

4.3 Zustände mit Bahn- & Spin-Freiheitsgraden

- Bisher: • Zum Einen Quantenzahlen der Bahnbewegung
→ Zustand $|\underline{\tau}\rangle = |x, y, z\rangle$, oder $|n, l, m\rangle$
- Zum Anderen Quantenzahlen des Spin ($\frac{1}{2}$)
→ Zustand $|s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}\rangle \equiv |m_s = \pm \frac{1}{2}\rangle$
- Zwei verschiedene Hilbert-Räume, deren Zustände unabhängig voneinander sind
→ Hilbert Raum \mathcal{H}_B der Bahn-Bewegung:
 $|\underline{\tau}\rangle \in \mathcal{H}_B$
→ Hilbert-Raum \mathcal{H}_S für den Spin:
 $|m_s\rangle \in \mathcal{H}_S$

- Jetzt: • Bilde „Produktzustand“ aus Bahn- & Spinzustand:

$$|\underline{\tau}, m_s\rangle := |\underline{\tau}\rangle \otimes |m_s\rangle \equiv |\underline{\tau}\rangle |m_s\rangle \in \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S$$

- Es gilt für zwei Zustände $|\underline{\tau}, m_s\rangle$ & $|\underline{\tau}', m_s'\rangle$ aus $\mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S$:

$$\begin{aligned} \langle \underline{\tau}, m_s | \underline{\tau}', m_s' \rangle &= \langle \underline{\tau} | \underline{\tau}' \rangle \langle m_s | m_s' \rangle \\ &= \delta(\underline{\tau} - \underline{\tau}') \delta_{m_s, m_s'} \end{aligned}$$

Orthogonalität

- Vollständigkeit:

$$\mathbb{1} = \mathbb{1}_B \otimes \mathbb{1}_S = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\tau |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}| \otimes \sum_{m_s = \pm \frac{1}{2}} |m_s\rangle \langle m_s|$$

\uparrow Eins-Operator im
 Bahn-, Spin-
 Raum

$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\tau \left(|\underline{r}, m_s = +\frac{1}{2}\rangle \langle \underline{r}, m_s = +\frac{1}{2}| + |\underline{r}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \langle \underline{r}, m_s = -\frac{1}{2}| \right)$$

- Zerlege beliebigen Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S$ nach den beiden Spin- $\frac{1}{2}$ -Basis-Zuständen $|m_s = \pm \frac{1}{2}\rangle$:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \mathbb{1}_B \otimes \mathbb{1}_S |\psi\rangle = \mathbb{1}_B \otimes \sum_{m_s = \pm \frac{1}{2}} |m_s\rangle \langle m_s| \psi\rangle$$

$$\text{Definiere: } |\psi_{\pm}\rangle := \mathbb{1}_B \otimes \langle m_s = \pm \frac{1}{2} | \psi\rangle \equiv \langle m_s = \pm \frac{1}{2} | \psi\rangle$$

$\left\{ \begin{array}{l} \text{Projiziert nur Spin-} \\ \text{nicht Bahnfreiheits-} \\ \text{grade aus } |\psi\rangle \end{array} \right.$

$$\Rightarrow \text{Damit: } |\psi\rangle = |\psi_+\rangle |m_s = +\frac{1}{2}\rangle + |\psi_-\rangle |m_s = -\frac{1}{2}\rangle$$

- Benutze 2D-Vektordarstellung der Zustände $|m_s\rangle$:

$$|m_s = +\frac{1}{2}\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |m_s = -\frac{1}{2}\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Damit: } |\psi\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{pmatrix} \quad \text{„Spinoren“}$$

- Wahrscheinlichkeitsdichte:

- $|\langle \underline{r}, m_s | \psi\rangle|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für ein Teilchen mit Spin m_s

$$\begin{aligned} \cdot \int |\langle \underline{r}, m_s = \pm \frac{1}{2} | \psi \rangle|^2 d^3 r &= \int |\langle \underline{r} | \psi_{m_s = \pm \frac{1}{2}} \rangle|^2 d^3 r \\ &= \int |\psi_{m_s = \pm \frac{1}{2}}(\underline{r})|^2 d^3 r \end{aligned}$$

ist die Wkt., das Teilchen mit dem $m_s = \pm \frac{1}{2}$ im Volumen $d^3 r$ um \underline{r} zu finden

Schrödinger-Gleichung im Spin-Bahn-Raum

• Hamilton-Operator für Bahn-Bewegung:

$$\hat{H}_B = \frac{(\hat{p} - e\hat{A})^2}{2m} + V(\hat{r})$$

wirkt auf Zustände in \mathcal{H}_B

• Hamilton-Operator für Spin des Teilchens:

$$\hat{H}_S = \pm \omega_L \hat{\sigma}_3, \text{ wirkt auf Zustände in } \mathcal{H}_S$$

• Gesamt-Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \hat{H}_B \otimes \mathbb{1}_S + \mathbb{1}_B \otimes \hat{H}_S \equiv \hat{H}_B + \hat{H}_S$$

wirkt auf Zustände in $\mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S$

→ Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}_B + \hat{H}_S) |\psi(t)\rangle$$

• in Matrix-Darstellung

$$\cdot \hat{H}_B \equiv \hat{H}_B \otimes \mathbb{1}_S = \hat{H}_B \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_B & 0 \\ 0 & \hat{H}_B \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \cdot \hat{H}_S &\equiv \mathbb{1}_B \otimes \hat{H}_S = \pm \omega_L \mathbb{1}_B \otimes \hat{\sigma}_3 = \pm \omega_L \mathbb{1}_B \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \pm \omega_L & 0 \\ 0 & -\pm \omega_L \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Zusammen:

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} |\psi_{m_s=+\frac{1}{2}}(t)\rangle \\ |\psi_{m_s=-\frac{1}{2}}(t)\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_B + \hbar\omega_L & 0 \\ 0 & \hat{H}_B - \hbar\omega_L \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} |\psi_{+\frac{1}{2}}(t)\rangle \\ |\psi_{-\frac{1}{2}}(t)\rangle \end{pmatrix}$$

bzw. in Komponenten "Pauli-Gleichung"

$$i\hbar \partial_t |\psi_{+\frac{1}{2}}(t)\rangle = (\hat{H}_B + \hbar\omega_L) |\psi_{+\frac{1}{2}}(t)\rangle$$

$$i\hbar \partial_t |\psi_{-\frac{1}{2}}(t)\rangle = (\hat{H}_B - \hbar\omega_L) |\psi_{-\frac{1}{2}}(t)\rangle$$

$$\left. \begin{array}{l} |\psi_{\pm}\rangle \equiv |\psi_{m_s=\pm\frac{1}{2}}\rangle \end{array} \right\}$$

Anwendung: einfacher Zeeman-Effekt mit Spin

Betrachte ein Elektron im kugelsymmetrischen Potential $V(r)$ und homogenen Magnetfeld $\underline{B} = B \underline{e}_z$:

$$\hat{H} = \left[\frac{(\hat{\underline{p}} - e\hat{\underline{A}})^2}{2m_0} + V(\hat{\underline{r}}) \right] \otimes \mathbb{1}_S + \mathbb{1}_B \otimes \hbar\omega_L \hat{\sigma}_z$$

Wähle symmetrische Eichung: $\hat{\underline{A}} = \frac{1}{2} \underline{B} \times \hat{\underline{r}}$

Dann gilt: $(\hat{\underline{p}} - e\hat{\underline{A}})^2 = \hat{\underline{p}}^2 - 2e \hat{\underline{A}} \cdot \hat{\underline{p}} + e^2 \hat{\underline{A}}^2$,

da $\hat{\underline{p}} \cdot \hat{\underline{A}} = \frac{1}{2} \hat{\underline{p}} \cdot (\underline{B} \times \hat{\underline{r}}) = \frac{1}{2} \sum_{n,k,l} \hat{p}_n \epsilon_{nkl} B_k \hat{x}_l$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n,k,l} \epsilon_{nkl} B_k \hat{x}_l \hat{p}_n \quad n \neq l \Rightarrow [\hat{p}_n, \hat{x}_l] = 0$$

$$= \hat{\underline{A}} \cdot \hat{\underline{p}}$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\hat{r})}_{=: \hat{H}_0} - \frac{eB}{2m_0} \left(\hat{L}_3 + \hbar \hat{\sigma}_3 \right) + \cancel{O(\underline{A}^2)}$$

$$\left[\underline{\hat{A}} \cdot \hat{p} = \frac{1}{2} (\underline{B} \times \hat{r}) \cdot \hat{p} = \frac{1}{2} \underline{B} \cdot \underbrace{(\hat{r} \times \hat{p})}_{\hat{L}} = \frac{1}{2} \underline{B} \cdot \hat{L} = \frac{1}{2} B \hat{L}_3 \right]$$

mit $\hat{H}_0 |n, l, m\rangle = E_{n,l} |n, l, m\rangle$

B=0: Eigenzustände $|n, l, m\rangle$

Eigenenergien $E_{n,l}$

$(2l+1) = (2 \cdot \frac{l}{2} + 1) = 2$ -fach entartet
vom Spin

↳ beim H-Atom zusätzlich $(2l+1)$ -fache Entartung

B ≠ 0: $\hat{H} |n, l, m, m_s\rangle = \hat{H}_0 |n, l, m, m_s\rangle + \dots$

$$\dots - \frac{eB}{2m_0} \left(\underbrace{\hat{L}_3 |n, l, m, m_s\rangle}_{= \hbar m |n, l, m, m_s\rangle} + \hbar \underbrace{\hat{\sigma}_3 |n, l, m, m_s\rangle}_{= \hbar 2m_s |n, l, m, m_s\rangle} \right)$$

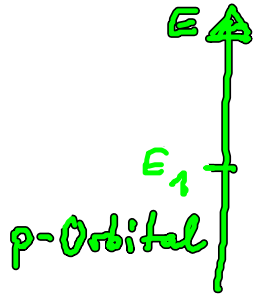
$$= \underbrace{\left[E_{n,l} - \frac{eB\hbar}{2m_0} (m + 2m_s) \right]}_{= E_{n,l,m,m_s}} |n, l, m, m_s\rangle$$

→ teilweise Aufhebung der Entartung

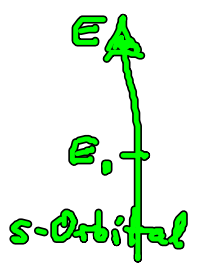
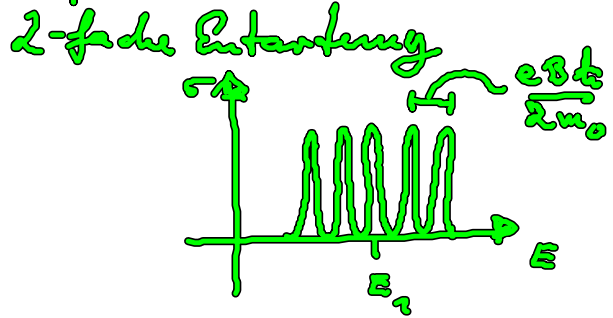
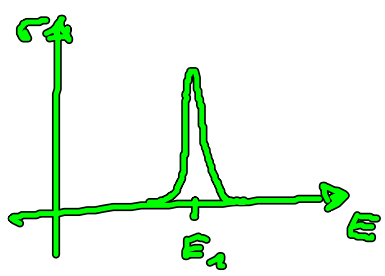
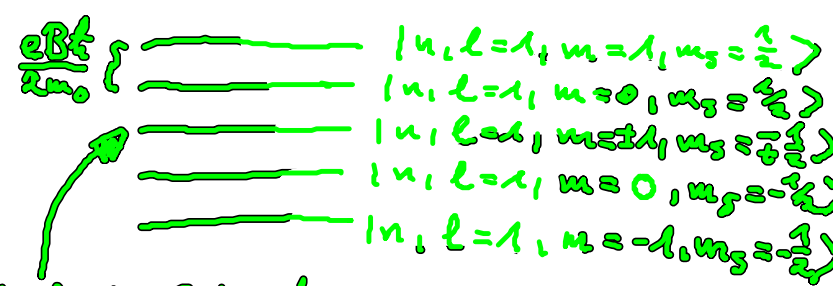
Bsp:

B=0

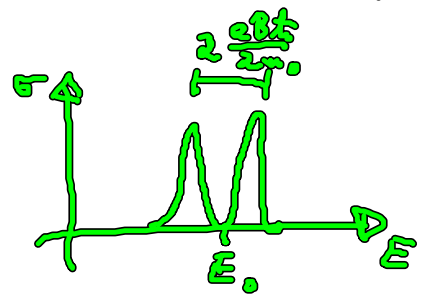
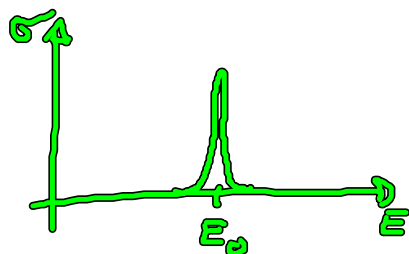
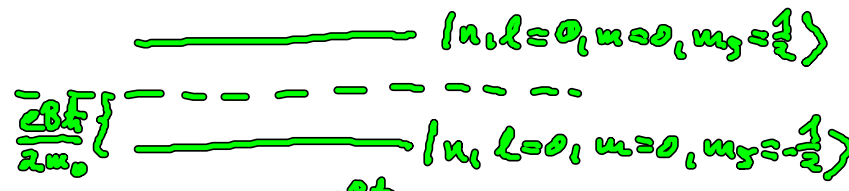
B ≠ 0



$|n, l=1, m, m_s\rangle$
6-fache Entartung



$|n, l=0, m, m_s\rangle$
2-fache Entartung



$$E = E_{n,l} + \mu_B B (m + 2m_s), \quad \mu_B = \frac{\hbar e^2}{2m_0}$$

gilt für paramagnetische Atome mit magn. Moment

$$\mu_z = \mu_B (m + 2m_s)$$

Landé-Faktor $g = 2$

Bemerkung:

	Spin	g-Faktor	Ladung	
Elektron	$1/2$	2,0023...	$-e$	← Korrektur zu $g=2$ durch QED
Proton	$1/2$	5,58	e	
Neutron	$1/2$	-3,82	0	
Neutrino	$1/2$	0	0	
Photon	1	0	0	

Infos zur Klausur

- Wo: Hauptgebäude H105 Audimax
- Wann: 8. Juli, 8:00, bitte pünktlich
- Studentenausweis mitbringen
- Stift mitbringen
- Papier gibt es von uns