Übung 1. *Zeeman-Aufspaltung*

In Gegenwart eines Magnetfeldes erhält der Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms einen zusätzlichen Term, der gegeben ist durch

$$H_M = \mu_B(\vec{L} + 2\vec{S})\vec{B} = \mu_B(\vec{J} + \vec{S})\vec{B}. \tag{1}$$

Wir wollen die Energieaufspaltung der ursprünglich entarteten Energieniveaus berechnen. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann man annehmen, dass das Magnetfeld in z-Richtung zeigt. Desweiteren nehmen wir an, dass der gesamte Hamiltonoperator diagonal bezüglich des Gesamtdrehimpulses $\vec{J}$ ist, die Eigenfunktionen lassen sich also in der Form $|n\, j\, m\, l\, s\rangle$ schreiben. l sei beliebig aber fest.

(a) Welche Werte von j sind möglich? Liste alle Kets auf, die bei verschiedenem j und gleichem m_j ein nicht verschwindendes Matrixelement für obigen Hamiltonian liefern. Drücke diese Kets mit Hilfe der Clebsch-Gordan Koeffizienten in der Basis $|n\, l\, s\, m_l\, m_s\rangle$ aus.

(b) Berechne die Matrixelemente für H_M. Bestimme anschliessend die Eigenwerte der Matrix und daraus die Energieaufspaltung.

Lösung.

(a) Zuerst möchten wir alle nicht verscheidenden Matrixelemente $\langle n\, l\, s\, j\, m|\, H_M\, |n\, l\, s\, j'\, m'\rangle$ bestimmen. Wir wissen, dass die zwei Zustände $\left|n\, l\, s\, (l+\frac{1}{2})\, m\right\rangle$, $\left|n\, l\, s\, (l-\frac{1}{2})\, m\right\rangle$ beides Linearkombinationen von $\left|n\, l\, s\, (m+\frac{1}{2})\, \frac{-1}{2}\right\rangle$, $\left|n\, l\, s\, (m+\frac{1}{2})\, \frac{1}{2}\right\rangle$ sind. In der Basis $|n\, l\, s\, m_l\, m_s\rangle$ nimmt H_M Diagonalform ein. Somit wissen wir, dass in der Basis $|n\, l\, s\, j\, m\rangle$ lediglich die Zustände $\left|n\, l\, s\, (l\pm\frac{1}{2})\, m\right\rangle$ durch H_M miteinander vermischt werden. Die relevanten Zustände sind also:

(i) $j = l + \frac{1}{2}$

$$|a\rangle = \left|n\left(l+\frac{1}{2}\right) m\, l\, \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\left|n\, l\, \frac{1}{2}\left(m+\frac{1}{2}\right)\frac{-1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\left|n\, l\, \frac{1}{2}\left(m-\frac{1}{2}\right)\frac{1}{2}\right\rangle$$

(ii) $j = l - \frac{1}{2}$

$$|b\rangle = \left|n\left(l-\frac{1}{2}\right) m\, l\, \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\left|n\, l\, \frac{1}{2}\left(m+\frac{1}{2}\right)\frac{-1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\left|n\, l\, \frac{1}{2}\left(m-\frac{1}{2}\right)\frac{1}{2}\right\rangle$$

(b) Matrixelemente für H_M:

$$\begin{aligned}
\langle a|\, H_M\, |a\rangle &= \mu_B B_z\big(\langle a|\, J_z\, |a\rangle + \langle a|\, S_z\, |a\rangle\big) \\
&= \mu_B B_z\left(m + \frac{1}{2l+1}\Big(\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2} - \frac{l-m+\frac{1}{2}}{2}\Big)\right) \\
&= \mu_B B_z m\left(1 + \frac{1}{2l+1}\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle b|\, H_M\, |b\rangle &= \mu_B B_z\big(\langle b|\, J_z\, |b\rangle + \langle b|\, S_z\, |b\rangle\big) \\
&= \mu_B B_z\left(m + \frac{1}{2l+1}\Big(-\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2} + \frac{l-m+\frac{1}{2}}{2}\Big)\right) \\
&= \mu_B B_z m\left(1 - \frac{1}{2l+1}\right)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\langle a| H_M |b\rangle &= \mu_B B_z \frac{1}{2l+1}\Big(\sqrt{(l-m+\frac{1}{2})(l+m+\frac{1}{2})}\,\langle a| S_z |a\rangle - \sqrt{(l+m+\frac{1}{2})(l-m+\frac{1}{2})}\,\langle b| S_z |b\rangle\Big) \\
&= -\mu_B B_z \frac{\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 - m^2}}{2l+1} \\
&= \langle b| H_M |a\rangle
\end{aligned}
$$

Wir bestimmen nun die Eigenwerte der Matrix.

$$
\begin{vmatrix} \langle a| H_M |a\rangle - \lambda & \langle a| H_M |b\rangle \\ \langle b| H_M |a\rangle & \langle b| H_M |b\rangle - \lambda \end{vmatrix} = 0
$$

$$
\mu_b B_z \left(\left(\frac{2lm}{2l+1} - \lambda \right) \left(\frac{(2l+2)m}{2l+1} - \lambda \right) - \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - m^2}{\left(2l+1\right)^2} \right) = 0
$$

$$
\Rightarrow \lambda_{1,2} = m \pm \frac{1}{2}
$$

Somit erhalten wir für die Energieaufspaltung den Wert $\Delta E = \mu_B B_z(m \pm \frac{1}{2})$.

Übung 2. *Chained Bell inequalities*

In dieser Aufgabe werden wir eine Form der Bell'schen Ungleichung kennen lernen, deren Verletzung durch die Quantenmechanik (QM) noch stärker ist, als die Verletzung der in der Vorlesung besprochenen Version. Wir bezeichnen mit X das Resultat der Messung des ersten Spin und mit Y das Resultat einer raumzeitlich getrennten Messung des zweiten Spin eines Singulett-Zustandes. Wie in Aufgabe 8.3 findet die Messung jeweils bezüglich einer um einen Winkel α rotierten Basis statt. Der Index in X_α gibt diesen Winkel an. Betrachte nun die "Bell-Quantity" I_N für $i \in \{0, 2, \ldots, 2N-2\}$ und $j \in \{1, 3, \ldots, 2N-1\}$,

$$
I_N := P\Big[X_0 \neq Y_{\frac{2N-1}{2N}\frac{\pi}{2}}\Big] + \sum_{|i-j|=1} P\Big[X_{\frac{i}{2N}\frac{\pi}{2}} = Y_{\frac{j}{2N}\frac{\pi}{2}}\Big]. \tag{2}
$$

(a) Wir gehen zunächst von der Existenz verborgener Variablen aus. Dazu wollen wir annehmen, dass jede Messung von X, Y die Realisierung zweier unabhängiger Zufallsvariablen ist, die ausschliesslich Werte ± 1 annehmen können. Zeige, dass dann $I_N \geq 1$ gilt.

Hinweis. Betrachte

$$
F_N := 1 - \delta_{X_0 Y_{\frac{2N-1}{2N}\frac{\pi}{2}}} + \sum_{|i-j|=1} \delta_{X_{\frac{i}{2N}\frac{\pi}{2}} Y_{\frac{j}{2N}\frac{\pi}{2}}}, \tag{3}
$$

wobei $\delta_{X_\alpha Y_\beta}$ das Kronecker-Delta der Resultate der Messung X_α und Y_β ist. Zeige, dass für jede mögliche Realisierung der verschiedenen Zufallsvariablen $F_N \geq 1$ gilt, und folgere daraus die Behauptung.

(b) Berechne I_N nach den Gesetzen der QM. Wie verhält sich I_N für $N \to \infty$? Benutze dazu das Resultat von Aufgabe 8.3.

(c) Betrachte den Fall $N = 2$. Vergleiche die Verletzung von $I_2 \leq 1$ durch die QM mit der Verletzung der Ungleichung (10.2.11) im Skript.

(d) Bei der Behandlung der Bell'schen Ungleichung im Skript werden Messungen bezüglich gedrehter Raumachsen $\vec{n}$ betrachtet, während wir bis Anhin von abstrakten Rotationen im Hilbertraum $\mathbb{C}^2$ ausgegangen sind. Wie muss man $\vec{n}$ im Experiment wählen, wenn man einen Spin bezüglich einer im Hilbertraum um den Winkel α gedrehten Basis messen möchte?

Lösung.

(a) Wir betrachten mögliche Kombinationen der $2N$ Messwerte für die verschiedenen Messrichtungen und versuchen diese so zu wählen, dass $F_N < 1$. Wir sehen, dass die Summe in (3) in diesem Fall den Wert 0 annehmen muss, und somit auch jedes einzelne Delta in der Summe verschwindet. Wir wählen für X_0 den Wert $+1$ schliessen aus der Betrachtung der folgenden Tabelle, dass dann $Y_{\frac{2N-1}{2N}\frac{\pi}{2}} = -1$ gelten muss.

X_α	α	β	Y_β
$+1$	0		
		$\frac{1}{2N}\frac{\pi}{2}$	-1
$+1$	$\frac{2}{2N}\frac{\pi}{2}$		
		$\frac{3}{2N}\frac{\pi}{2}$	-1
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$+1$	$\frac{2N-2}{2N}\frac{\pi}{2}$		
		$\frac{2N-1}{2N}\frac{\pi}{2}$	-1

Somit verschwindet aber auch das erste Delta in (3) und wir haben $F_N = 1$. Analog können wir auch argumentieren, falls X_0 den Wert -1 annimmt. Somit ist die im Hinweis aufgestellte Behauptung bewiesen. Da es sich bei I_N um den Erwartungswert von F_N handelt, folgt daraus $I_N \geq 1$.

(b) Aus der Lösung von Aufgabe 8.3 entnehmen wir $P[X_\alpha \neq Y_\beta] = \cos^2(\alpha - \beta)$. Daraus folgt

$$P[X_\alpha = Y_\beta] = 1 - \cos^2(\alpha - \beta) = \sin^2(\alpha - \beta).$$

Somit haben wir

$$I_N = \cos^2\left(\frac{2N-1}{2N}\frac{\pi}{2}\right) + (2N-1)\sin^2\left(\frac{1}{2N}\frac{\pi}{2}\right) = 2N\sin^2\left(\frac{1}{2N}\frac{\pi}{2}\right)$$

und $\lim_{N\to\infty} I_N = 0$.

(c) Wir setzen $N = 2$ und erhalten aus b)

$$I_2 = 4\sin^2\left(\frac{\pi}{8}\right) = 2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{4}\right)\right) = 2 - \sqrt{2} < 1.$$

Ausserdem haben wir $1 - I_2 = \sqrt{2} - 1$. Das heisst, dass die relative Abweichung des QM-Erwartungswerts vom durch die Bell'sche Ungleichung gegebenen Grenzwert gerade gleich gross ist, wie bei der im Skript gewählten Formulierung.

(d) Wir betrachten den in Aufgabe 8.3 definierten Operator O^α zur Messung des Spin bezüglich der Basis $(|\alpha\rangle, |\alpha^\perp\rangle)$, wobei $|\alpha\rangle = \cos(\alpha)|\vec{e}_1\rangle + \sin(\alpha)|\vec{e}_2\rangle$ und $|\alpha^\perp\rangle = -\sin(\alpha)|\vec{e}_1\rangle + \cos(\alpha)|\vec{e}_2\rangle$.

$$\begin{aligned}
O^\alpha &= |\alpha\rangle\langle\alpha| - |\alpha^\perp\rangle\langle\alpha^\perp| \\
&= \cos^2(\alpha)|\vec{e}_1\rangle\langle\vec{e}_1| + \cos(\alpha)\sin(\alpha)\big(|\vec{e}_1\rangle\langle\vec{e}_2| + |\vec{e}_2\rangle\langle\vec{e}_1|\big) + \sin^2(\alpha)|\vec{e}_2\rangle\langle\vec{e}_2| \\
&\quad - \sin^2(\alpha)|\vec{e}_1\rangle\langle\vec{e}_1| + \cos(\alpha)\sin(\alpha)\big(|\vec{e}_1\rangle\langle\vec{e}_2| + |\vec{e}_2\rangle\langle\vec{e}_1|\big) - \cos^2(\alpha)|\vec{e}_2\rangle\langle\vec{e}_2| \\
&= \cos(2\alpha)\big(|\vec{e}_1\rangle\langle\vec{e}_1| - |\vec{e}_2\rangle\langle\vec{e}_2|\big) + \sin(2\alpha)\big(|\vec{e}_1\rangle\langle\vec{e}_2| + |\vec{e}_2\rangle\langle\vec{e}_1|\big).
\end{aligned}$$

In der Matrixschreibweise bezüglich der nicht rotierten Basis von $\mathbb{C}^2$ sieht man nun

$$O^\alpha = \begin{pmatrix} \cos(2\alpha) & \sin(2\alpha) \\ \sin(2\alpha) & -\cos(2\alpha) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(2\alpha) \\ 0 \\ \cos(2\alpha) \end{pmatrix} \cdot \vec{\sigma}.$$

Die Messung bezüglich einer um den Winkel α rotierten Basis entspricht also der Messung des Spin entlang einer um den Winkel 2α gedrehten Raumachse. Somit entspricht das im Skript auf Seite 110 skizzierte Setup mit einem Raumwinkel von jeweils $\frac{\pi}{4}$ zwischen den Messachsen wieder Situation aus Teilaufgabe c), bei der die Spins bezüglich um den Winkel $\frac{\pi}{8}$ gedrehten Basen gemessen werden.