z\rangle + \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) |\downarrow_z\rangle |\downarrow_z\rangle \\ &\quad - \sin^2(\theta/2) |\downarrow_z\rangle |\uparrow_z\rangle + \cos^2(\theta/2) |\uparrow_z\rangle |\downarrow_z\rangle \\ |\downarrow_\theta\rangle |\uparrow_\theta\rangle &= -\sin(\theta/2) \cos(\theta/2) |\uparrow_z\rangle |\uparrow_z\rangle + \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) |\downarrow_z\rangle |\downarrow_z\rangle \\ &\quad - \sin^2(\theta/2) |\uparrow_z\rangle |\downarrow_z\rangle + \cos^2(\theta/2) |\downarrow_z\rangle |\uparrow_z\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |\uparrow_\theta\rangle |\downarrow_\theta\rangle - |\downarrow_\theta\rangle |\uparrow_\theta\rangle = |\uparrow_z\rangle |\downarrow_z\rangle - |\downarrow_z\rangle |\uparrow_z\rangle$$

12. Wahrscheinlichkeit & Entropie

Grundproblem der statistischen Physik

Ein physikalisches System besitze mögliche Zustände $|i\rangle$, $i = 0, 1, \dots, k$



Für großes k ist es oft unmöglich den genauen Zustand für alle Zeiten exakt zu kennen.

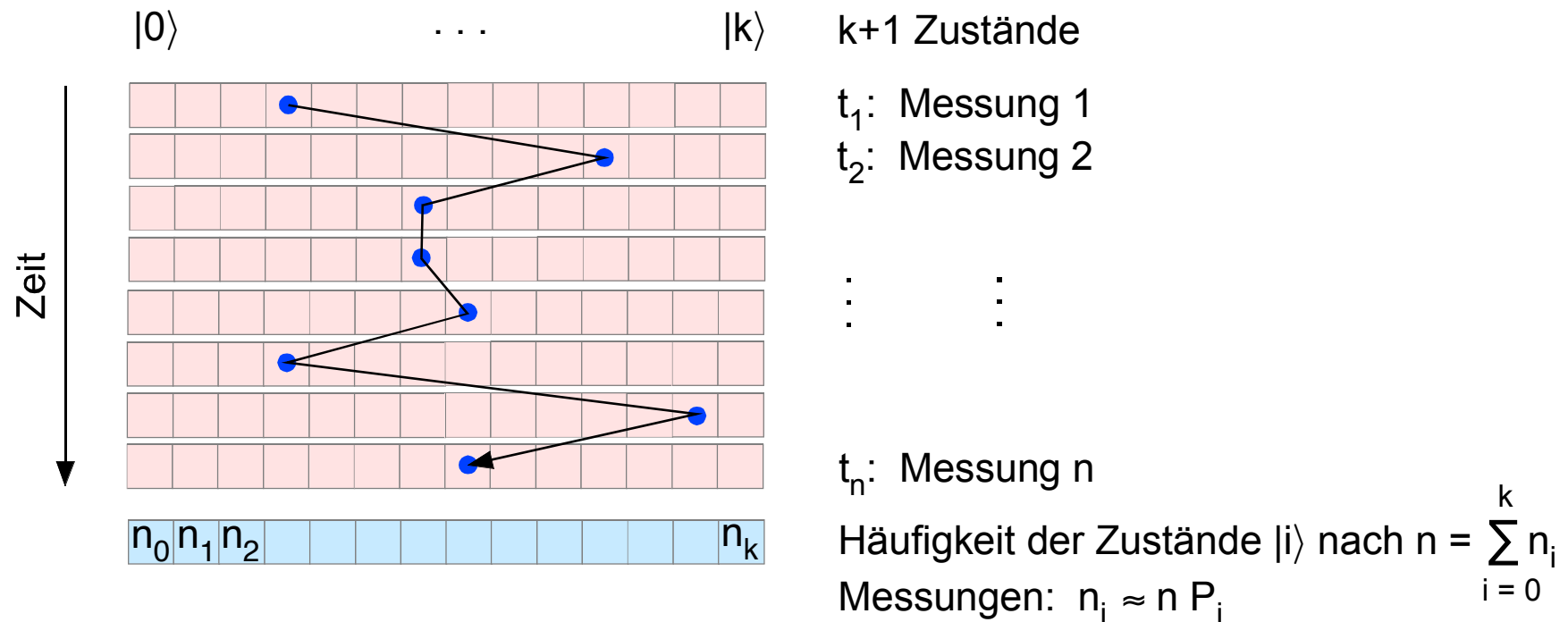
Stattdessen beschreibt man das System durch eine Verteilung P_i , wobei P_i die Wahrscheinlichkeit bedeutet mit welcher der Zustand $|i\rangle$ gemessen werden kann.

$$P_i \in [0,1] \quad \text{mit} \quad \sum_{i=0,1,\dots,k} P_i = 1$$

Zentrale Aufgabe der statistischen Physik ist es, die wahrscheinlichste Verteilung P zu finden.

Die wahrscheinlichste Verteilung P ist diejenige, welche mit dem geringsten Vorurteil verbunden ist und bestimmte physikalische Nebenbedingungen erfüllt, die für das betrachtete System charakteristisch sind (etwa dass die mittlere Energie einen vorgegebenen Wert besitzt).

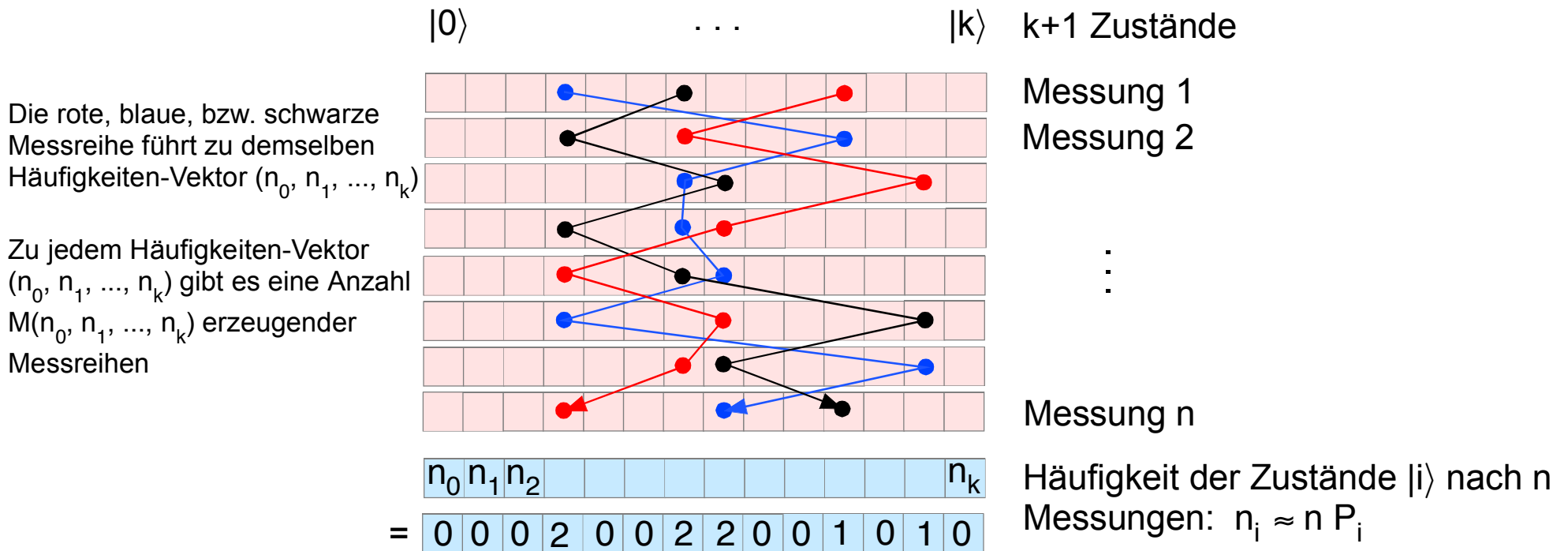
Mikro- und Makrozustände



Ein Mikrozustand $|\psi(t)\rangle$ des Systems entspricht einer Trajektorie im Phasenraum $\{|0\rangle, \dots, |k\rangle\}$. Statt die volle Information über $|\psi(t)\rangle$ zu erhalten, begnügt man sich damit, die Verteilung der Wahrscheinlichkeiten $(P_0, \dots, P_k)$ für das Auftreten der Zustände $\{|0\rangle, \dots, |k\rangle\}$ zu ermitteln. Zustände des Systems, die durch eine bestimmte Verteilung $(P_0, \dots, P_k)$ charakterisiert sind, werden als Makrozustände bezeichnet. Zum gleichen Makrozustand gibt es viele Mikrozustände.

Der wahrscheinlichste Makrozustand ist derjenige, welcher unter bestimmten physikalische Nebenbedingungen (etwa dass die mittlere Energie einen vorgegebenen Wert besitzt) die meisten Mikrozustände umfasst.

Multiplizität und Entropie



Multiplizität der Verteilung $P_0, \dots, P_k$

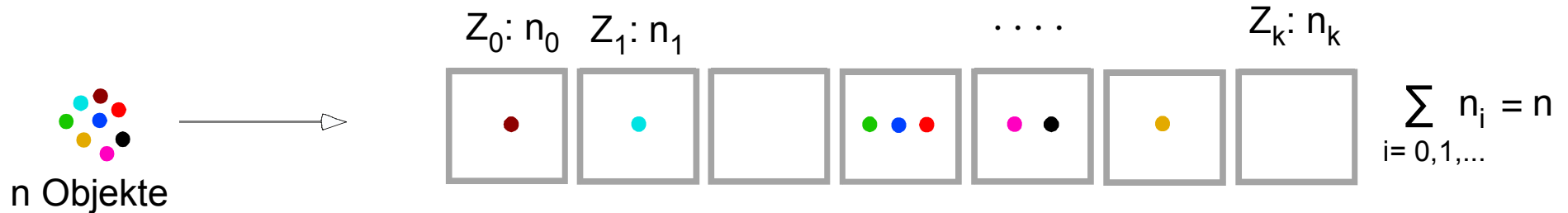
$M_n(n_0, n_1, \dots, n_k) \equiv$ Anzahl der Möglichkeiten bei n Messungen die Häufigkeiten $n_0, n_1, \dots, n_k$ zu finden

$=$ Anzahl der verschiedenen Mikrozustände zum Makrozustand $(n_0, n_1, \dots, n_k)$.

$=$ Anzahl der Möglichkeiten n unterscheidbare Objekte auf $k+1$ Fächer zu verteilen mit n_i Objekten im i -ten Fach.

Multiplizität und Entropie

wie viele Möglichkeiten M gibt es n unterscheidbare Objekte auf $(k+1)$ Fächer Z_0 bis Z_k zu verteilen mit n_i Teilchen im i -ten Fach:



Fülle Z_0 mit n_0 Objekten:

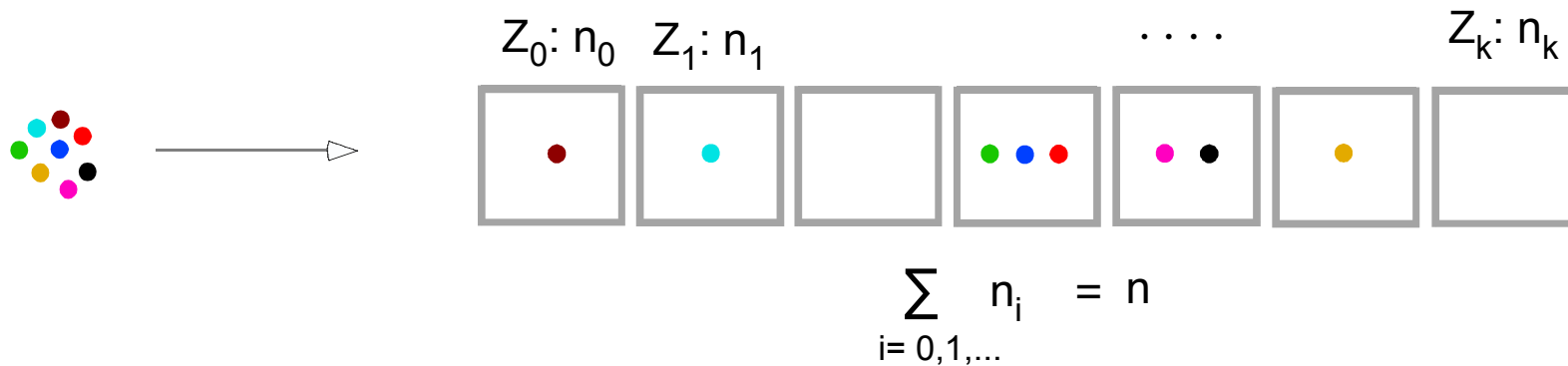
Anzahl der Möglichkeiten n_0 Objekte im Fach Z_0 abzulegen unter Zählung aller möglichen Besetzungsreihenfolgen

$$n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdots (n-n_0+1)$$

$n_0!$ = Anzahl der möglichen Besetzungsreihenfolgen

Anzahl der Möglichkeiten n_0 Objekte im Fach Z_0 abzulegen bei Identifikation aller möglicher Besetzungsreihenfolgen

$$\frac{n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdots (n-n_0+1)}{n_0!} = \frac{n!}{(n-n_0)! n_0!}$$



Fülle Z_0 mit n_0 Objekten: $\frac{n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdots (n-n_0+1)}{n_0!} = \frac{n!}{(n-n_0)! n_0!}$

Fülle Z_1 mit n_1 Objekten: $\frac{(n-n_0) \cdot (n-n_0-1) \cdots (n-n_0-n_1+1)}{n_1!} = \frac{(n-n_0)!}{(n-n_0-n_1)! n_1!}$

$\vdots$

$$M_n = \frac{n!}{(n-n_0)! n_0!} \frac{(n-n_0)!}{(n-n_0-n_1)! n_1!} \frac{(n-n_0-n_1)!}{(n-n_0-n_1-n_2)! n_2!} \cdots = \frac{n!}{n_0! n_1! \cdots n_k!}$$

[verwende Stirlingsche Formel: $\ln(k!) \approx k \ln(k) - k$]

$$\ln(k!) = \sum_{v=1}^k \ln(v) \approx \int_1^k \ln(x) dx = \left[x \ln(x) - x \right]_1^k \approx k \ln(k) - k$$

$\ln(x) = \frac{d}{dx} (x \ln(x) - x)$

$$\ln(M_n) = \ln\left(\frac{n!}{n_0! n_1! \cdots n_k!}\right)$$

$\ln(a \cdot b) = \ln(a) + \ln(b), \ln(a/b) = \ln(a) - \ln(b)$

$$= \ln(n!) - \sum_{i=0,1,\dots} \ln(n_i!) = n \ln(n) - \cancel{n} - \sum_{i=0,1,\dots} (n_i \ln(n_i) - \cancel{n_i})$$

$$\sum_{i=0,1,\dots} n_i = n$$

$$= n \ln(n) - \sum_{i=0,1,\dots} n_i \ln(n_i) = n \ln(n) - \sum_{i=0,1,\dots} n_i (\ln(n) + \ln(n_i/n))$$

$$\ln(n_i) = \ln(n) + \ln(n_i/n)$$

$$= - \sum_{i=0,1,\dots} n_i \ln(n_i/n) \approx -n \sum_{i=0,1,\dots} P_i \ln(P_i)$$

$$P_i \approx n_i / n \text{ for large } n$$

Die Größe $S[P_0, \dots, P_k] \equiv \ln(M_n)/n = - \sum_{i=0,1,\dots} P_i \ln(P_i)$ hängt nur von der Verteilung $[P_0, \dots, P_k]$ ab.

Entropie

Falls keine Verteilung $[P_0, \dots, P_k]$ durch physikalische Wirkungen bevorzugt wird, ist $S[P_0, \dots, P_k]$ ein Maß für die Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens. Die wahrscheinlichste Verteilung $[P_0, \dots, P_k]$ ist diejenige, für die $S[P_0, \dots, P_k]$ maximal wird. Wir bezeichnen $S[P_0, \dots, P_k]$ als Entropie.

Axiomatische Einführung der Entropie

Wir benötigen eine Größe $S(P)$, die für jede mögliche Verteilung P den Grad der mit P verbundenen Vorurteilsfreiheit (Ignoranz) misst. Diese Größe wird als **ENTROPIE** bezeichnet.

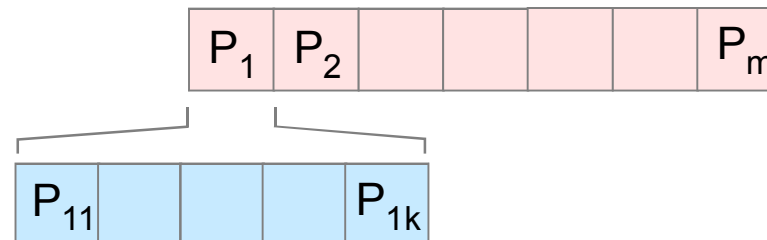
S1. $S(P_1, \dots, P_m) \geq 0$ stetig in P_i , $S(1) = 0$

S2. Gleichverteilung besitzt maximale Entropie $1 = \sum_{i=1}^m P_i \Rightarrow S(P_1, \dots, P_m) \leq S(1/m, \dots, 1/m)$

S3. Additivität: $S(P_1, \dots, P_m, 0) = S(P_1, \dots, P_m)$

P_1	P_2					P_m	0
-------	-------	--	--	--	--	-------	---

$$P_1 = \sum_{v=1}^k P_{1v} \Rightarrow S(P_{11}, \dots, P_{1k}, P_2, \dots, P_m) = S(P_1, \dots, P_m) + P_1 S\left(\frac{P_{11}}{P_1}, \dots, \frac{P_{1k}}{P_1}\right)$$



Shannon 1948: Durch die Bedingungen **S1,S2,S3** ist S eindeutig bestimmt zu:

$$S(P_1, \dots, P_m) = -\kappa \sum_{i=1}^m P_i \ln(P_i) \quad \kappa \quad \text{positive Konstante}$$

Shannon, C.E. (1948) "A Mathematical Theory of Communication" Bell Syst. Tech. J., 27, 379-423, 623-656

Bestimmung der wahrscheinlichsten Verteilung P :

Annahme: es gelten für P die Nebenbedingungen $0 = f_0(P) = f_1(P) = f_2(P) = \dots$
 $f_\mu(P)$ differenzierbare Funktionen von P , ($P \equiv \vec{P} = (P_1, \dots, P_m)$)

Normierung der Wahrscheinlichkeitsverteilung P erfordert immer mindestens

eine Nebenbedingung: $0 = f_0(P) \equiv 1 - \sum_{i=1}^m P_i$ andere mögliche Nebenbedingungen:
konstante mittlere Energie, Teilchenzahl, etc.

Bestimmung von P :

Suche lokales Maximum von $S(P)$ unter den Nebenbedingungen $0 = f_0(P) = f_1(P) = \dots$

Methode der Lagrange-Parameter:

$$\text{lokales Maximum} \Rightarrow 0 = dS = \sum_{i=1}^m \frac{\partial S}{\partial P_i} dP_i$$

wegen Nebenbedingungen $0 = f_j(P)$, $j=0,\dots,k$ sind dP_i nicht voneinander unabhängig

$$\Rightarrow \frac{\partial S}{\partial P_i} \text{ nicht alle notwendig} = 0$$

$$\text{Aus } f_j = 0 \text{ folgt } 0 = \lambda_j df_j = \lambda_j \sum_{i=1}^m \frac{\partial f_j}{\partial P_i} dP_i \quad \text{für beliebige Parameterwerte } \lambda_j$$

$$\Rightarrow 0 = dS + \sum_{j=0}^k \lambda_j df_j = \sum_{i=1}^m \frac{\partial}{\partial P_i} \left[S + \sum_{j=0}^k \lambda_j f_j \right] dP_i$$

Unter Berücksichtigung von $k+1$ Nebenbedingungen sind $m - (k+1)$ Differentiale dP_i unabhängig
Die $k+1$ freien Parametern λ_j können so gewählt werden, dass

$$0 = \frac{\partial}{\partial P_i} \left[S + \sum_{j=0}^k \lambda_j f_j \right] \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, m\}$$

Bedingung zur Bestimmung der wahrscheinlichsten Verteilung P:

Gradient von $S(P)$ ist Linearkombination der Gradienten der Nebenbedingungen $f_j(P)$

$$\Rightarrow 0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial P_i} \left[S(P) + \lambda_0 f_0(P) + \lambda_1 f_1(P) + \dots \right]$$

die freien Parameter λ_j heißen Lagrange-Parameter

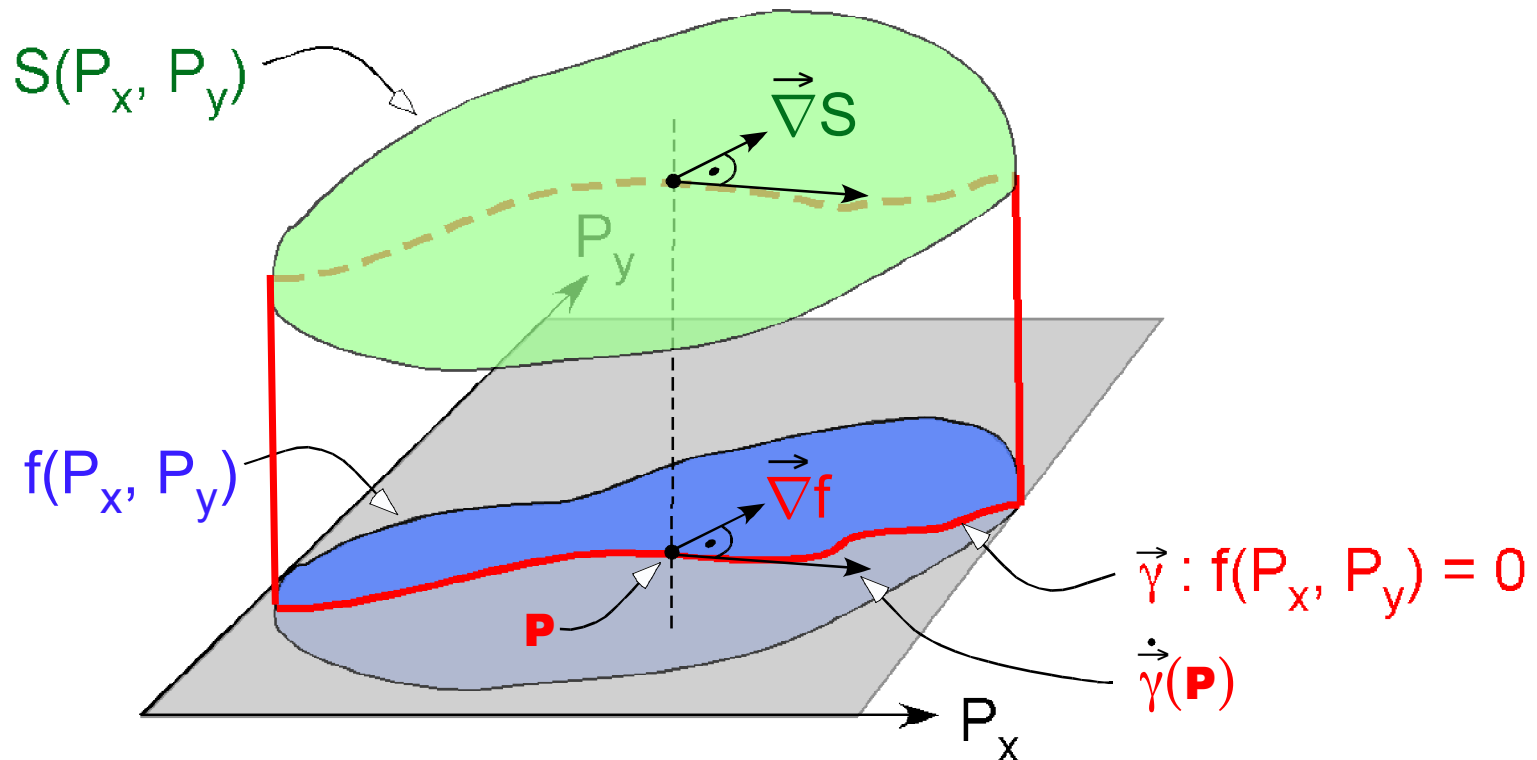
$$\left. \begin{aligned} f_0(P) &= 1 - \sum_{j=1}^m P_j \\ S(P_1, \dots, P_m) &= -\kappa \sum_{j=1}^m P_j \ln(P_j) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial P_i} f_0(P_1, \dots, P_m) &= -1 \\ \frac{\partial}{\partial P_i} S(P_1, \dots, P_m) &= -\kappa (\ln(P_i) + 1) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow 0 = -\kappa (\ln(P_i) + 1) - \lambda_0 + \frac{\partial}{\partial P_i} \left[\lambda_1 f_1(P) + \dots \right] \quad (12.1)$$

BSP Gleichverteilung: außer Normierung von P keine weitere Nebenbedingung

$$0 = -\kappa (\ln(P_i) + 1) - \lambda_0 \Rightarrow \text{Alle } P_i \text{ sind gleich} \Rightarrow \begin{aligned} P_i &= 1/m \\ S &= \kappa \ln(m) \end{aligned}$$

Graphische Veranschaulichung in 2D:



Maximiere $S(P_x, P_y)$ unter der Bedingung $f(P_x, P_y) = 0$:

$f(P_x, P_y) = 0$ längs Nebenbedingungskurve $\vec{\gamma}$ $\Rightarrow \vec{\nabla} f$ steht längs $\vec{\gamma}$ senkrecht auf $\dot{\vec{\gamma}}$

$S(P_x, P_y)$ bei $\mathbf{P}$ maximal längs Nebenbedingungskurve $\vec{\gamma}$ $\Rightarrow \vec{\nabla} S$ steht bei $\mathbf{P}$ senkrecht auf $\dot{\vec{\gamma}}$

$\Rightarrow \vec{\nabla} f$ und $\vec{\nabla} S$ sind bei $\mathbf{P}$ parallel : $\vec{\nabla}(S + \lambda f) = 0$ $\lambda = \text{Lagrange-Parameter}$