1.7 Drehimpuls und Spin

1.7.1 Drehimpuls-Eigenzustände

Drehimpulsoperator $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$

in Komponenten $L_j = x_k p_l - x_l p_k$ mit (jkl) zykl.

$$\begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 1 \end{array}$$

$\underline{L}$ ist hermitesch

$$\boxed{[L_j, L_k] = i\hbar L_l}$$ mit (jkl) zyklisch

$L_1 L_2 - L_2 L_1 = i\hbar L_3$
zykl.

$\left.\right\} \boxed{\underline{L} \times \underline{L} = i\hbar \underline{L}} \Rightarrow$ ex. keine gemeins. Eigenvektoren zu je 2 Komp.

<u>Aber</u> $\boxed{\left[L^2, L_k \right] = 0}$ für $k = 1, 2, 3$

algebraische Lösung der Eigenwertgln. für L^2, L_3 mit Leiteroperatoren ergibt:

$$\boxed{\begin{aligned} L^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \\ L_3 |l, m\rangle &= \hbar m \, |l, m\rangle \end{aligned}}$$

Drehimpulsquantenzahl: $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$

$m = -l, -l+1, \ldots, l-2, l-1, l$
Richtungsquantenzahl

$(2l+1)$-fache <u>Richtungsentartung</u> von L^2

l	$\hbar\sqrt{l(l+1)}$	m	
0	0	0	Bahndrehimpuls
$\frac{1}{2}$	$\hbar\sqrt{\frac{3}{4}}$	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	Spin
1	$\hbar\sqrt{2}$	$-1, 0, 1$	Bahndrehimpuls

<u>1.7.2 Spin-Operatoren und -Zustände</u>

$\left[\hat{S}_j, \hat{S}_k \right] = i\hbar \hat{S}_l$ $\boxed{s = \frac{1}{2}, \; m_s = \pm\frac{1}{2}}$

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

Notation: $|+\frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle$ "Spin up"

$|-\frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle$ "Spin down"

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

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

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

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

<u>Eigenwerte</u> ± 1

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

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

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

Bel., auch zeitabh. Spinzustand kann entwickelt werden:

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

Aus $\underline{\hat{S}} \times \underline{\hat{S}} = i\hbar \underline{\hat{S}}$ folgt

$$\boxed{\underline{\hat{\sigma}} \times \underline{\hat{\sigma}} = 2i\underline{\hat{\sigma}}}$$ bzw. $[\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] = 2i\hat{\sigma}_l$ zykl.

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

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} \hat{\sigma}_1|\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle \\ \hat{\sigma}_2|\uparrow\rangle &= i|\downarrow\rangle \end{aligned}} \quad \boxed{\begin{aligned} \hat{\sigma}_1|\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle \\ \hat{\sigma}_2|\downarrow\rangle &= -i|\uparrow\rangle \end{aligned}}$$ <u>Spin-flip-Op.</u>

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

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

Op.komp. $i=1,2,3$

Matrixel. $\alpha,\beta = 1,2$

$$\left.\begin{aligned} \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}\right\}$$ <u>Pauli'sche Spinmatrizen</u>

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

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

$$\Rightarrow [\sigma_1, \sigma_2] = 2i\sigma_3 \quad ✓$$

S_3-Darstellung der Zustände

$\langle \alpha | \uparrow \rangle = \delta_{\alpha 1}$

$\langle \alpha | \downarrow \rangle = \delta_{\alpha 2}$

$$\left.\begin{array}{l} |\uparrow\rangle \mathrel{\hat{=}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}\right\} \text{Basis-Spinoren}$$

Spaltenvektor

$$\left.\begin{array}{l} \langle\uparrow| \mathrel{\hat{=}} (1,0) \\ \langle\downarrow| \mathrel{\hat{=}} (0,1) \end{array}\right\} \text{Zeilenvektor}$$

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

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

1.7.3 Zustände mit Bahn- u. Spin-Variablen

Sei nun $|n l m m_s\rangle$ ein Zustand mit Bahn u. Spin.

$$\underbrace{|n l m m_s\rangle = |n l m\rangle}_{\in \mathcal{H}_B} \underbrace{|m_s\rangle}_{\in \mathcal{H}_S} \quad \in \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S$$

Bahn-Zustand, Spin-Zustand

direktes Produkt der Hilberträume

(allg. für Produktzust. $|\varphi^1 \varphi^2\rangle = |\varphi^1\rangle |\varphi^2\rangle$;)

$$\langle \varphi^1 \varphi^2 | \chi^1 \chi^2 \rangle = \langle \varphi^1 | \chi^1 \rangle \langle \varphi^2 | \chi^2 \rangle$$

$$|\psi\rangle_t = |\psi_1\rangle_t |\uparrow\rangle + |\psi_2\rangle_t |\downarrow\rangle$$

mit $|\psi_\alpha\rangle_t = \int d^3r\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|\psi_\alpha\rangle_t$ Bahn-Zustand $\alpha = 1,2$

Ortsraum-Basis

In der Matrixdarstellung des Spinraumes:

$$|\psi\rangle_t = \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle_t \\ |\psi_2\rangle_t \end{pmatrix} = \int d^3r\, |\underline{r}\rangle \begin{pmatrix} \langle\underline{r}|\psi_1\rangle_t \\ \langle\underline{r}|\psi_2\rangle_t \end{pmatrix}$$

2 Spinkomponenten

Vollständigkeit der Zustände

$$\int d^3r \left\{ |\underline{r}\uparrow\rangle\langle\underline{r}\uparrow| + |\underline{r}\downarrow\rangle\langle\underline{r}\downarrow| \right\} = \mathbb{1} \in \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S$$

Tensorprodukt

$$\left.\begin{aligned} |\langle\underline{r}\uparrow|\psi\rangle_t|^2 &= |\langle\underline{r}|\psi_1\rangle_t|^2 \\ |\langle\underline{r}\downarrow|\psi\rangle_t|^2 &= |\langle\underline{r}|\psi_2\rangle_t|^2 \end{aligned}\right\}$$ Wahrscheinl.dichte, das El. zur Zeit t bei $\underline{r}$ mit Spin $\uparrow$ bzw $\downarrow$ zu finden

Schrödingergl. im Spin-Bahn-Raum:

Ham.op. für Bahn: $\hat{H}_B = \frac{1}{2m_0}(\hat{\underline{p}} - e\underline{A})^2 + V$ (El. mit Lad. $e<0$)

Ham.op. für Spin: $\hat{H}_S = \hbar\omega_L \hat{\sigma}_3$ ($\omega_L = \frac{|e|B}{2m_0}$ Larmor-Frequenz)

wirkt im Hilbertraum $\mathcal{H}_S$

<u>Ohne</u> $\hat{H}_S$: $\hat{H}_B|\psi_\alpha\rangle_t = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_\alpha\rangle_t \quad \alpha = 1,2$

(2 Schrödingergln. im Hilbertraum $\mathcal{H}_B$)

$$\iff (\hat{H}_B \otimes \mathbb{1}_s)|\psi\rangle_t = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_t$$

$\mathbb{1}_s$: Einsop. im Spinraum $\mathbb{1}_s \mathrel{\hat{=}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Mit $\hat{H}_s$: $(\hat{H}_B \otimes \mathbb{1}_s + \hat{H}_s)|\psi\rangle_t = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_t$

in Matrix-Darstell.:

$$\boxed{\begin{pmatrix} \hat{H}_B + \hbar\omega_\ell & 0 \\ 0 & \hat{H}_B - \hbar\omega_\ell \end{pmatrix}\begin{pmatrix} |\psi_1\rangle_t \\ |\psi_2\rangle_t \end{pmatrix} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} |\psi_1\rangle_t \\ |\psi_2\rangle_t \end{pmatrix}}$$

Pauli-Gleichung

Anwendung: einfacher Zeeman-Effekt mit Spin

1 El. im kugelsymm. Pot. u. homog. Magnetfeld ($\underline{B} = B\,\underline{e}_3$)

$$\hat{H} = \underbrace{\left[\frac{1}{2m_0}(\hat{\underline{p}} - e\underline{A})^2 + V(r)\right]}_{H_B} \otimes \underbrace{\mathbb{1}_s}_{\text{Spinraum}} - \frac{\hbar e B}{2m_0}\hat{\sigma}_3$$

$$\approx \underbrace{\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(r)\right]}_{\hat{H}_0} \otimes \mathbb{1}_s - \frac{eB}{2m_0}(\hat{L}_3 \otimes \mathbb{1}_s + \hbar\hat{\sigma}_3)$$

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

$\underline{B}=0$: Eigenzust. mit Spin

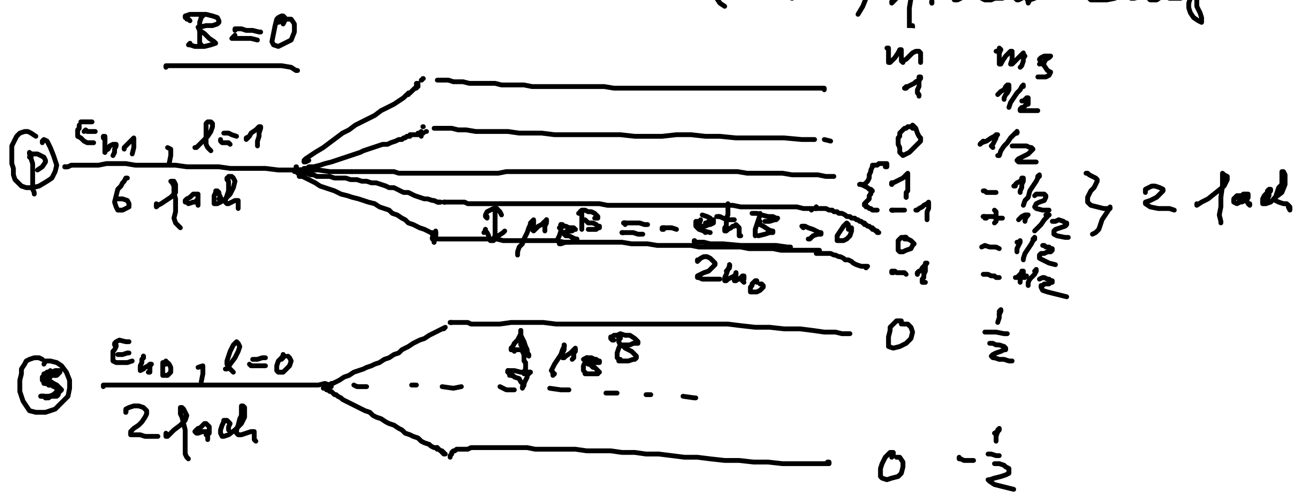
$$(\hat{H}_0 \otimes 1_s)|n l m m_s\rangle = E_{nl}|n l m m_s\rangle$$

2(2l+1) fache Entartung

(Beim H-Atom zusätzl. l-Entart.)

$$\underline{B}\neq 0 : \hat{H}|n l m m_s\rangle = \hat{H}_0|n l m\rangle|m_s\rangle - \frac{eB}{2m_0}\Big\{\underbrace{(\hat{L}_3|n l m\rangle)}_{\hbar m|n l m\rangle}|m_s\rangle + \hbar|n l m\rangle\underbrace{(\hat{\sigma}_3|m_s\rangle)}_{2m_s|m_s\rangle}\Big\}$$

$$= \underbrace{\left[E_{nl} - \frac{\hbar e B}{2m_0}(m+2m_s)\right]}_{\text{teilweise Aufhebung der 2(2l+1) fachen Energie-Entartung}}|n l m m_s\rangle$$



$$\boxed{E = E_{nl} + \mu_B B(m+2m_s)}$$

wegen Landé-Faktor $g=2$