3.4 Hydrogen atom

Eigenstates $\psi_{n\ell m} \sim (2Kr)\, e^{-Kr}\, L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2Kr)\, Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)$

$K := 1/\hbar \sqrt{2m|E|}$

associated Laguerre polynomial $L_q^p(x) = \frac{d^p}{dx^p} L_q(x)$

Laguerre polynomial of degree q $L_q(x) = e^x \frac{d^q}{dx^q} e^{-x} x^q$

3.5 Magnetic moment and Zeeman effect

hom magnetic field given by $\underline{A} = 1/2\, (\underline{B} \times \underline{r})$ $\quad B = (0,0,B)$

$$H = \frac{1}{2m_0}(\underline{p} - e\underline{A})^2 + V(r) = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) + \mu_3 B$$

magnetic moment

$$E = E_{n\ell} - \frac{\hbar e B}{2m_0} m \qquad \mu_3 = \frac{e\hbar}{2m_0} m$$

H atom E_n
(ℓ-degeneracy)

$m = -\ell, \dots, \ell$ Zeemann splitting
magnetic quantum number

SFB - Präsentation

Mo 30.6 $\quad$ 9:15 : 12:30 $\quad$ EW 201

unbedingt pünktlich,
nicht vorzeitig gehen !!!

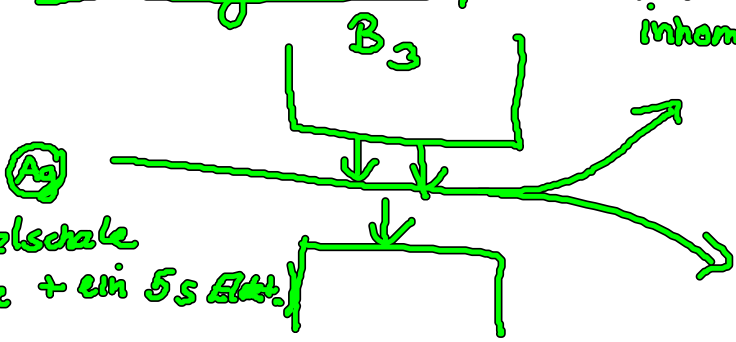
---

4 Spin und Systeme identischer Teilchen

4.1 Spin - Operatoren und -zustände

Stern-Gerlach Experiment (1922)

inhomogenes Magnetfeld $\underline{\nabla} B_3 \perp$ Strahl



(Kugelschale
Schale + ein 5s Elekt.)

Kraft auf magnet. Moment: $\underline{F} = \underline{\nabla}(\mu_3 B_3) = \mu_3 \underline{\nabla} B_3$

$\Rightarrow$ Ablenkung $\sim \mu_3$

Gesamtdrehimpuls des Elektrons

$$\mu_3 \sim J_3 = \hbar m_j$$

Bahndrehimpuls l ergäbe $\underbrace{(2l+1)}_{\text{ungeradzahlig}}$-fache Strahlaufspaltung

beobachtet 2-fache Aufspaltung

$\underline{\mu} \sim \underline{s}$ Eigendrehimpuls des Elektrons

Spin

$s_3 = m_s \hbar$

$$\boxed{\begin{array}{l} m_s = \pm 1/2 \\ l \equiv s = 1/2 \end{array}}$$

klassische Vorstellung: „Rotation eines geladenen Körpers mit Masse m_0 um seine Achse"

$$\rightarrow \quad \underline{\mu} = \frac{e}{2m_0}\underline{s} \qquad (e<0)$$

$$\Rightarrow \quad \mu_3 = \frac{e}{2m_0} s_3 = \pm\frac{e\hbar}{4m_0} \qquad ↯ \text{ falsch}$$

$$\text{exp} \quad = g\frac{e}{2m_0} s_3$$

$$= -g\, m_s \mu_B \qquad \text{mit } g = 2{,}0023$$

Landé-Faktor

gyromagn. Faktor

$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_0}$ Bohrsche Magneton

Spin als zusätzlicher Freiheitsgrad des Elektrons

Spin-Eigenzustände $|m_s\rangle \in \mathcal{H}_S$ Spin-Hilbertraum (2-dim)

Notation: $|+1/2\rangle = |\uparrow\rangle$ "Spin up"

$|-1/2\rangle = |\downarrow\rangle$ "Spin down"

Dimensionsloser Spin-Operator $\underline{\hat{\sigma}}$

$\hat{S}_3 |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle$

$\hat{S}_3 |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle$

$\boxed{\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}}$ $\Longrightarrow$ $\boxed{\begin{aligned} \hat{\sigma}_3 |\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle \\ \hat{\sigma}_3 |\downarrow\rangle &= -|\downarrow\rangle \end{aligned}}$

Eigenwerte ± 1

Orthonormierung: $\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1$

$\langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0$

Vollständigkeit $|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = 1$

=> Jeder beliebige, auch zeitabhängige Spinzustand kann entwickelt werden als

$$|a(t)\rangle = |\uparrow\rangle \underbrace{\langle\uparrow|a(t)\rangle}_{=: a_1(t)} + |\downarrow\rangle \underbrace{\langle\downarrow|a(t)\rangle}_{=: a_2(t)}$$

Aus $\underline{\hat{S}} \times \underline{\hat{S}} = i\hbar \underline{\hat{S}}$ (allg. Drehimpuls-Vertauschrelation)

$\underline{\hat{\sigma}} \times \underline{\hat{\sigma}} = 2i \underline{\hat{\sigma}}$

bzw $[\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] = 2i\, \hat{\sigma}_l$ (zyklisch)

$$\hat S^2|\uparrow\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\uparrow\rangle$$
$$\hat S^2|\downarrow\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\downarrow\rangle$$

$s=1/2 \Rightarrow$
$$\boxed{\begin{aligned}\hat\sigma^2|\uparrow\rangle &= 3|\uparrow\rangle\\ \hat\sigma^2|\downarrow\rangle &= 3|\downarrow\rangle\end{aligned}}$$

Spin-Leiteroperatoren $\hat\sigma_\pm := \hat\sigma_1 \pm i\hat\sigma_2$

mit $\hat\sigma_+|\uparrow\rangle = 0$ $\quad \hat\sigma_-|\downarrow\rangle = 0$

$$\Rightarrow \quad \begin{aligned}\hat\sigma_1|\uparrow\rangle &= -i\hat\sigma_2|\uparrow\rangle\\ \hat\sigma_1|\downarrow\rangle &= i\hat\sigma_2|\downarrow\rangle\end{aligned} \qquad \circledast$$

Andererseits $\hat\sigma_+|\downarrow\rangle = \alpha|\uparrow\rangle \qquad \hat\sigma_-|\uparrow\rangle = \beta|\downarrow\rangle$

Berechnung von α, β:

$$\alpha^*\alpha = \langle\downarrow|\hat\sigma_+^+\hat\sigma_+|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|(\hat\sigma_1 - i\hat\sigma_2)(\hat\sigma_1 + i\hat\sigma_2)|\downarrow\rangle$$
$$= \langle\downarrow|\underbrace{\hat\sigma_1^2 + \hat\sigma_2^2}_{\hat\sigma^2 - \hat\sigma_3^2} + i\underbrace{[\hat\sigma_1, \hat\sigma_2]}_{2i\hat\sigma_3}|\downarrow\rangle$$
$$= \langle\downarrow|(\hat\sigma^2 - \hat\sigma_3^2 - 2\hat\sigma_3)|\downarrow\rangle$$
$$= \langle\downarrow|(3 - 1 + 2)|\downarrow\rangle = 4 \quad \Rightarrow \quad |\alpha| = 2$$

Weiter $\langle\uparrow|\hat\sigma_+|\downarrow\rangle = \alpha\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \alpha$
$$= \langle\hat\sigma_-\uparrow|\downarrow\rangle = \beta^*\langle\downarrow|\downarrow\rangle = \beta^*$$

also $\alpha = \beta^*$

Wähle <u>oBdA</u>: $\alpha = \beta = 2$

$$\Rightarrow \quad (\hat\sigma_1 + i\underbrace{\hat\sigma_2)|\downarrow\rangle}_{\circledast\ \hat\sigma_1|\downarrow\rangle} = \underset{\uparrow\,\alpha}{2}|\uparrow\rangle \qquad (\hat\sigma_1 \underbrace{- i\hat\sigma_2)|\uparrow\rangle}_{\circledast\ -\hat\sigma_1|\uparrow\rangle} = \underset{\uparrow\,\beta}{2}|\downarrow\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \hat\sigma_1|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \qquad \hat\sigma_1|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$$

<u>Spin-flip Op</u>

einsetzen in $\circledast$ $\Rightarrow$
$$\hat\sigma_2|\uparrow\rangle = i|\downarrow\rangle \qquad \hat\sigma_2|\downarrow\rangle = -i|\uparrow\rangle$$

Zusammenfassung

	$\|\uparrow\rangle$	$\|\downarrow\rangle$
$\hat{\sigma}_1$	$\|\downarrow\rangle$	$\|\uparrow\rangle$
$\hat{\sigma}_2$	$i\,\|\downarrow\rangle$	$-i\,\|\uparrow\rangle$
$\hat{\sigma}_3$	$\|\uparrow\rangle$	$-\|\downarrow\rangle$

Darstellung der Spin-Operatoren durch 2×2 Matrizen im 2-dim Spin Eigenraum $\mathcal{H}_S$:

$$\begin{pmatrix} \langle\uparrow|\hat{\sigma}_i|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\hat{\sigma}_i|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|\hat{\sigma}_i|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\hat{\sigma}_i|\downarrow\rangle \end{pmatrix} = (\hat{\sigma}_i)_{\alpha\beta}$$

Matrixelemente

Operator komponente $i = 1, 2, 3$

$$\left.\begin{aligned} \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}\right\}$$ Pauli'schen Spinmatrizen

$$\sigma_1 \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i\,\sigma_3$$

$$\sigma_2 \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = -i\,\sigma_3$$

$\Rightarrow [\sigma_1, \sigma_2] = 2i\,\sigma_3$ ist erfüllt, usw

S_3 – Darstellung der Zustände

$$\left.\begin{aligned} |\uparrow\rangle &\hat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |\downarrow\rangle &\hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}\right\}$$ Basis-Spinoren

$$\langle\uparrow| \hat{=} (1, 0)$$

$$\langle\downarrow| \hat{=} (0, 1)$$

z.B. $$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\hat{=} \quad \hat{\sigma}_1 |\uparrow\rangle \quad = |\downarrow\rangle$ usw.

4.2 Dynamik des 2-Zustandssystem

potentielle Energie des magnet. Moments $\underline{\mu}$ des Elektron-Spin im äußeren Magnetfeld $\underline{B} = B\,\underline{e}_3$

$$\boxed{V = -\underline{\mu}\,\underline{B}} \qquad \text{mit } \underline{\mu} = \underset{\approx 2}{g}\,\frac{e}{2m_0}\,\underline{s} = +\frac{e\hbar}{2m_0}\,\hat{\underline{\sigma}} \qquad (e<0)$$

$$V = -\frac{e\hbar}{2m_0}\,\underline{\sigma}\,\underline{B} = \frac{-e\hbar B}{2m_0}\,\hat{\sigma}_3 = \hbar\omega_L\,\hat{\sigma}_3$$

mit Larmor Frequenz $\omega_L := \frac{|e|B}{2m_0}$

Wenn der Spin an keine weitere Variable ankoppelt, ist $\hat{H} = V$ der Hamiltonoperator der Spin Variable (im Spin Hilbertraum)

Dynamik eines Spins im Magnetfeld

$$\dot{\hat{\underline{\sigma}}} = \frac{i}{\hbar}\,[\hat{H}, \hat{\underline{\sigma}}] = i\omega_L\,[\hat{\sigma}_3, \hat{\underline{\sigma}}]$$

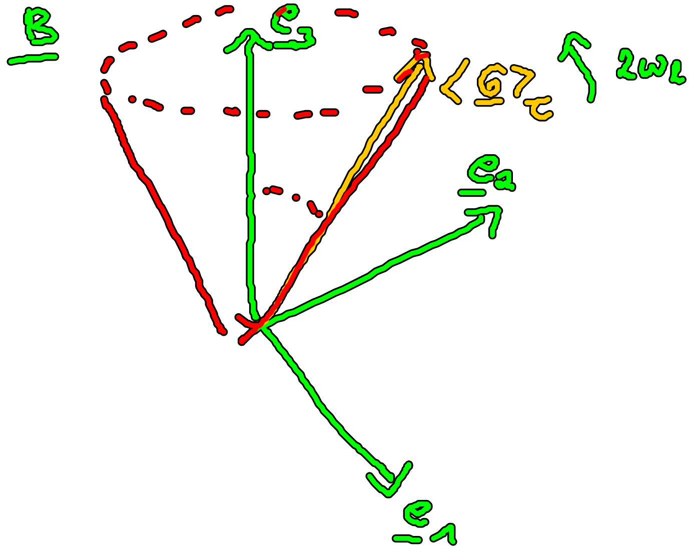
Erwartungswerte mit $[\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2] = 2i\sigma_3$:

$$\left.\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\hat{\sigma}_1\rangle &= -2\omega_L\langle\hat{\sigma}_2\rangle \\ \frac{d}{dt}\langle\hat{\sigma}_2\rangle &= 2\omega_L\langle\hat{\sigma}_1\rangle \end{aligned}\right\} \quad \frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{\sigma}_1\rangle + (2\omega_L)^2\langle\hat{\sigma}_1\rangle = 0$$

oszill in der x-y Ebene

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\sigma}_3\rangle = 0$$

Lösung
$$\langle\hat{\sigma}_1\rangle_t = \langle\hat{\sigma}_2\rangle_0 \sin(2\omega_L t) + \langle\hat{\sigma}_1\rangle_0 \cos(2\omega_L t)$$
$$\langle\hat{\sigma}_2\rangle_t = \langle\hat{\sigma}_2\rangle_0 \cos(2\omega_L t) - \langle\hat{\sigma}_{1}\rangle_0 \sin(2\omega_L t)$$
$$\langle\hat{\sigma}_3\rangle_t = \langle\sigma_3\rangle_0$$



Anfangsbed. (oBdA): $\langle \hat{\sigma}_2 \rangle_0 = 0$

$$\Rightarrow |\langle \hat{\underline{\sigma}} \rangle_t|^2 = \langle \hat{\sigma}_1 \rangle^2 + \langle \hat{\sigma}_2 \rangle^2 + \langle \hat{\sigma}_3 \rangle^2$$

$$= \langle \hat{\sigma}_1 \rangle_0^2 \left[\cos^2 2\omega_L t + \sin^2 2\omega_L t \right] + \langle \hat{\sigma}_3 \rangle_0$$

$$= |\langle \underline{\sigma} \rangle_0|^2 = \text{const}$$

Erwartungswert des Spins präzediert mit $2\omega_L$ um das Magnetfeld

Schrödingergl. für die Spinzustände

$$\boxed{\underbrace{\hbar\omega\, \hat{\sigma}_3}_{H} |a(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a(t)\rangle}$$

Entwicklung $|a(t)\rangle = a_1(t)\,|\uparrow\rangle + a_2(t)\,|\downarrow\rangle$

Matrix-Darstellung

$$\hbar\omega_L \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \begin{aligned} -i\omega_L a_1 &= \dot{a}_1 \\ i\omega_L a_2 &= \dot{a}_2 \end{aligned}$$

$-i\omega_L t$

Lösung $a_1(t) = a_{10}\, e^{i\omega_L t}$

$a_2(t) = a_{20}\, e^{i\omega_L t}$

$$\boxed{|a(t)\rangle = a_{10}\, e^{-i\omega_L t} |\uparrow\rangle + a_{20}\, e^{i\omega_L t} |\downarrow\rangle}$$

Hier ergibt sich $\langle \hat{\sigma}_1 \rangle_t$ wie oben (Spin-Präzession)