

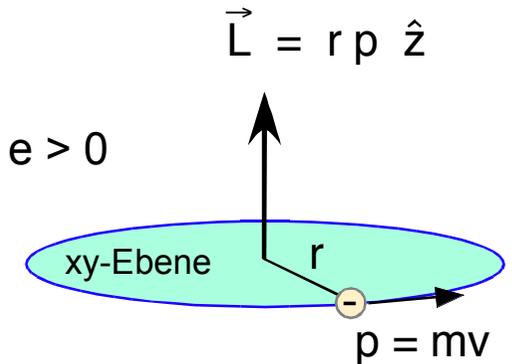
9. Magnetisches Moment & Spin

Drehimpuls und magnetisches Moment

Klassisch: Stromschleife mit Fläche $A = \pi r^2$

Strom: $I = -e / T$, $T = 2\pi r / v \equiv$ Umlaufzeit der Ladung $-e$, $e > 0$

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



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

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

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

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

$\omega_B =$ Larmor-Frequenz

$g_L =$ gyromagnetisches Verhältnis

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

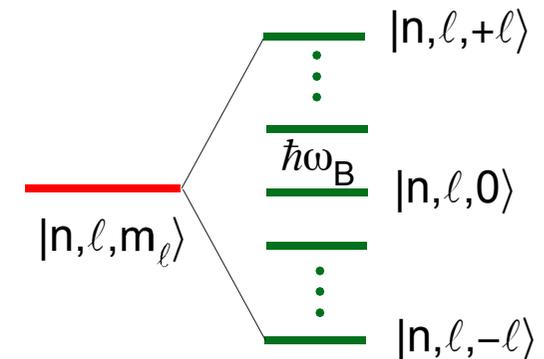
Betrachte Eigenzustand $|n, \ell, m_\ell\rangle$ des Wasserstoff-Atoms

Gesamt-Hamiltonoperator: $H + W$

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

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

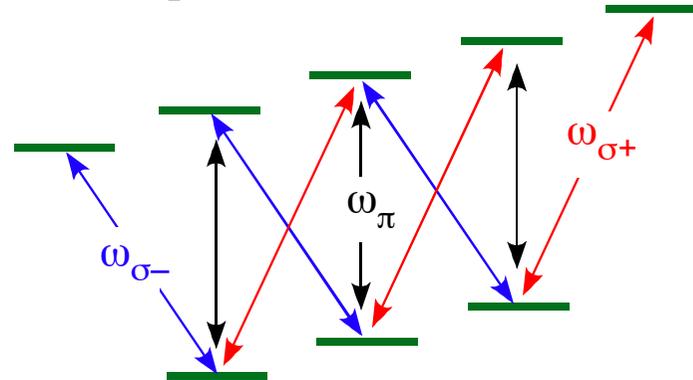
$$E_{n, m_\ell} = E_n + \hbar \omega_B m_\ell$$



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

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

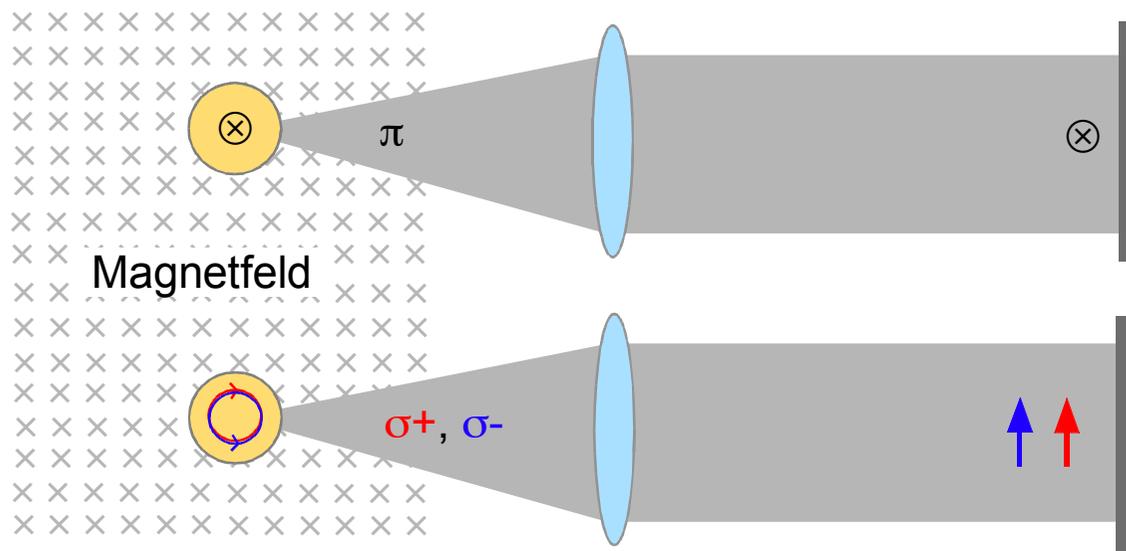


$$\omega_\pi = (E_3 - E_2) / \hbar$$

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

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

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

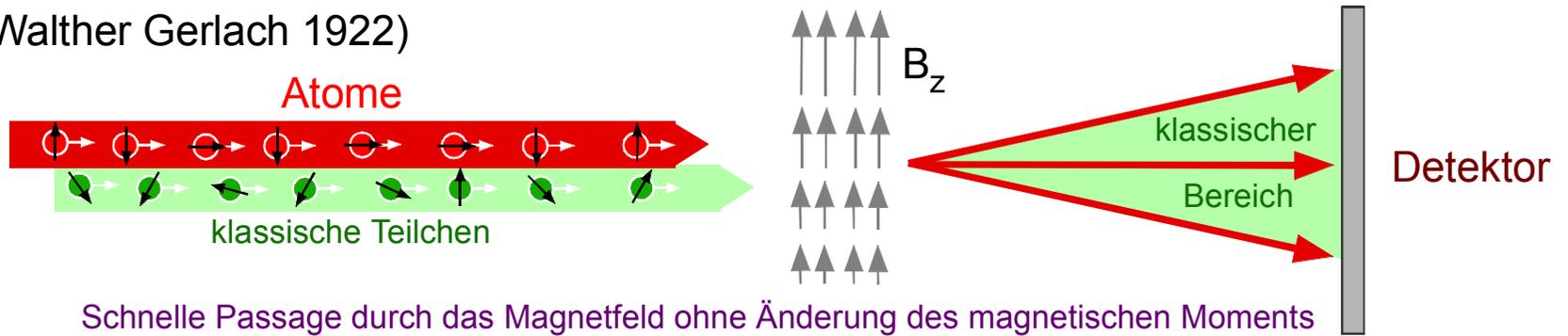


$$\omega_\pi = (E_3 - E_2) / \hbar$$

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

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

Stern-Gerlach-Experiment: Ablenkung von Atomen im inhomogenen Magnetfeld (Otto Stern, Walther Gerlach 1922)



Klassisch: $W = - \vec{m}_L \vec{B}$, $\vec{F} = -\vec{\nabla}W$, 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: $W = - \vec{M} \vec{B}(\vec{R})$

Wirkt auf Schwerpunktskoordinate R
 Wirkt auf Relativkoordinate r

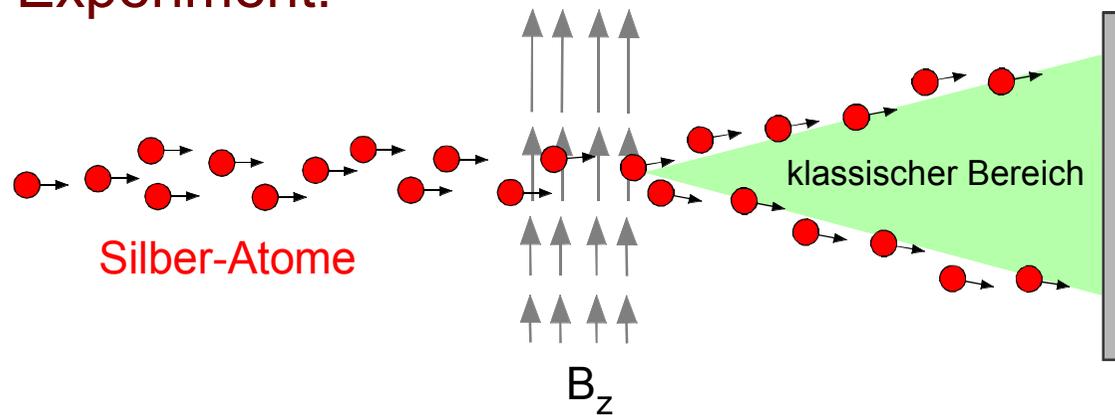
Kraft: $\vec{F} = -\vec{\nabla}_R W = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{\nabla}_R (\vec{L} \vec{B}) = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \left(\vec{L} \frac{\partial \vec{B}}{\partial x}, \vec{L} \frac{\partial \vec{B}}{\partial y}, \vec{L} \frac{\partial \vec{B}}{\partial z} \right)$

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

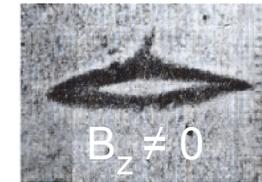
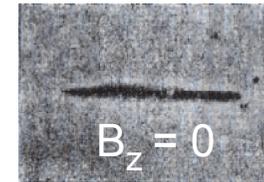
s-Zustand $\Rightarrow l = 0, m_\ell = 0 \Rightarrow$ keine Ablenkung erwartet

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

Experiment:



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

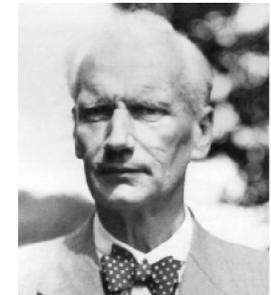


FAZIT:

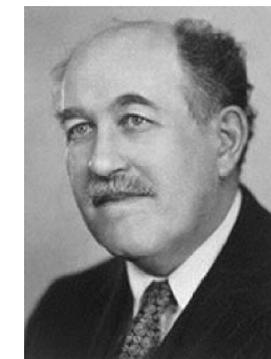
- Bestätigung der Richtungsquantisierung
- Der Grundzustand von Silber zeigt Drehimpuls $\ell = 1/2$

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

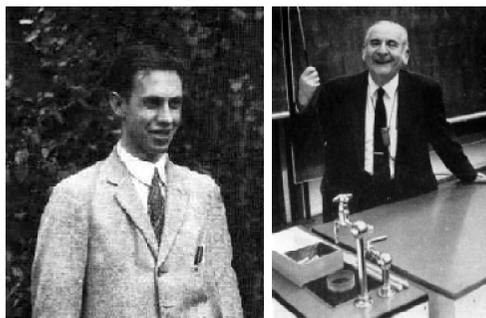
Erklärung: Das Elektron hat einen Eigendrehimpuls (Spin) $s = 1/2$
Uhlenbeck and Goudsmit, Nature, 117, 264 (1926)



Walther Gerlach
(1889 - 1979)



Otto Stern
(1888 - 1969)
Nobelpreis 1943



George Eugene Uhlenbeck
(1900-1988)

Samuel Abraham Goudsmit
(1902-1978)

Der Spin des Elektrons

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

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

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

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

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

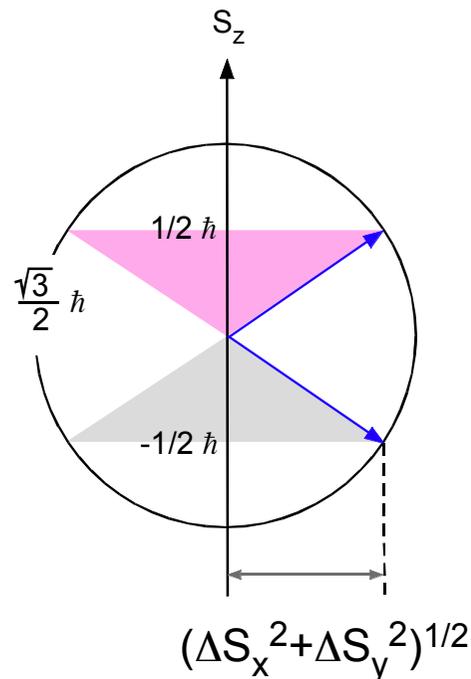
$$S_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle$$

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

Im Allgemeinen kann "s" halbzahlig oder ganzzahlig sein

für Elektron: $s = 1/2$

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



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

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

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

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

$$m_s = \pm 1/2$$

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

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

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

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

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)

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

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

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

σ_j heißen Pauli-Matrizen

χ_{\pm} heißen Pauli-Spinoren



Wolfgang Pauli
(1900 - 1958)
Nobelpreis 1945

Ü Nützliche Beziehungen zwischen Pauli-Matrizen:

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

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

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

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

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)

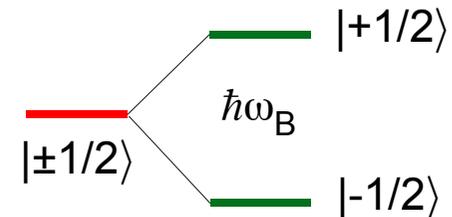
Wechselwirkung des magnetischen Moments \vec{m}_s mit einem magnetischen Feld $\vec{B} = |\vec{B}| \hat{B}$:

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

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

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

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

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

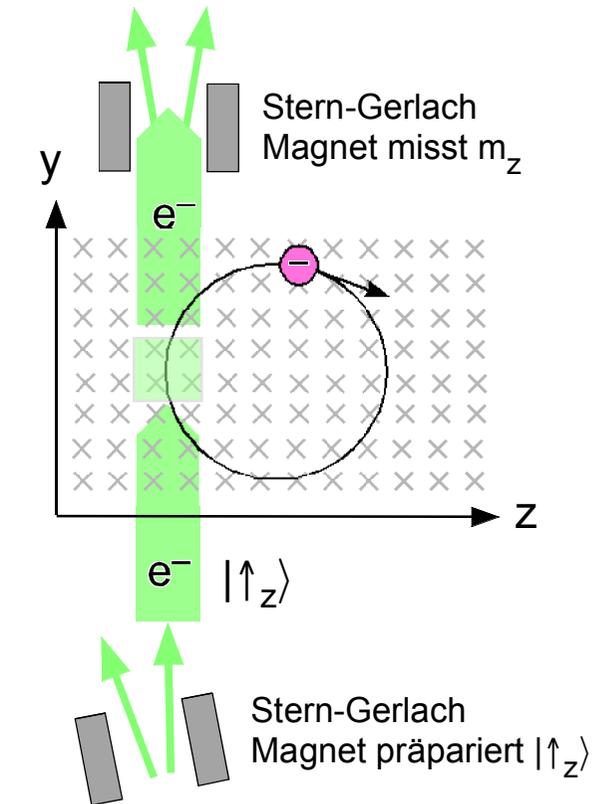
Wahrscheinlichkeit $m_z = +1/2$ zu messen: $|\langle\uparrow_z|\chi(t)\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{1}{2}\omega_B t\right) = (1 + \cos(\omega_B t))$

Zyklotron-Bewegung:

Elektronen der Ladung e kreisen in homogenem Magnetfeld B_x :

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

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



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

$$\text{Basis: } \{ |l, m_l\rangle \}$$

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

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

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

$$\text{Basis: } \{ |l, m_l, s, m_s\rangle \equiv |l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle \}$$

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

$$\text{Basis: } \{ |l, m_l, s, m_s\rangle \equiv |l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle \}$$

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

Gesamt-Drehimpuls

$$\text{Basis: } \{ |l, m_l, s, m_s\rangle \equiv |l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle \}$$

(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 $j \in \{ |l - s|, |l + s| \}$

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

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

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

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

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

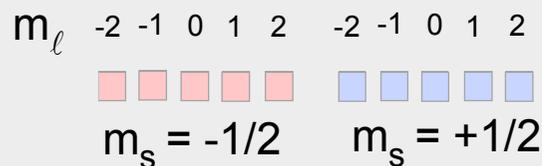
 **BEW:** Theorievorlesung

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

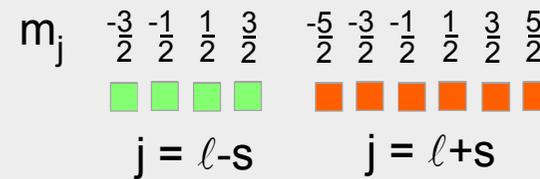
$$|j, l, m_j\rangle = \sum_{m_l, m_s} \langle l, m_l, s, m_s | j, l, m_j\rangle |l, m_l, s, m_s\rangle$$

 Clebsch-Gordan Koeffizienten

BSP: $l=2$



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



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

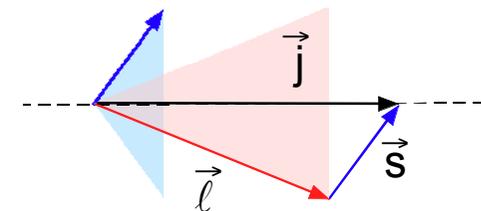
Für die Zustände $|j, \ell, m_j\rangle$ gilt:

$\vec{J}, \vec{L}, \vec{S}$ 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} :

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

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

Landé-Faktor

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

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

Klassisches Vektormodell



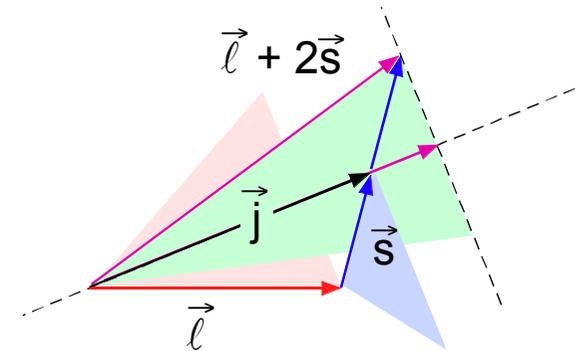
Für die Zustände $|j, \ell, m_j\rangle$ gilt:

$\vec{J}, \vec{L}, \vec{S}, \vec{L} + 2\vec{S}$ 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)

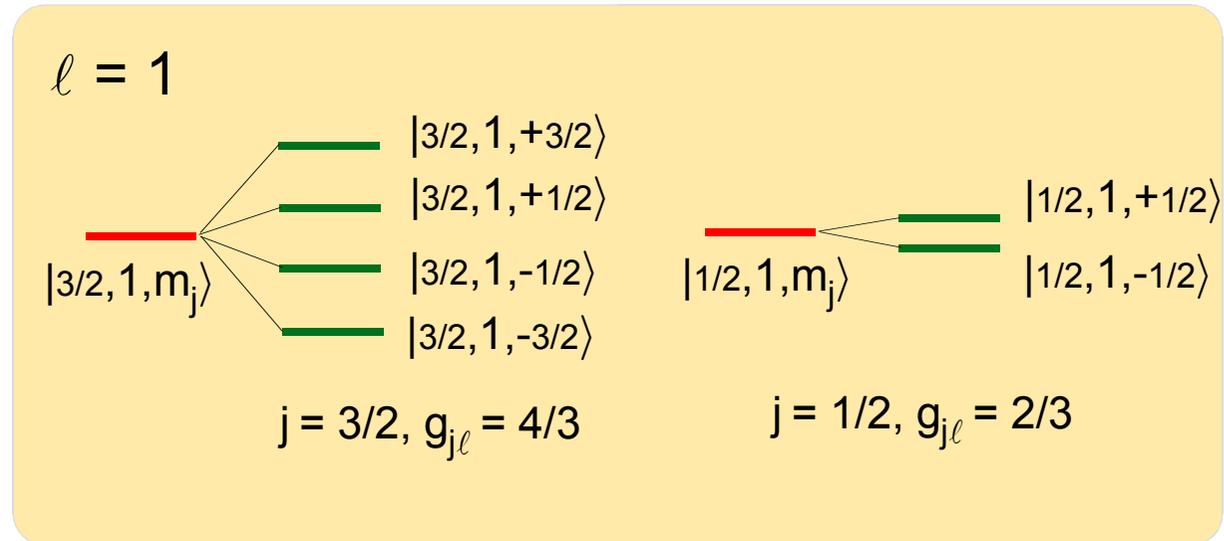
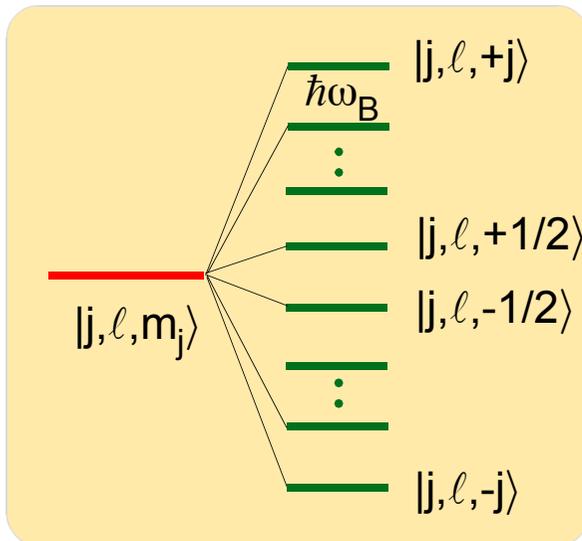
Einfluss des Spins auf den Zeeman-effekt: (anormaler Zeeman-Effekt)

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

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

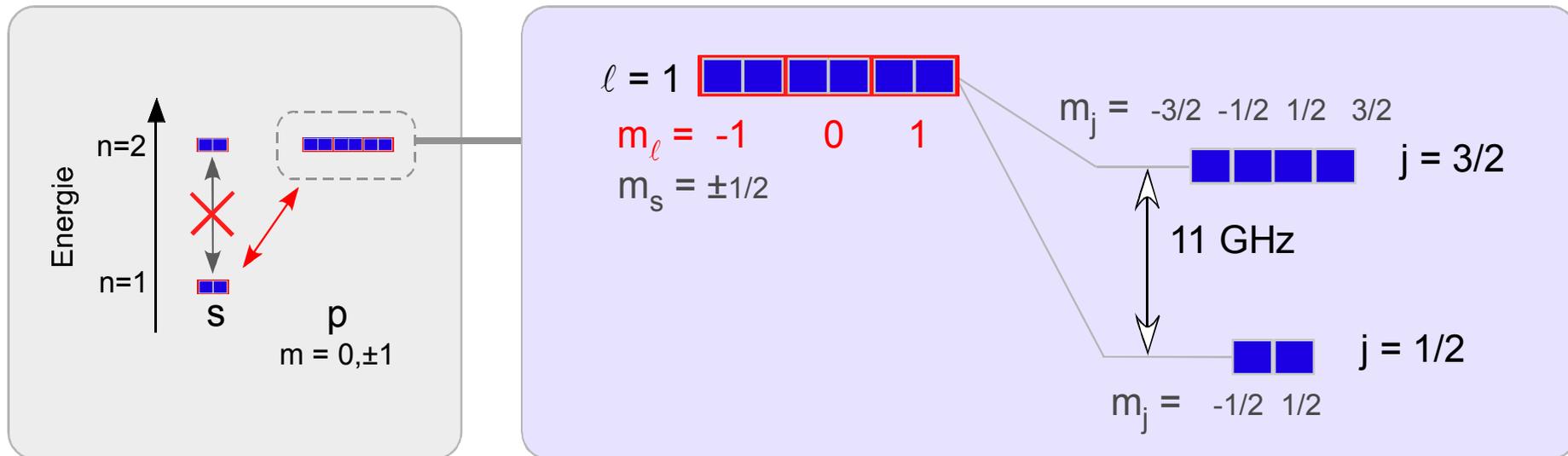


10. Die Feinstruktur des Wasserstoff-Atoms

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

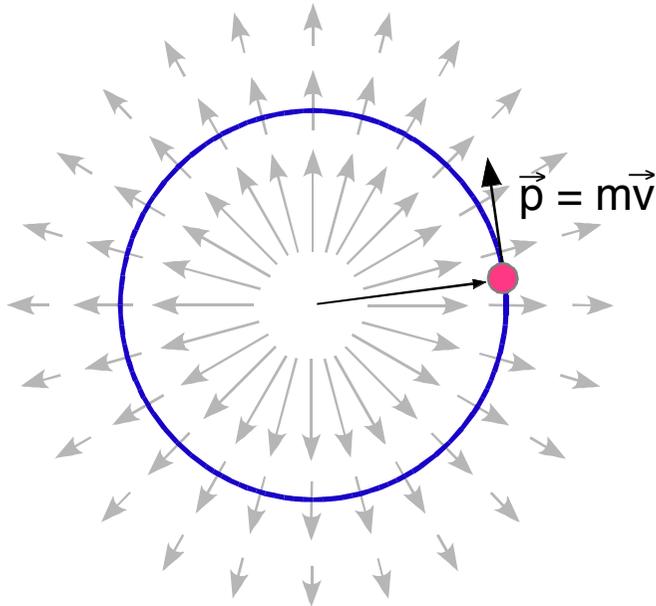
Erklärung: Spin-Bahn-Wechselwirkung

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 \rightarrow folgt direkt aus Dirac-Gleichung

Wasserstoff mit Spin-Bahn-Wechselwirkung

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

$2 \vec{L} \vec{S} = J^2 - L^2 - S^2$, $\vec{J} \equiv \vec{L} + \vec{S}$ **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:

$\mathbf{H} = \mathbf{H}_r \otimes \mathbf{H}_\Omega \otimes \mathbf{C}^2$
 $R_{n,l}(r)$ $Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$ χ_{\pm} **Spinoren**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Relativistische Korrektur der kinetischen Energie

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

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

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

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

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

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

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

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

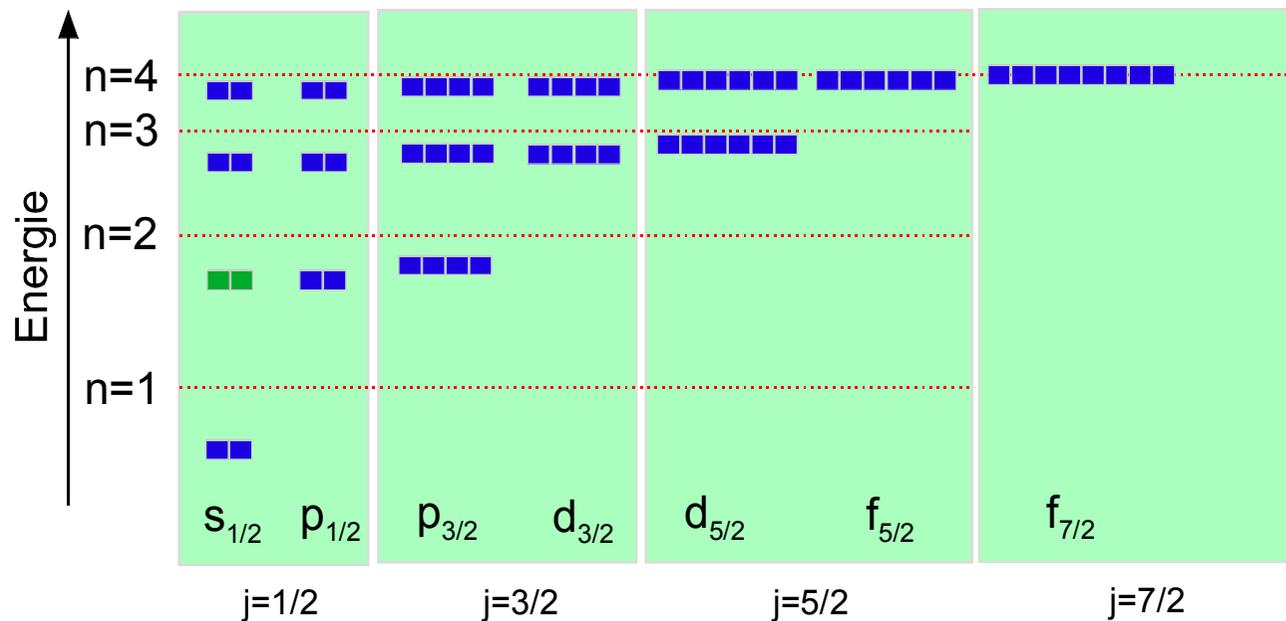
$$\Rightarrow E_{n,j,\ell}^{(R)} = -\frac{1}{2mc^2} \left(E_n^2 - 2E_n \langle n, j, \ell, m_j | V(R) | n, j, \ell, m_j \rangle + \langle n, j, \ell, m_j | V(R)^2 | n, j, \ell, m_j \rangle \right)$$

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

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

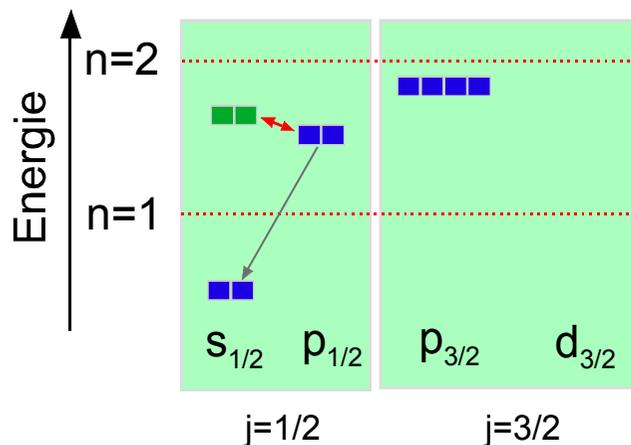
j = Gesamt-Drehimpuls

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} : $i = 1/2, m_i \in \{-1/2, 1/2\}$

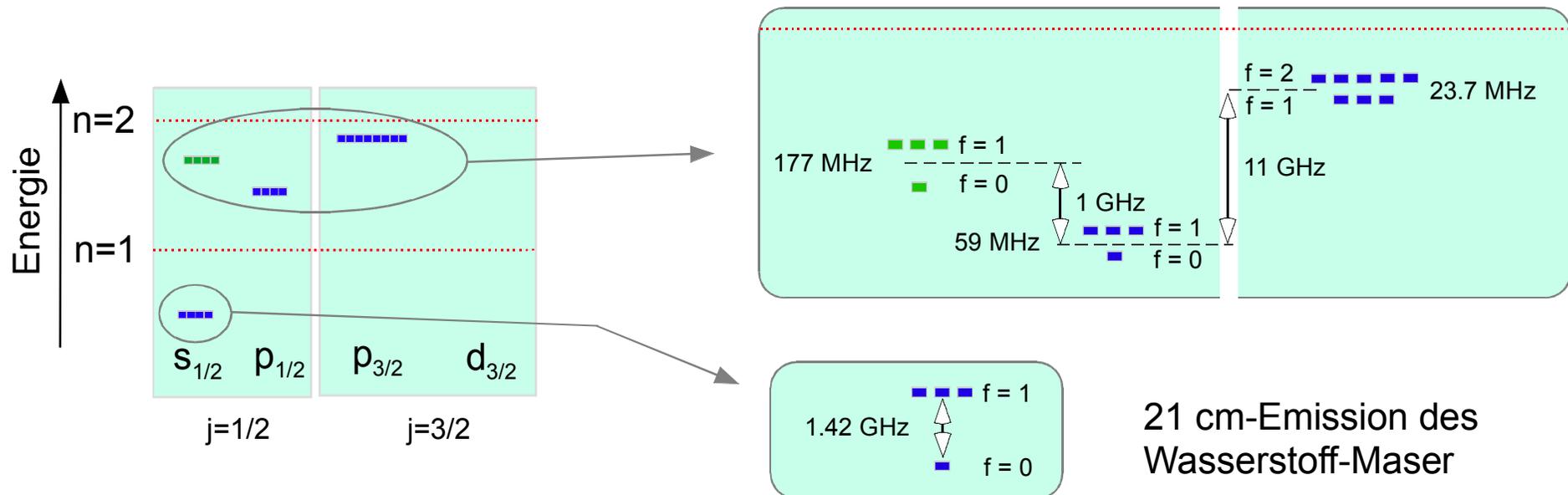
Gesamtdrehimpuls: $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$

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

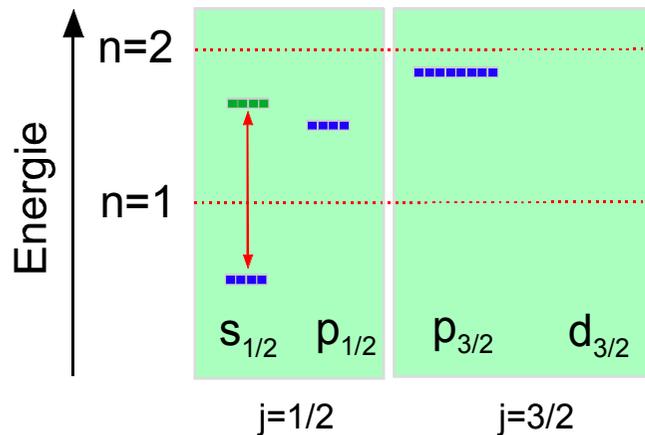
Magnetische Momente von Elektron und Proton wechselwirken → Aufspaltung (Hyperfeinstruktur)



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:

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

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

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

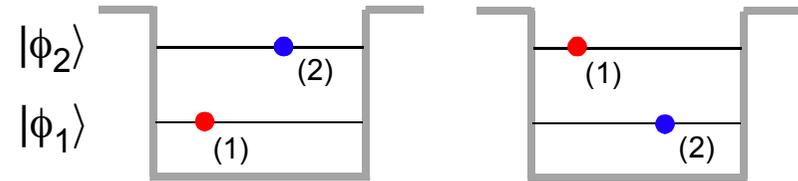
Funktionen von Produkt-Operatoren:

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

Ununterscheidbare Teilchen:

Zwei unterscheidbare Teilchen:

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



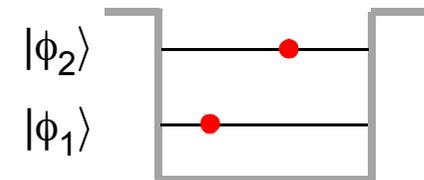
Zwei ununterscheidbare Teilchen:

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

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

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

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

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:

$$|\psi_-\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} p(\sigma) |\phi_1(\sigma(1))\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_N(\sigma(N))\rangle$$

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

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

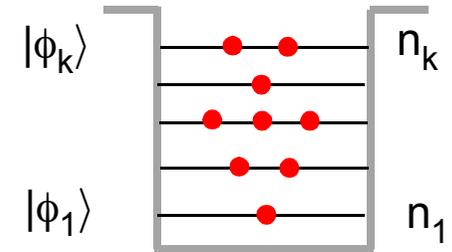
Einteilchenzustände können mehrfach besetzt werden \Rightarrow **BOSONEN**

N Teilchen:

$$|\psi_+\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} |\phi_1(\sigma(1))\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_N(\sigma(N))\rangle$$

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:

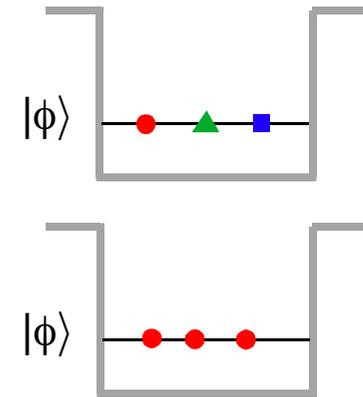
$$|n_1, \dots, n_k\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} |\phi_1(\sigma(1))\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_1(\sigma(n_1))\rangle \otimes |\phi_2(\sigma(n_1+1))\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_2(\sigma(n_1+n_2))\rangle \otimes \dots$$

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 $|\phi\rangle$

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

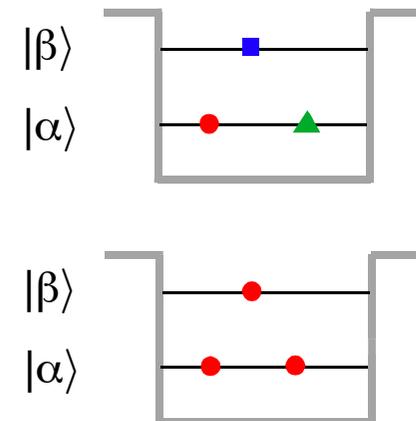


BSP2: 3 unterscheidbare Teilchen: zwei in $|\alpha\rangle$, eins in $|\beta\rangle$

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

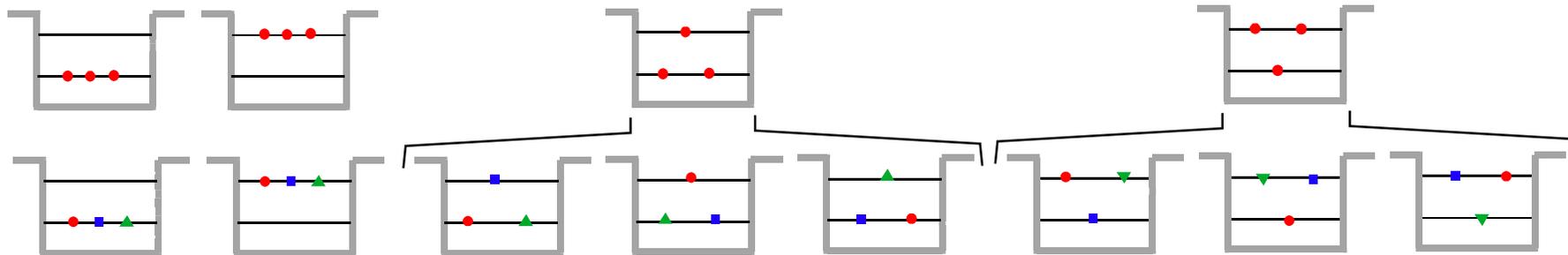


3 Bosonen: zwei in $|\alpha\rangle$, eins in $|\beta\rangle$



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

BSP3: Unterscheidbare Teilchen \leftrightarrow Bosonen



Mehrfachbesetzung ist viel wahrscheinlicher für Bosonen

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

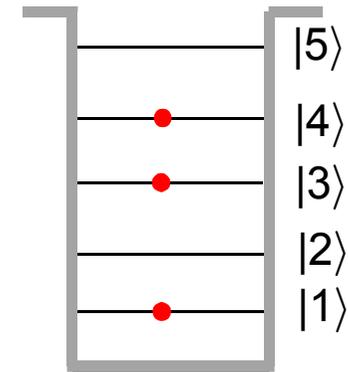
$$|\beta\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle$$

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

BSP4: 3 Fermionen

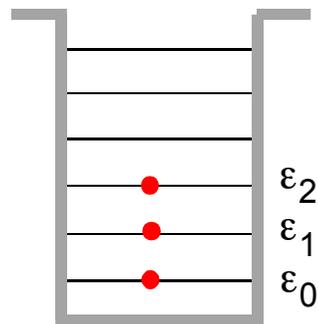
$$|1,0,1,1,0\rangle \equiv$$

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

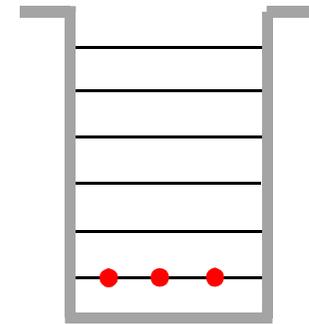


BSP5: Grundzustand für N Fermionen bzw. N Bosonen ohne Wechselwirkung

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



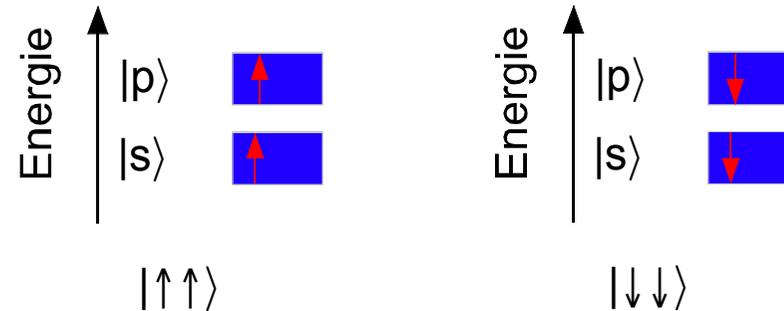
$$E = N \epsilon_0$$



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 Niveaus



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

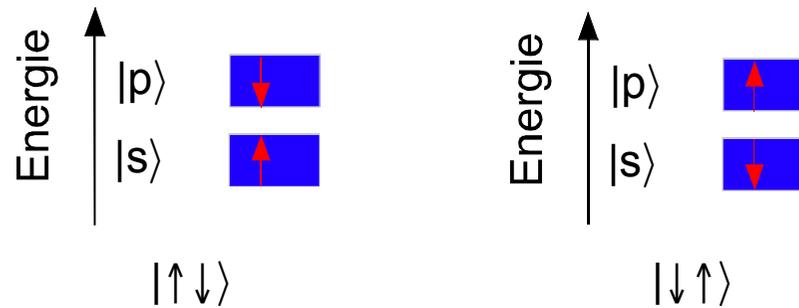
$$|\downarrow\downarrow\rangle = |s,\downarrow\rangle_1 \otimes |p,\downarrow\rangle_2 - |p,\downarrow\rangle_1 \otimes |s,\downarrow\rangle_2 = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 \otimes (|s\rangle_1 \otimes |p\rangle_2 - |p\rangle_1 \otimes |s\rangle_2)$$

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 Niveaus

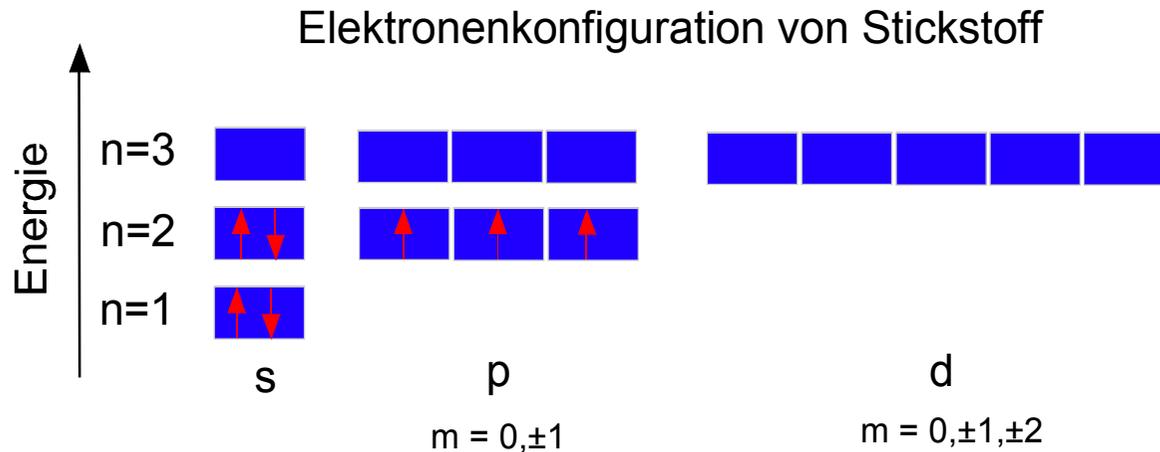


$$|\uparrow\downarrow\rangle = |s,\uparrow\rangle_1 \otimes |p,\downarrow\rangle_2 - |p,\downarrow\rangle_1 \otimes |s,\uparrow\rangle_2$$

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

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

BSP8: Mehrelektronenatome

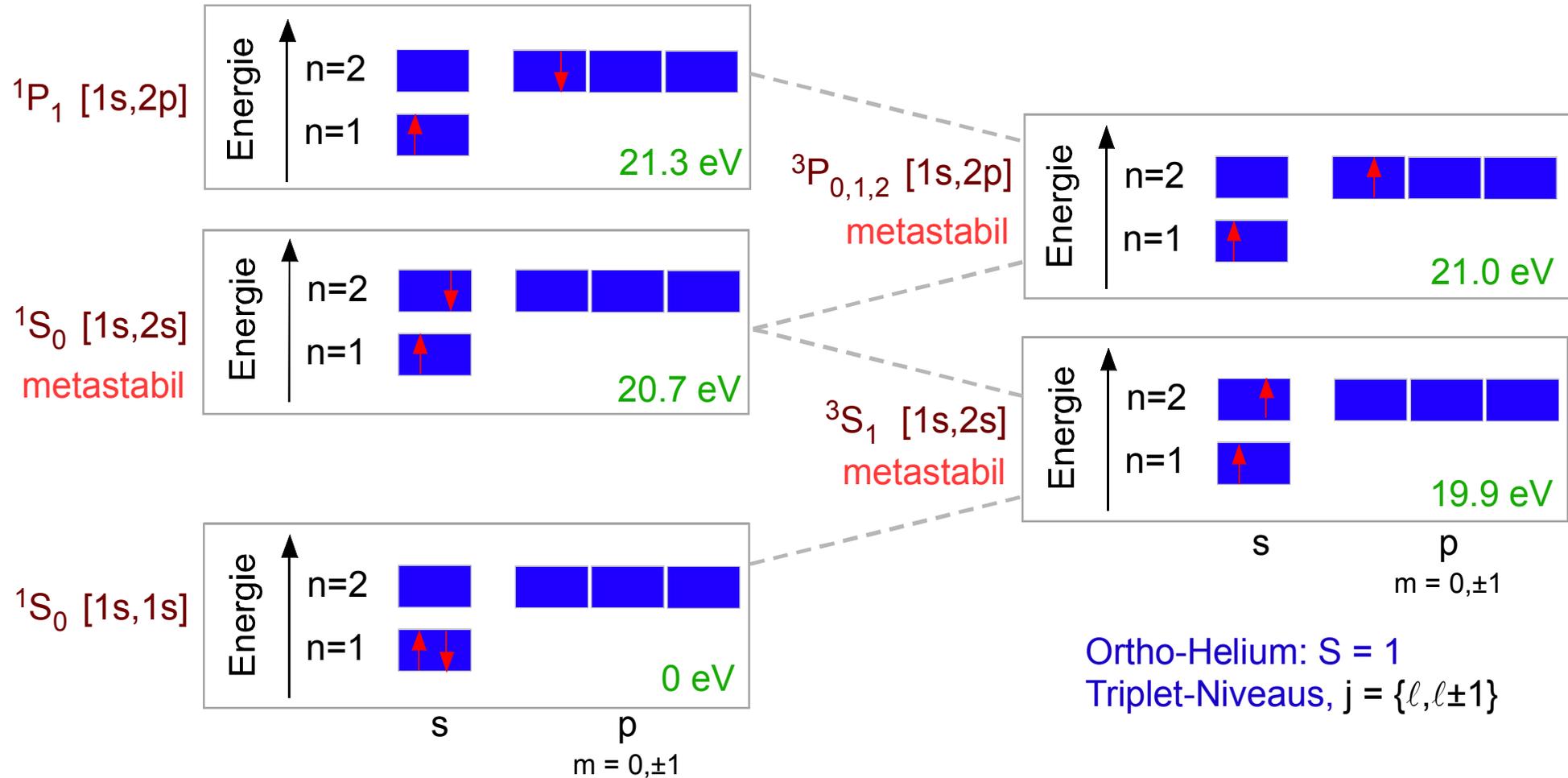


1. Elektronen sind Fermionen, es gilt das Pauli-Prinzip: Zwei Elektronen unterscheiden sich durch mindestens eine der Quantenzahlen: n , L , m_L , m_S
2. Hund'sche Regel: Spins innerhalb eines Niveaus mit gleichem L paaren sich maximal parallel

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



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

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

1 H Hydrogen																	2 He Helium						
3 Li Lithium	4 Be Beryllium																	5 B Boron	6 C Carbon	7 N Nitrogen	8 O Oxygen	9 F Fluorine	10 Ne Neon
11 Na Sodium	12 Mg Magnesium																	13 Al Aluminium	14 Si Silicon	15 P Phosphorus	16 S Sulfur	17 Cl Chlorine	18 Ar Argon
19 K Potassium	20 Ca Calcium	21 Sc Scandium	22 Ti Titanium	23 V Vanadium	24 Cr Chromium	25 Mn Manganese	26 Fe Iron	27 Co Cobalt	28 Ni Nickel	29 Cu Copper	30 Zn Zinc	31 Ga Gallium	32 Ge Germanium	33 As Arsenic	34 Se Selenium	35 Br Bromine	36 Kr Krypton						
37 Rb Rubidium	38 Sr Strontium	39 Y Yttrium	40 Zr Zirconium	41 Nb Niobium	42 Mo Molybdenum	43 Tc Technetium	44 Ru Ruthenium	45 Rh Rhodium	46 Pd Palladium	47 Ag Silver	48 Cd Cadmium	49 In Indium	50 Sn Tin	51 Sb Antimony	52 Te Tellurium	53 I Iodine	54 Xe Xenon						
55 Cs Cesium	56 Ba Barium	57 to 71	72 Hf Hafnium	73 Ta Tantalum	74 W Tungsten	75 Re Rhenium	76 Os Osmium	77 Ir Iridium	78 Pt Platinum	79 Au Gold	80 Hg Mercury	81 Tl Thallium	82 Pb Lead	83 Bi Bismuth	84 Po Polonium	85 At Astatine	86 Rn Radon						
87 Fr Francium	88 Ra Radium	89 to 103	104 Rf Rutherfordium	105 Db Dubnium	106 Sg Seaborgium	107 Bh Bohrium	108 Hs Hassium	109 Mt Meitnerium	110 Ds Darmstadtium	111 Rg Roentgenium	112 Uub Ununbium	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117	118						

- Alkali metals
- Alkaline earth metals
- Transition metals
- Lanthanide series
- Actinide series
- Poor metals
- Nonmetals
- Noble gases
- C Solid
- Br Liquid
- H Gas
- Tc Synthetic

s-Orbitale werden gefüllt

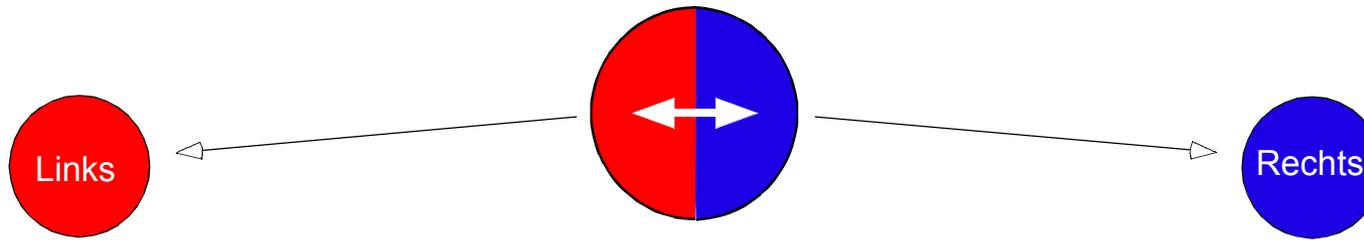
d-Orbitale werden gefüllt

p-Orbitale werden gefüllt

57 La Lanthanum	58 Ce Cerium	59 Pr Praseodymium	60 Nd Neodymium	61 Pm Promethium	62 Sm Samarium	63 Eu Europium	64 Gd Gadolinium	65 Tb Terbium	66 Dy Dysprosium	67 Ho Holmium	68 Er Erbium	69 Tm Thulium	70 Yb Ytterbium	71 Lu Lutetium
89 Ac Actinium	90 Th Thorium	91 Pa Protactinium	92 U Uranium	93 Np Neptunium	94 Pu Plutonium	95 Am Americium	96 Cm Curium	97 Bk Berkelium	98 Cf Californium	99 Es Einsteinium	100 Fm Fermium	101 Md Mendelevium	102 No Nobelium	103 Lr Lawrencium

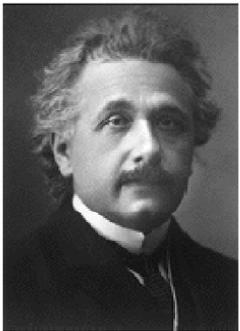
f-Orbitale werden gefüllt

Das EPR Problem (1935)



$$|\psi\rangle = |\text{Links},1\rangle |\text{Rechts},2\rangle + |\text{Links},2\rangle |\text{Rechts},1\rangle$$

Zwei durch einen gemeinsamen verschränkten Quantenzustand beschriebene Teilsysteme werden nach Wechselwirkung raumartig getrennt. An beiden Teilchen werden nach der Trennung Messungen durchgeführt.



Albert Einstein
(1879 – 1955)



Boris Podolsky
(1896 – 1966)



Nathan Rosen
(1909 – 1995)

Kann das Ergebnis einer Messung rechts durch Messung links beeinflusst werden?
⇒ Spukhafte Fernwirkung ?

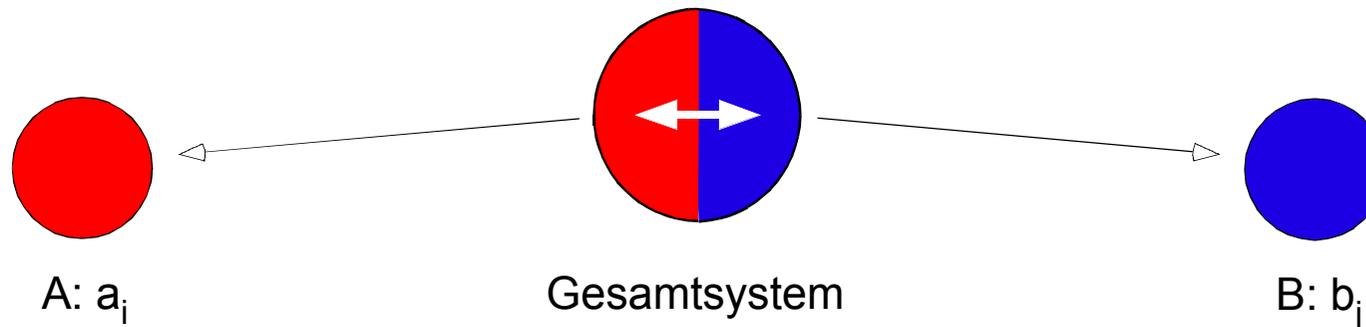
Ist die probabilistische Natur der QM ein Zeichen ihrer Unvollständigkeit? Kann man durch Einführung von zusätzlichen (fluktuiierenden) “verborgenen” Parametern Vollständigkeit erzielen, sodass Wahrscheinlichkeiten nur als Ausdruck von Unkenntnis in Erscheinung treten?

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

Lokaler Realismus und verborgene Parameter



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



Vervollständigung durch verborgene Parameter und lokaler Realismus:

Es gibt 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

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

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:

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



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

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

Die Wahrscheinlichkeit a_i und b_j zu messen ist dann

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

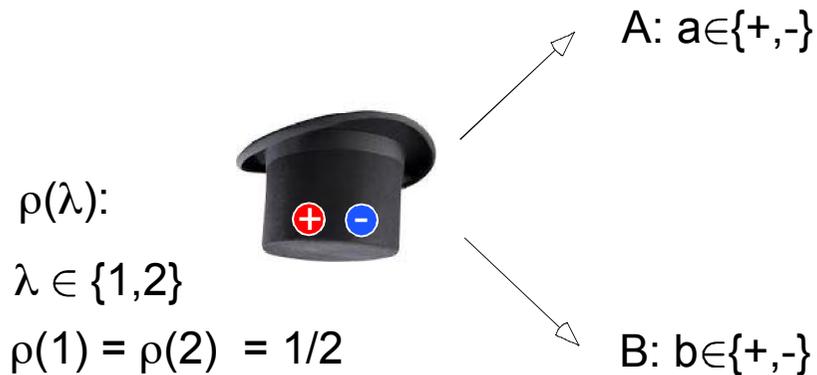
Es folgt

$$\begin{aligned} P_A(a_i) &= \sum_j P_{AB}(a_i, b_j) = \int d\lambda \rho(\lambda) p_A(\lambda, a_i) \\ P_B(b_j) &= \sum_i P_{AB}(a_i, b_j) = \int d\lambda \rho(\lambda) p_B(\lambda, b_j) \end{aligned} \quad (11.2b)$$

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

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



	A	B
$\lambda=1$	+	-
$\lambda=2$	-	+

$$\begin{aligned}
 p_A(1,+) &= 1 & p_B(1,+) &= 0 \\
 p_A(1,-) &= 0 & p_B(1,-) &= 1 \\
 p_A(2,+) &= 0 & p_B(2,+) &= 1 \\
 p_A(2,-) &= 1 & p_B(2,-) &= 0
 \end{aligned}$$

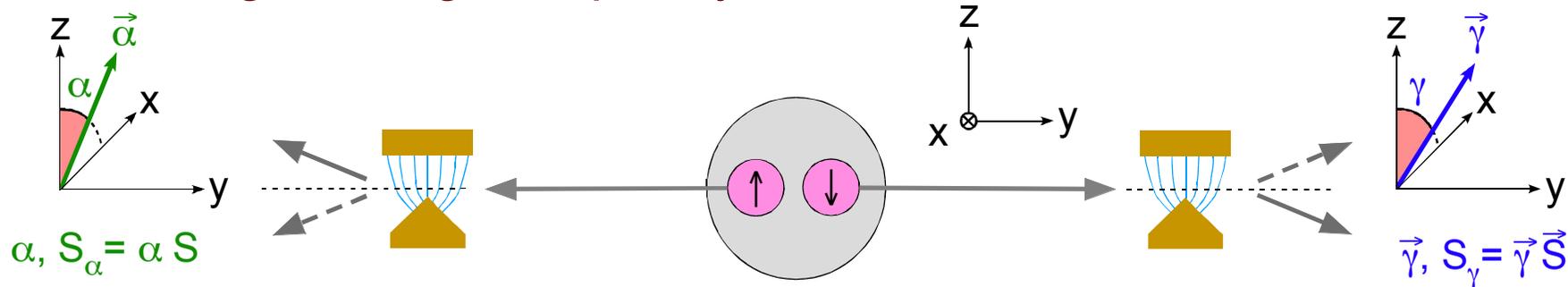
$$P_{AB}(a,b) = \rho(1) p_A(1,a) p_B(1,b) + \rho(2) p_A(2,a) p_B(2,b), \quad a,b \in \{+,-\} \quad (11.3)$$

$$\begin{aligned}
 &\Rightarrow P_{AB}(+,+) = P_{AB}(-,-) = 0 \\
 (11.3) \quad &P_{AB}(+,-) = P_{AB}(-,+) = 1/2 \quad \Rightarrow (11.2b)
 \end{aligned}$$

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

\Rightarrow Messungen von A und B sind korreliert: $P_{AB}(a_i, b_j) \neq P_A(a_i) P_B(b_j)$, $a_i, b_j \in \{+,-\}$
 aber kompatibel mit lokalem Realismus (11.3)

Bell'sche Ungleichung für Spin-System:



Ein Teilchen mit Gesamt-Drehimpuls 0 zerfällt 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 $P(\alpha: +, \gamma: -) = \int d\lambda \rho(\lambda) p_\alpha(\lambda, +) p_\gamma(\lambda, -)$, $1 = p_\theta(\lambda, -) + p_\theta(\lambda, +)$, $0 \leq p_\theta(\lambda, \pm) \leq 1$ für $\theta \in \{\alpha, \beta, \gamma\}$

(11.2a)

BEH: Lokaler Realismus führt zu $P(\alpha: +, \gamma: -) \leq P(\alpha: +, \beta: -) + P(\beta: +, \gamma: -)$

BEW: zeige, dass $p_\alpha(\lambda, +) p_\gamma(\lambda, -) \leq p_\alpha(\lambda, +) p_\beta(\lambda, -) + p_\beta(\lambda, +) p_\gamma(\lambda, -)$

$a, b, c \in [0, 1] \Rightarrow ac \leq a(1 - b) + bc$ mit $a = p_\alpha(\lambda, +)$, $b = p_\beta(\lambda, +)$, $c = p_\gamma(\lambda, -)$

$ac = a(1 - b + b)c = a(1 - b)c + abc \leq a(1 - b) + bc$

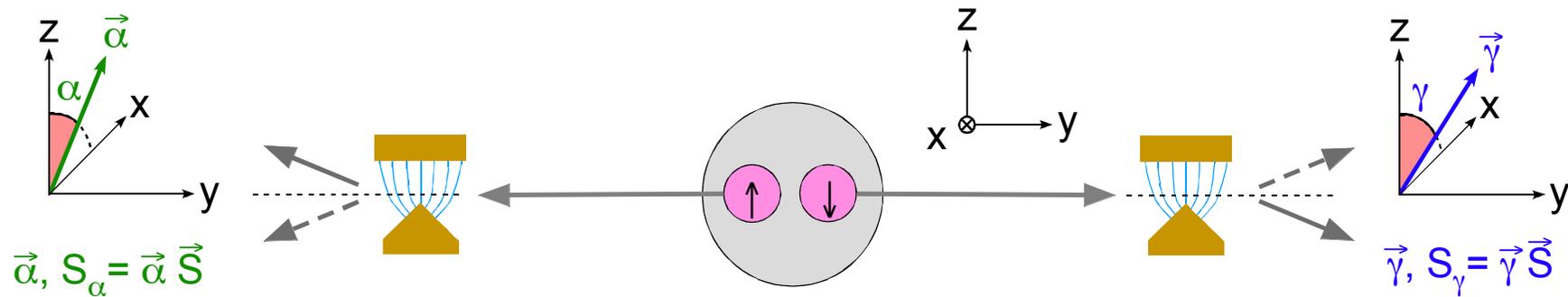
Definiere: $B(\alpha, \beta, \gamma) \equiv P(\alpha: +, \beta: -) + P(\beta: +, \gamma: -) - P(\alpha: +, \gamma: -)$

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

John Bell
(1928 - 1990)



Experiment zeigt Verletzung der Bell'schen Ungleichung



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

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 "±". 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**

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

John F. Clauser
Alain Aspect
Nobelpreis 2022



⊘ Quantentheorie bestätigt Verletzung der Bell'schen Ungleichung

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

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

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

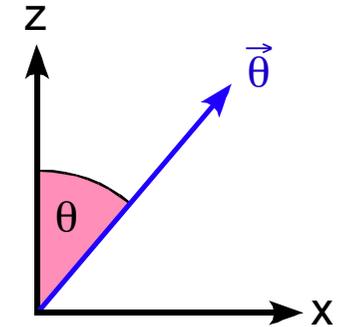
$$\vec{S} \equiv (S_x, S_y, S_z)$$

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

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

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 : $S_\theta |\uparrow_\theta\rangle = +1/2 \hbar |\uparrow_\theta\rangle$

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

$$|\uparrow_\theta\rangle = \cos(\theta/2) |\uparrow_z\rangle + i \sin(\theta/2) |\downarrow_z\rangle$$

$$|\downarrow_\theta\rangle = i \sin(\theta/2) |\uparrow_z\rangle + \cos(\theta/2) |\downarrow_z\rangle$$

(11.4)

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

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

Es gilt für beliebige θ : $|\uparrow_z\rangle |\downarrow_z\rangle - |\downarrow_z\rangle |\uparrow_z\rangle = |\uparrow_\theta\rangle |\downarrow_\theta\rangle - |\downarrow_\theta\rangle |\uparrow_\theta\rangle$

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

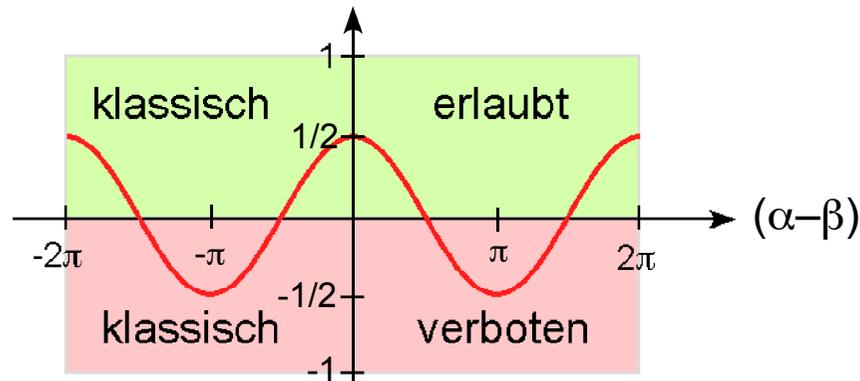
Gesamt-Spin $\vec{J} = \vec{S}_{(1)} + \vec{S}_{(2)}$ von $|\psi\rangle$ ist 0, i.e., $J^2|\psi\rangle = 0$, aber $S_{(n)}^2|\psi\rangle = s(s+1)\hbar^2|\psi\rangle$ mit $s=1/2$

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

$$\begin{aligned} B(\alpha, \beta, \gamma) &\equiv P(\alpha: +, \beta: -) + P(\beta: +, \gamma: -) - P(\alpha: +, \gamma: -) \\ &= \frac{1}{2} (\cos^2((\alpha-\beta)/2) + \cos^2((\beta-\gamma)/2) - \cos^2((\alpha-\gamma)/2)) \end{aligned}$$

BSP: $\gamma = \alpha$

$$\begin{aligned} B(\alpha, \beta, \alpha) &= \cos^2((\alpha-\beta)/2) - 1/2 \\ &= \frac{1}{2} \cos(\alpha-\beta) \end{aligned}$$



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).



John Bell
(1928 - 1990)

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

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

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

entsprechend für $S_{(2)}^2$

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

Es folgt $J^2|\psi\rangle = 0$ mit Hilfe von

$$\begin{aligned} S_x|\uparrow_z\rangle &= \hbar/2|\downarrow_z\rangle, & S_x|\downarrow_z\rangle &= \hbar/2|\uparrow_z\rangle \\ S_y|\uparrow_z\rangle &= i\hbar/2|\downarrow_z\rangle, & S_y|\downarrow_z\rangle &= -i\hbar/2|\uparrow_z\rangle \\ S_z|\uparrow_z\rangle &= \hbar/2|\uparrow_z\rangle, & S_z|\downarrow_z\rangle &= -\hbar/2|\downarrow_z\rangle \end{aligned}$$

Ü

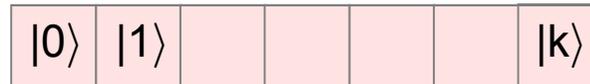
Mit (11.4) folgt $|\langle\downarrow_\beta|\downarrow_\alpha\rangle|^2 = (\sin(\alpha/2)\sin(\beta/2) + \cos(\alpha/2)\cos(\beta/2))^2 = \cos^2((\alpha-\beta)/2)$

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

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.

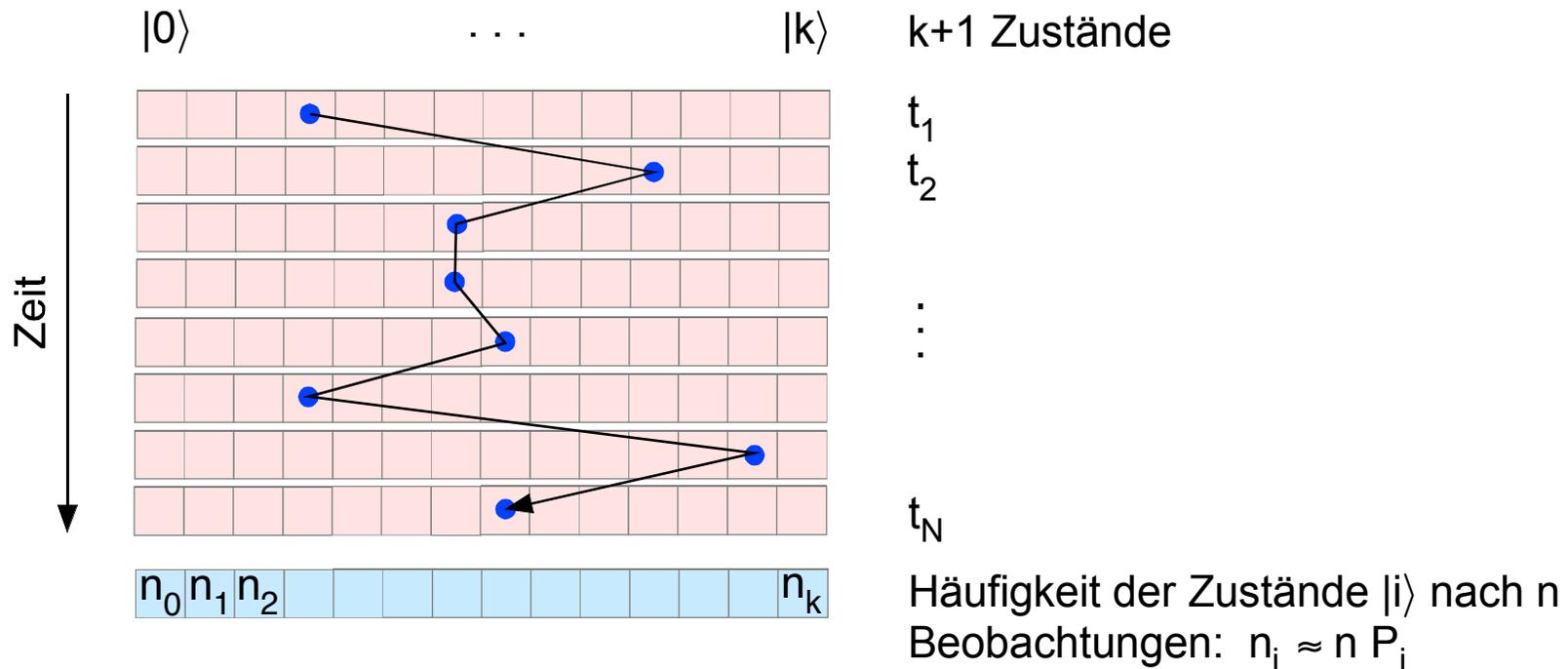
Stattdessen beschreibt man das System durch eine Verteilung P_i , wobei P_i die Wahrscheinlichkeit bedeutet mit welcher der Zustand $|i\rangle$ gemessen werden kann.

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

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

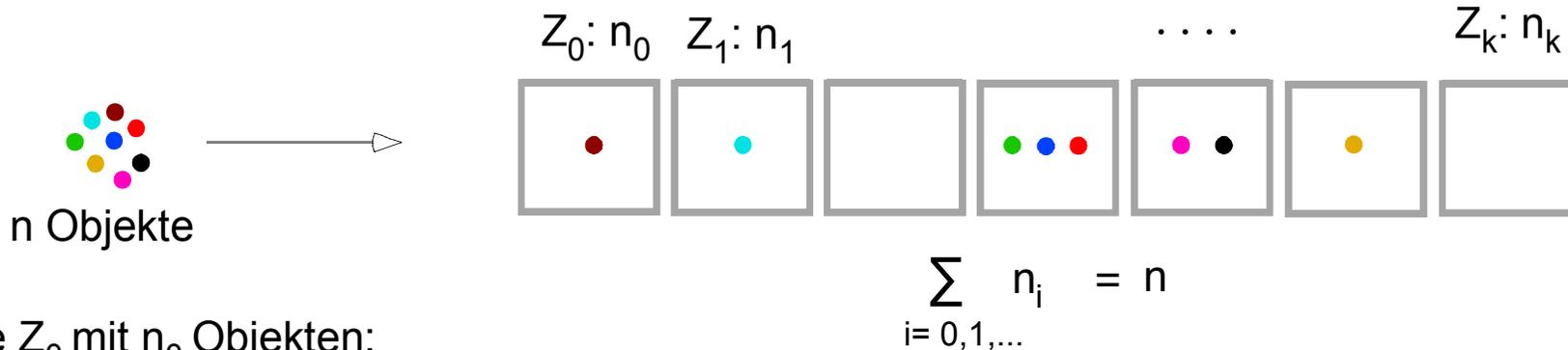


Ein Mikrozustand $|\psi(t)\rangle$ des Systems entspricht einer Trajektorie im Phasenraum $\{|0\rangle, \dots, |k\rangle\}$. Statt die volle Information über $|\psi(t)\rangle$ zu erhalten, begnügt man sich damit, die Verteilung der Wahrscheinlichkeiten (P_1, \dots, P_k) für das Auftreten der Zustände $\{|0\rangle, \dots, |k\rangle\}$ zu ermitteln. Zustände des Systems, die durch eine bestimmte Verteilung (P_1, \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

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:

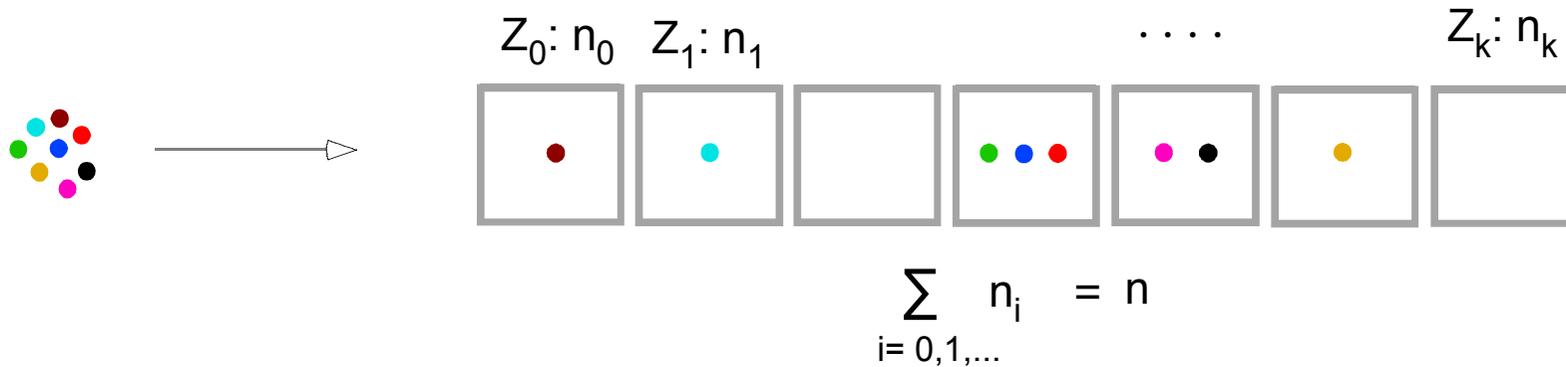
Anzahl der Möglichkeiten n_0 Objekte im Fach Z_0 abzulegen unter Zählung aller möglichen Besetzungsreihenfolgen

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

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

⋮

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

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

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

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

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

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

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

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

$$P_i = n_i / n$$

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

$$\sum_{i=0,1,\dots} P_i = 1$$

Die Größe $S[P_0, \dots, P_k] \equiv \ln(M)/n = - \sum_{i=0,1,\dots} P_i \ln(P_i)$ 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.

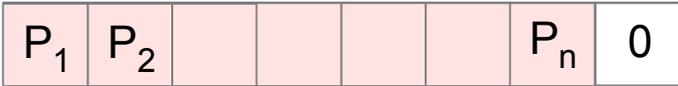
Axiomatische Einführung der Entropie

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.

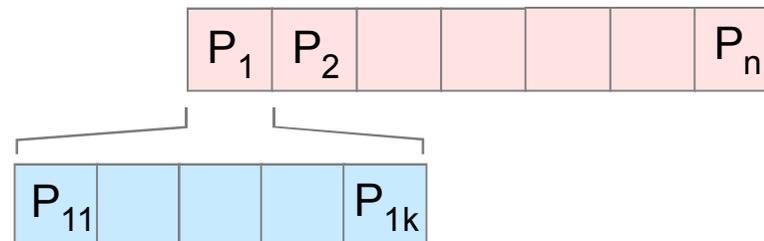
S1. $S(P_1, \dots, P_n) \geq 0$ stetig in P_i , $S(1) = 0$

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

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



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



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

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

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 $0 = f_0(P) = f_1(P) = f_2(P) = \dots$
 $f_u(P)$ differenzierbare Funktionen von P

Normierung der Wahrscheinlichkeitsverteilung P erfordert immer mindestens

eine Nebenbedingung: $0 = f_0(P) \equiv 1 - \sum_{i=1}^n P_i$ 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:

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

wegen Nebenbedingungen $0 = f_j(P)$, $j=0,1,\dots,k$ sind dP_i nicht voneinander unabhängig

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

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

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

Unter Berücksichtigung von k Nebenbedingungen sind $n-k$ Differentiale dP_i unabhängig

Die k freien Parametern λ_j können so gewählt werden, dass

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

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

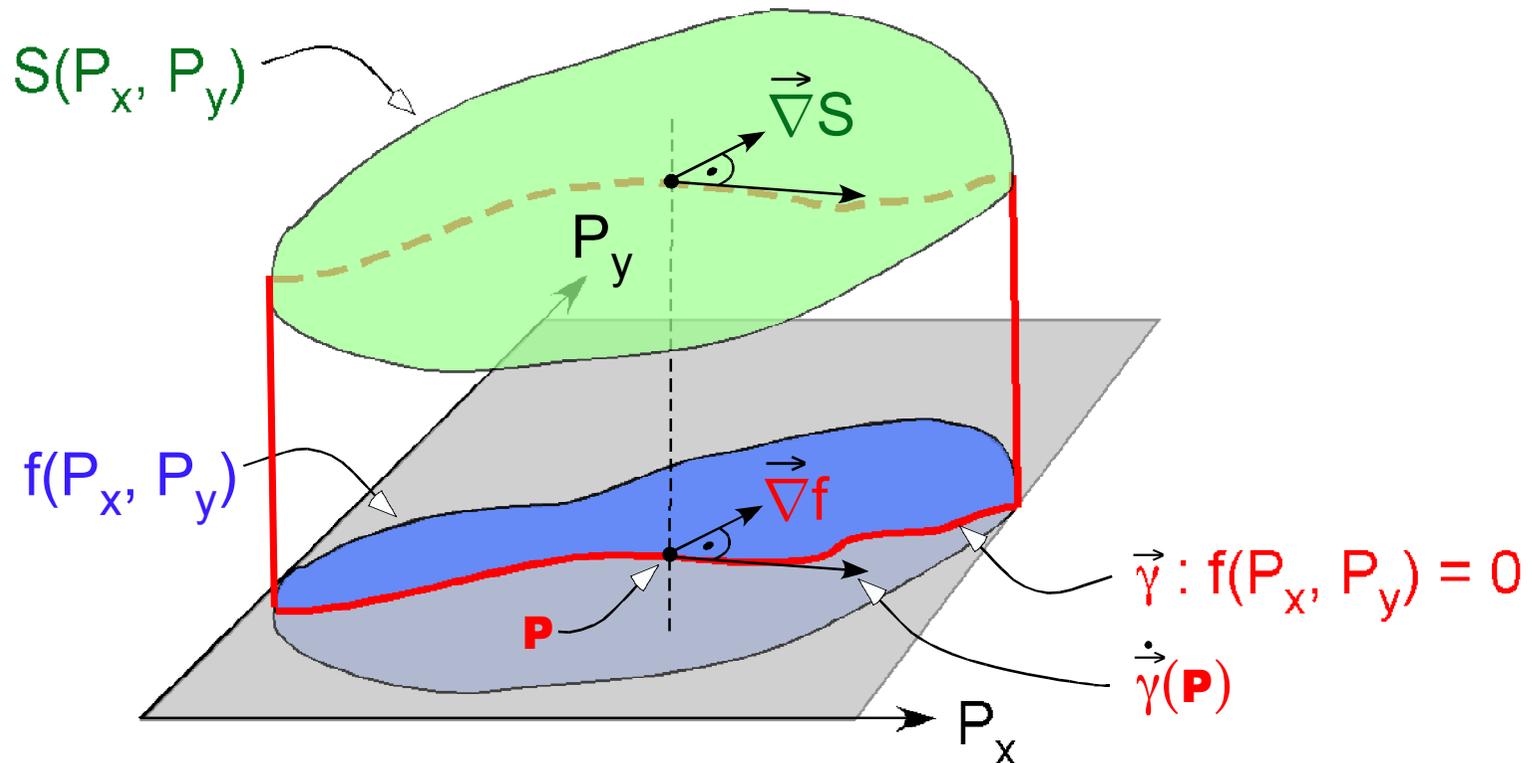
$$\left. \begin{aligned} f_0(P) &= 1 - \sum_{i=1}^n P_i \\ S(P_1, \dots, P_n) &= -\kappa \sum_{i=1}^n P_i \ln(P_i) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial P_i} f_0(P_1, \dots, P_n) &= -\lambda_0 \\ \frac{\partial}{\partial P_i} S(P_1, \dots, P_n) &= -\kappa (\ln(P_i) + 1) \end{aligned}$$

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

BSP Gleichverteilung: außer Normierung von P keine weitere Nebenbedingung

$$0 = -\kappa (\ln(P_i) + 1) - \lambda_0 \Rightarrow \text{Alle } P_i \text{ sind gleich} \Rightarrow P_i = 1/n$$

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 : $\vec{\nabla}(S + \lambda f) = 0$ $\lambda =$ Lagrange-Parameter