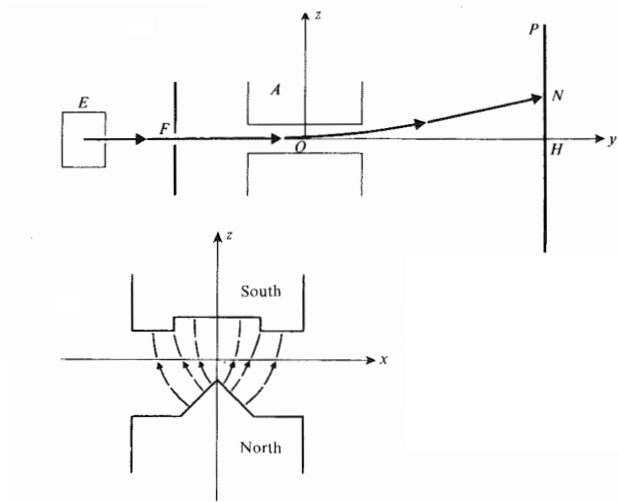


6 Elektron Spin

6.1 Stern - Gerlach Experiment

- **Experimenteller Aufbau:** Ein Strahl von Wasserstoffatomen fliegt durch ein inhomogenes Magnetfeld senkrecht zur Feldrichtung.



- **Erwartung nach dem Bohrschen Modell und der Elektrodynamik:**

- Ein Elektron auf einer Kreisbahn entspricht einem Kreisstrom $i = \frac{ev}{2\pi r}$ um eine Fläche $f = r^2\pi$. Dem entspricht ein **magnetischer Dipol** senkrecht zur Bahnebene vom Betrag

$$\mu = i \cdot f = \frac{evr}{2} = \frac{e}{2m_e} pr = \frac{e}{2m} |\vec{L}|$$

- In einem äußeren Magnetfeld \vec{B} ist die Energie des magnetischen Dipols

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \cdot \vec{B}(\vec{x})$$

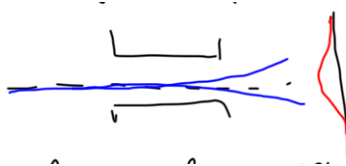
- In einem inhomogenen Magnetfeld $\vec{B}(\vec{x})$ wirkt auf den Dipol eine Kraft

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}(-\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \frac{e}{2m_e} \sum_i L_i \frac{\partial}{\partial x_i} B(\vec{x})$$

- Im Stern-Gerlach Experiment ist entlang der Trajektorie der Atome nur B_z und $\frac{\partial B_z}{\partial z}$ verschieden von null. Also wirkt nur eine Kraft in z -Richtung

$$F_z = \frac{e}{2m_e} L_z \frac{\partial B_z}{\partial z}.$$

- **Klassisch** würde bei einer zufälligen Ausrichtung von \vec{L} die z -Komponente beliebige Werte zwischen $-|\vec{L}|$ und $+|\vec{L}|$ annehmen, was zu einer kontinuierlichen Aufspaltung des Atomstrahls führen würde



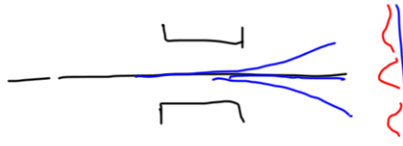
- **Quantenmechanisch** sollte aufgrund der Richtungsquantelung des Drehimpulses

$$L_z |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle$$

mit $m = -l, \dots, l$ auch die Kraft diskrete Werte annehmen

$$F_z = \frac{e}{2m_e} (\hbar m) \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad m = -l, \dots, l$$

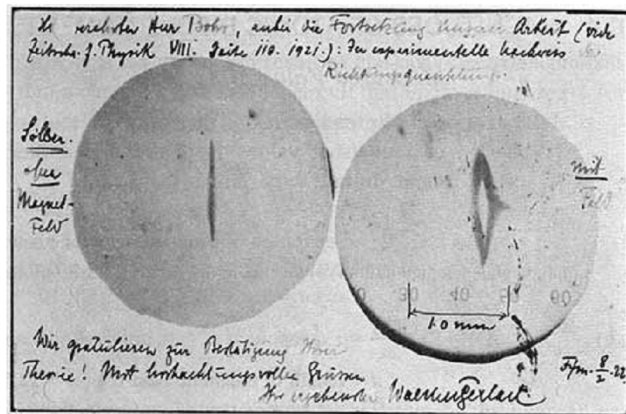
Der Atomstrahl folglich in diskrete Teilstrahlen aufbrechen. Für Wasserstoff im Grundzustand $|n=1, l=0, m=0\rangle$ sollte es keine Aufspaltung geben. Für angeregte Zustände $|n, l, m\rangle$ sollte es eine Aufspaltung in eine ungerade Anzahl von $(2l+1)$ Komponenten geben.



- Experimentelles Ergebnis:**

Es wird eine Aufspaltung in 2 Teilstrahl beobachtet und zwar entsprechend einer ablenkenden Kraft der Größe

$$F_z = \frac{e}{m_e} \left(\pm \frac{\hbar}{2} \right) \frac{\partial B_z}{\partial z}$$



Postkarte von Walther Gerlach an Niels Bohr:

Hochverehrter Herr Bohr, anbei die Fortsetzung unserer Arbeit (...) zum experimentellen Nachweis der Richtungsquantelung. [links] Silber ohne Magnetfeld [rechts] mit Feld. Wir gratulieren zur Bestätigung Ihrer Theorie! Mit hochachtungsvollen Grüßen, Ihr ergebenster Walther Gerlach.

- **Interpretation:**

- Neben dem magnetischen Dipolmoment, das mit dem Bahndrehimpuls assoziiert ist, muss noch ein weiteres Dipolmoment existieren, das in einem äusseren Magnetfeld die Werte

$$\mu_z = \frac{e}{m_e} \left(\pm \frac{\hbar}{2} \right)$$

annehmen kann.

- Das Elektron besitzt einen Eigendrehimpuls, den Spin, mit einer Projektion in z -Richtung von

$$\pm \frac{\hbar}{2}$$

Der Spin des Elektrons ist also halbzahlig

$$s = \frac{1}{2}$$

- Mit dem Spin ist magnetisches Moment der Größe μ_B (**Bohrsches Magneton**) assoziiert

$$\mu_B := \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.274 \cdot 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$$

6.2 Spin- $\frac{1}{2}$ Operatoren und Zustände

- **Postulat zum Elektronspin**

- Das Elektron besitzt einen inneren Freiheitsgrad "Spin", der als Drehimpuls beschrieben werden muss

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad (\text{und zyklisch})$$

- Der Spin des Elektrons ist

$$s = \frac{1}{2}$$

- Der Elektronspin besitzt zwei Zustände

$$\begin{array}{lll} \text{"Spin up"} & |s = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2}\rangle & \\ \text{"Spin down"} & |s = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}\rangle & \langle \frac{1}{2}, m | \frac{1}{2}, m \rangle = \delta_{mm'} \end{array}$$

die die Eigenwertgleichungen des VSKOS $\{\vec{S}^2, S_z\}$ erfüllen

$$\begin{aligned} \vec{S}^2 |\tfrac{1}{2}, m\rangle &= \hbar^2 \tfrac{1}{2} (\tfrac{1}{2} + 1) |\tfrac{1}{2}, m\rangle = \tfrac{3\hbar^2}{4} |\tfrac{1}{2}, m\rangle \\ S_z |\tfrac{1}{2}, m\rangle &= \hbar m |\tfrac{1}{2}, m\rangle \end{aligned}$$

- Der Elektronspin besitzt ein **magnetisches Moment**

$$\vec{\mu} = \frac{2\mu_B}{\hbar} \vec{S}$$

mit dem Bohrschen Magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$.

Bemerkungen:

- Spin und Bahndrehimpuls des Elektrons haben ein unterschiedliches **gyromagnetisches Verhältnis** (d.h. ein unterschiedliches Verhältnis zwischen Größe des Drehimpulses und magnetischem Moment). Für das mit dem Drehimpuls assoziierte magnetische Moment gilt

$$\vec{\mu} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \qquad g = 1$$

und für den Spin gilt

$$\vec{\mu} = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S} \qquad g_s = 2$$

- Tatsächlich ist das gemessene gyromagnetische Verhältnis

$$g_s = 2 \cdot (1 + 0.00115965218073(28))$$

Die Quantenelektrodynamik kann dieses anomale gyromagnetische Verhältnis auf 10 signifikante Stellen genau erklären. Das magnetische Moment des Elektrons ist eine der am besten verifizierten Vorhersagen der Quantenmechanik.

- Der Zustand eines Elektronspins wird durch einen Vektor $|\psi\rangle$ in einem zweidimensionalen Hilbertraum beschrieben

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathbb{C}^2$$

also

$$|\psi\rangle = \alpha \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

mit $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ und $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

- Die beiden Spinzustände werden üblicherweise abgekürzt geschrieben als

$$|+\rangle = \left| s = \frac{1}{2}, m = +\frac{1}{2} \right\rangle \qquad |-\rangle = \left| s = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Sie bilden eine orthonormale Basis im Hilbertraum, also

$$\langle + | - \rangle = 0 \qquad \langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1 \qquad |+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| = \mathbb{1}$$

Ein allgemeiner Spinzustand ist

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle$$

- Stattdessen kann auch die **Matrix-** oder **Spinorschreibweise** verwendet werden

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \langle +| &= (1 \quad 0) \\ |-\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \langle -| &= (0 \quad 1) \end{aligned}$$

- Damit ist ein allgemeiner Spinzustand

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \langle\psi| = \alpha^* \langle +| + \beta^* \langle -| = (\alpha^* \quad \beta^*)$$

und $\langle\psi|\psi\rangle = (\alpha^* \quad \beta^*) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

- Entsprechend gilt in Spinorschreibweise

$$\begin{aligned} |+\rangle \langle +| &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \quad 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & |-\rangle \langle -| &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \quad 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ |+\rangle \langle -| &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \quad 1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & |-\rangle \langle +| &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1 \quad 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und die Vollständigkeitsrelation lautet

$$|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- Die Spinoperatoren S_i sind in Spinordarstellung
 - Wegen $S_z |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle$ besitzt S_z die Spektralzerlegung

$$\begin{aligned}
 S_z &= \left(+\frac{\hbar}{2}\right) |+\rangle \langle +| + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) |-\rangle \langle -| \\
 &= \left(+\frac{\hbar}{2}\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

- Der Auf- bzw. Absteigeoperator $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$ erfüllt (siehe Kapitel über Drehimpulse!)

$$S_+ |+\rangle = 0 \qquad S_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle$$

$$S_- |-\rangle = 0 \qquad S_- |+\rangle = \hbar |-\rangle$$

Daher ist

$$\begin{aligned}
 S_+ &= \mathbb{1} S_+ \mathbb{1} = (|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|) S_+ (|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|) \\
 &= \hbar |+\rangle \langle -| = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$S_- = \hbar |-\rangle \langle +| = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- Mit den inversen Relationen für

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$$

$$S_y = -\frac{i}{2}(S_+ - S_-)$$

folgt

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

- Mit den **Paulimatrizen**

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ist $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$ bzw.

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

mit dem **Paulivektor** (Vektor aus Matrizen) $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$.

Man zeigt leicht:

- $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1}$
- $\sigma_i \sigma_j = i\varepsilon_{ijk} \sigma_k$ also z.B. $\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z$
- $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk} \sigma_k$

- Was sind die Eigenzustände von S_x ? Aus der Spinordarstellung von S_x erhalten wir die Eigenzustände und -werte

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

Also besitzt S_x zwei Eigenzustände $|\pm\rangle_x$ "Spin up" und "Spin down" in x -Richtung

$$S_x |\pm\rangle_x = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle_x$$

wobei die Darstellung der Eigenzustände $|\pm\rangle_x$ von S_x in der Basis der Eigenzustände $|\pm\rangle_z$ von S_z (also $S_z |\pm\rangle_z = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle_z$) durch

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_z + |-\rangle_z) \qquad |-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_z - |-\rangle_z)$$

gegeben ist.

- Entsprechend gilt für S_y

$$S_y |\pm\rangle_y = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle_y$$

mit

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_z + i |-\rangle_z) \qquad |-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_z - i |-\rangle_z)$$

Beispiel und Anwendung: Magnetresonanz

- Der Hamiltonoperator eines Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchens mit magnetischem Moment $\vec{\mu} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}$ in einem externen Magnetfeld \vec{B} ist

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Das Magnetfeld besitze eine konstante Komponente in z -Richtung und eine rotierende Komponente in der x - y -Ebene, $\vec{B}(t) = -(B_1 \cos(\omega t), B_1 \sin(\omega t), B_0)$. Damit ist der Hamiltonoperator

$$H = \omega_0 S_z + \omega_1 (S_x \cos(\omega t) + S_y \sin(\omega t)) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}$$

mit $\omega_0 = g \frac{\mu_B}{\hbar} B_0$ und $\omega_1 = g \frac{\mu_B}{\hbar} B_1$

- Der Zustand des Spins ist

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

- Die Schrödingergleichung in Spinorschreibweise lautet

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}$$

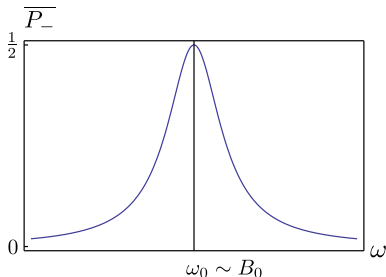
- Der Spin befinde sich zu $t = 0$ im Zustand “spin up”, also $\alpha(0) = 1$ und $\beta(0) = 0$. Die Wahrscheinlichkeit, den Spin zum Zeitpunkt t im Zustand “spin down” zu finden ist (**Rabi-Formel**)

$$P_- = |\beta(t)|^2 = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\omega_0 - \omega)^2} \sin^2 \left[\sqrt{\omega_1^2 + (\omega_0 - \omega)^2} \frac{t}{2} \right]$$

bzw. im zeitlichen Mittel

$$\overline{P_-} = \frac{1}{2} \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\omega_0 - \omega)^2}$$

Wenn die Frequenz ω des zeitabhängigen, transversalen Magnetfeldes mit der Aufspaltung ω_0 der Spinzustände im konstanten, longitudinalen Magnetfeld übereinstimmt, tritt eine Resonanz auf.



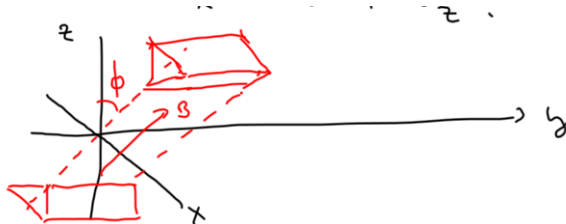
Bemerkung: Dieses Prinzip liegt der Kernspintomographie zugrunde.

Beispiel: Wiederholte Messungen

- Ein Stern-Gerlach Apparat mit inhomogenen Magnetfeld in z -Richtung realisiert eine Messung des Spins in z -Richtung, also eine Messung von S_z .

Ist das Magnetfeld entlang \vec{e}_x orientiert wird entsprechend S_x gemessen.

Ein Magnetfeld in $\cos \phi \vec{e}_x + \sin \phi \vec{e}_z$ Richtung misst $\cos \phi S_x + \sin \phi S_z$.



- Messung von S_z an einem Spin im Zustand

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle_z + \beta |-\rangle_z$$

ergibt “Spin up” mit einer Wahrscheinlichkeit

$$p_+ = |\langle + | \psi \rangle|^2 = |\alpha|^2$$

bzw. “Spin down” mit $|\beta|^2$. Nach der Messung befindet sich der Spin im Zustand $|+\rangle_z$ bzw. $|-\rangle_z$.

- Wir betrachten 3 aufeinanderfolgende Messungen von S_z , dann S_x und zuletzt S_z :

Resultat der 1. Messung sei “Spin up”, d.h. der Zustand nach der 1. Messung ist $|+\rangle_z$.
Die Wahrscheinlichkeiten, in der 2. Messung (von S_x) “Spin up/down” zu messen, sind

$$p_+^{(2)} = |\langle + |_x |+\rangle_z|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(z\langle +| + z\langle -| \right) |+\rangle_z \right|^2 = \frac{1}{2}$$

$$p_-^{(2)} = \frac{1}{2}.$$

Sei das Ergebnis wieder “Spin up” entlang S_x . Der Zustand nach der Messung ist also $|+\rangle_x$.
Die Wahrscheinlichkeiten, in der 3. Messung (von S_z) “Spin up/down” zu messen, sind

$$p_+^{(3)} = |\langle + |_z |+\rangle_x|^2 = \frac{1}{2}$$

$$p_-^{(3)} = \frac{1}{2}.$$

Die Messung von S_x zwischen den beiden S_z -Messungen führt dazu, dass das Messergebnis aus der ersten Messung von S_z in der zweiten Messung nur mit einer Wahrscheinlichkeit von $1/2$ reproduziert wird. Die Messergebnisse der beiden S_z Messungen sind vollkommen unkorreliert.

6.3 Gesamtwellenfunktion des Elektrons: Tensorprodukt von Hilberträumen

- Für eine vollständige Beschreibung des Elektrons muss der Zustand der Bewegung und der Zustand des Spins, d.h. eine Spinwellenfunktion und eine Raumwellenfunktion angegeben werden. Der Bewegungszustand wird durch eine **Raumwellenfunktion**

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_B = L^2(\mathbb{R}^3)$$

beschrieben. Z.B. im Coulombpotential ist eine Raumwellenfunktion $|\psi\rangle = \sum_{nlm} c_{nlm} |nlm\rangle$ mit $c_{nlm} \in \mathbb{C}$.

Der Spin wird durch eine **Spinwellenfunktion**

$$|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_S = \mathbb{C}^2$$

beschrieben, also $|\varphi\rangle = \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} c_{m_s} |s = \frac{1}{2}, m_s\rangle$ mit $c_{m_s} \in \mathbb{C}$.

Die **Gesamtwellenfunktion** $|\chi\rangle$, die Bewegungs- und Spinzustand beschreibt, ist Element des **Tensorprodukt-Hilbertraumes**

$$|\chi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$$

- **Definition:** Ein Hilbertraum \mathcal{H} heißt **Tensorprodukt–Hilbertraum** von \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 ,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

wenn zu jedem Paar von Vektoren $|\psi^{(1)}\rangle \in \mathcal{H}_1$ und $|\varphi^{(2)}\rangle \in \mathcal{H}_2$ ein Vektor

$$|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\varphi^{(2)}\rangle \in \mathcal{H}_2 \in \mathcal{H}$$

assoziiert wird. Der Vektor $|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\varphi^{(2)}\rangle$ wird als **Tensorproduktvektor** von $|\psi^{(1)}\rangle$ und $|\varphi^{(2)}\rangle$ bezeichnet.

Eigenschaften des Tensorproduktes:

- **Linearität** bezüglich Multiplikation mit einer komplexen Zahl $\lambda \in \mathbb{C}$

$$\left(\lambda |\psi^{(1)}\rangle\right) \otimes |\varphi^{(2)}\rangle = \lambda \left(|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\varphi^{(2)}\rangle\right)$$

$$|\psi^{(1)}\rangle \otimes \left(\lambda |\varphi^{(2)}\rangle\right) = \lambda \left(|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\varphi^{(2)}\rangle\right)$$

- **Distributivität** bezüglich der Vektoraddition

$$|\psi^{(1)}\rangle \otimes \left(|\varphi_1^{(2)}\rangle + |\varphi_2^{(2)}\rangle\right) = |\psi^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_1^{(2)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_2^{(2)}\rangle$$

$$\left(|\psi_1^{(1)}\rangle + |\psi_2^{(1)}\rangle\right) \otimes |\varphi^{(2)}\rangle = |\psi_1^{(1)}\rangle \otimes |\varphi^{(2)}\rangle + |\psi_2^{(1)}\rangle \otimes |\varphi^{(2)}\rangle$$

- Wenn $|\psi_n^{(1)}\rangle$ eine Basis in \mathcal{H}_1 ist und $|\varphi_k^{(2)}\rangle$ eine Basis in \mathcal{H}_2 , dann ist $|\psi_n^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_k^{(2)}\rangle$ eine Basis im Tensorprodukt–Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ und wird als **Tensorproduktbasis** bezeichnet.

- Das **Skalarprodukt** von Tensorproduktvektoren in einem Tensorprodukt–Hilbertraum ist definiert durch

$$\left(\langle \psi_1^{(1)} | \otimes \langle \varphi_1^{(2)} | \right) \left(| \psi_2^{(1)} \rangle \otimes | \varphi_2^{(2)} \rangle \right) = \langle \psi_1^{(1)} | \psi_2^{(1)} \rangle \langle \varphi_1^{(2)} | \varphi_2^{(2)} \rangle$$

Vektoren $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$ in einem Tensorprodukt–Hilbertraum \mathcal{H} können immer in einer Produktbasis dargestellt werden

$$|\chi\rangle = \sum_{nk} c_{nk} |\psi_n^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_k^{(2)}\rangle$$

Das Skalarprodukt zweier Vektoren $|\chi_1\rangle$ und $|\chi_2\rangle$ ist dann

$$\begin{aligned} \langle \chi_2 | \chi_1 \rangle &= \left(\sum_{n'k'} d_{n'k'}^* \langle \psi_{n'}^{(1)} | \otimes \langle \varphi_{k'}^{(2)} | \right) \left(\sum_{nk} c_{nk} |\psi_n^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_k^{(2)}\rangle \right) \\ &= \sum_{n'k'nk} d_{n'k'}^* c_{nk} \left(\langle \psi_{n'}^{(1)} | \otimes \langle \varphi_{k'}^{(2)} | \right) \left(|\psi_n^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_k^{(2)}\rangle \right) \\ &= \sum_{n'k'nk} d_{n'k'}^* c_{nk} \langle \psi_{n'}^{(1)} | \psi_n^{(1)} \rangle \langle \varphi_{k'}^{(2)} | \varphi_k^{(2)} \rangle = \sum_{n'k'nk} d_{n'k'}^* c_{nk} \delta_{n'n} \delta_{k'k} \\ &= \sum_{nk} d_{nk}^* c_{nk} \end{aligned}$$

- **Beispiel: Gesamtwellenfunktion des Elektrons im Coulombpotential**

- Die Gesamtwellenfunktion $|\chi\rangle$, die Bewegungs- und Spinzustand beschreibt, ist Element des Tensorprodukt-Hilbertraumes

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$$

- Aus den Basen $\{|nlm\rangle\}$ in $\mathcal{H}_B = L^2(\mathbb{R}^3)$ und $\{|\frac{1}{2}, m_s\rangle\}$ in $\mathcal{H}_S = \mathbb{C}^2$ ergibt sich eine Produktbasis im Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S$

$$\{ |nlm\rangle \otimes |\frac{1}{2}, m_s\rangle \}$$

wobei $n = 1, \dots, l = 0, \dots, n-1, m = -l, \dots, l$ und $m_s = \pm \frac{1}{2}$.

Meist wird das Tensorproduktzeichen unterdrückt und ein Tensorproduktvektor abgekürzt geschrieben als

$$|nlm\rangle \otimes |\frac{1}{2}, m_s\rangle = |nlm\rangle |\frac{1}{2}, m_s\rangle = |nlm, \frac{1}{2}, m_s\rangle$$

- Die Gesamtwellenfunktion $|\chi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S$ lässt sich nun in der Produktbasis anschreiben

$$|\chi\rangle = \sum_{nlm} \sum_{m_s} c_{nlmm_s} |nlm, \frac{1}{2}, m_s\rangle$$

In Ortsdarstellung und Spinorschreibweise ist die Gesamtwellenfunktion

$$\chi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \chi \rangle = \sum_{m_s} \sum_{nlm} c_{nlmm_s} \langle \vec{x} | nlm \rangle \otimes |\frac{1}{2}, m_s\rangle = \psi_+(\vec{x}) |+\rangle + \psi_-(\vec{x}) |-\rangle = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}$$

- Die Zustände $|nlm, sm_s\rangle$ der Tensorproduktbasis sind Eigenzustände des VSKOS

$$\{H, \vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z\}$$

Aufgrund des Spinfreiheitsgrades des Elektrons ist der Entartungsfaktor der Energieeigenwerte E_n im Coulombpotential daher

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \sum_{m_s=\pm \frac{1}{2}} 1 = 2n^2$$

Insbesondere ist auch der Grundzustand des Wasserstoffes zweifach entartet, $g_0 = 2$.

• Tensorprodukt von Operatoren:

Für zwei Operatoren $A^{(1)}$ bzw. $B^{(2)}$, die auf die Hilberträume \mathcal{H}_1 bzw. \mathcal{H}_2 wirken, ist der Tensorproduktoperator $A^{(1)} \otimes B^{(2)}$ auf dem Tensorprodukt-Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ definiert durch

$$\left(A^{(1)} \otimes B^{(2)}\right) \left(|\psi_2^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_2^{(2)}\rangle\right) = \left(A^{(1)} |\psi_2^{(1)}\rangle\right) \otimes \left(B^{(2)} |\varphi_2^{(2)}\rangle\right)$$

Es gilt:

- Das Produkt von Tensorproduktoperatoren ist das Tensorprodukt der Produkte

$$\left(C^{(1)} \otimes D^{(2)}\right) \left(A^{(1)} \otimes B^{(2)}\right) = C^{(1)} A^{(1)} \otimes D^{(2)} B^{(2)}$$

- Ein Operator $A^{(1)}$, der auf \mathcal{H}_1 wirkt, wird durch $A^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)}$ auf den Tensorprodukt-Hilbertraum \mathcal{H} ausgedehnt,

$$\left(A^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)}\right) \left(|\psi_2^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_2^{(2)}\rangle\right) = \left(A^{(1)} |\psi_2^{(1)}\rangle\right) \otimes |\varphi_2^{(2)}\rangle$$

Entsprechend wird ein Operator $B^{(2)}$ durch $\mathbb{1}^{(1)} \otimes B^{(2)}$ auf \mathcal{H} ausgedehnt. Meist werden das Tensorproduktzeichen und die Identität nicht explizit angeschrieben und müssen sinngemäß ergänzt werden.

- Operatoren, die auf verschiedene Hilberträume wirken, kommutieren,

$$\begin{aligned} [A^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)}, \mathbb{1}^{(1)} \otimes B^{(2)}] &= \left(A^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)}\right) \left(\mathbb{1}^{(1)} \otimes B^{(2)}\right) - \left(\mathbb{1}^{(1)} \otimes B^{(2)}\right) \left(A^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)}\right) \\ &= A^{(1)} \otimes B^{(2)} - A^{(1)} \otimes B^{(2)} = 0 \end{aligned}$$

- **Beispiel:** Im VSKO $\{H, \vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z\}$ für das Wasserstoffproblem wirken $\{H, \vec{L}^2, L_z\}$ nur auf \mathcal{H}_B und $\{\vec{S}^2, S_z\}$ nur auf \mathcal{H}_S . Das VSKO auf dem Tensorprodukt-Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S$ muss durch die Ausdehnung der Operatoren auf \mathcal{H} konstruiert werden

$$\{H \otimes \mathbb{1}_S, \vec{L}^2 \otimes \mathbb{1}_S, L_z \otimes \mathbb{1}_S, \mathbb{1}_B \otimes \vec{S}^2, \mathbb{1}_B \otimes S_z\}$$

Die Eigenwertgleichungen lauten explizit

$$\begin{aligned} (H \otimes \mathbb{1}_S) |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle &= H |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle = E_n |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle \\ (\vec{L}^2 \otimes \mathbb{1}_S) |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle &= \vec{L}^2 |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle = \hbar^2 l(l+1) |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle \\ (L_z \otimes \mathbb{1}_S) |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle &= L_z |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle = \hbar m |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle \\ (\mathbb{1}_B \otimes \vec{S}^2) |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle &= |nlm\rangle \otimes \vec{S}^2 |sm_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle \\ (\mathbb{1}_B \otimes S_z) |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle &= |nlm\rangle \otimes S_z |sm_s\rangle = \hbar m_s |nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle \end{aligned}$$

Meist wird abgekürzt geschrieben

$$H |nlm, sm_s\rangle = E_n |nlm, sm_s\rangle$$

etc.