English Summary:

1.6 Harmonic oscillator (algebraic solution)

ladder operator: $b = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,p - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \qquad b^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,p + i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x \quad \Bigg\}\ \boxed{[b, b^+] = 1}$$

$$\boxed{H = \hbar\omega\left(b^+b + \tfrac{1}{2}\right)} \qquad \boxed{b|0\rangle = \mathcal{O}} \quad \text{ground state } n=0$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right) \qquad \boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(b^+)^n|0\rangle} \quad n\text{-th excited state}$$

$N := b^+b$ number operator of oscillation quanta

$N|n\rangle = n|n\rangle$ $\qquad$ b^+ creation operator
$\qquad$ b annihilation operator

1.7 Drehimpuls und Spin

1.7.1 Drehimpuls-Eigenzustände

Drehimpulsoperator $\underline{L}$ (hermitesch)

$$\boxed{[L_j, L_k] = i\hbar L_\ell} \quad \text{mit } (jk\ell) \text{ zyklisch}$$

(folgt für den Bahndrehimpuls $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$
in Komponenten $L_j = x_k p_\ell - x_\ell p_k$ mit $(jk\ell)$ zykl.)

Drehimpuls-Vertauschungsrelationen:

$$\boxed{\underline{L} \times \underline{L} = i\hbar\,\underline{L}} \quad \Rightarrow \text{ ex. keine gemeinsamen Eigenvektoren zu je 2 Komponenten des Drehimp.}$$

$$\boxed{[L^2, L_k] = 0} \quad \text{für } k = 1,2,3$$

algebraische Lösung der Eigenwertgln. für L^2, L_3 mit Leiteroperatoren $L_+ = L_1 + iL_2$, $L_- = L_1 - iL_2$ ergibt

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

Drehimpulsquantenzahl:
$\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$
$m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell-2, \ell-1, \ell$
Richtungsquantenzahl

$(2\ell+1)$-fache Richtungsentartung von L^2.

ℓ	$\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$	m	
0	0	0	Bahndrehimpuls $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$
$\frac{1}{2}$	$\hbar\sqrt{\frac{3}{4}}$	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	Spin
1	$\hbar\sqrt{2}$	$-1, 0, 1$	Bahndrehimpuls

1.7.2 Spin-Operatoren und -Zustände

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \hat{S}_\ell \qquad \boxed{s = \frac{1}{2}, \quad m_s = \pm\frac{1}{2}}$$

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 $\hat{\underline{\sigma}}$:

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

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

Eigenwerte ± 1

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

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

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

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

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

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

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

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. $i = 1,2,3$

Matrixelemente $\alpha, \beta = 1,2$

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

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

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

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

S_3-Darstellung der Zustände

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

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

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

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

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

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

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

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

$\in \mathcal{H}_B$ $\in \mathcal{H}_S$ direktes Produkt der

Bahn- Spin- Hilberträume

Zustand

(allg. für Produktzustände $|\varphi^1\varphi^2\rangle = |\varphi^1\rangle|\varphi^2\rangle$:

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

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

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:

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

$\hat{=}$ 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

<u>Schrödingergl. im Spin-Bahn-Raum</u>:

Ham.op. für Bahn: $\hat{H}_B = \frac{1}{2m_0}(\underline{p} - e\underline{A})^2 + V$ (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> $\hat{H}_S$: $\hat{H}_B |\psi_\alpha\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_\alpha\rangle_t$ $\alpha = 1,2$

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

$\Leftrightarrow \; (\hat{H}_B \times 1_s)|\psi\rangle_t = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_t$

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

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

in Matrix-Darstell.:

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

Pauli-Gleichung

Anwendung: einfacher Zeeman-Effekt mit Spin

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

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

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

$\hat{H}_0$ mit $\hat{H}_0|nlm\rangle = E_{nl}|nlm\rangle$

$\underline{B} = 0$: Eigenzustand mit Spin

$$(\hat{H}_0 \otimes 1_s)|nlmm_s\rangle = E_{nl}|nlmm_s\rangle$$

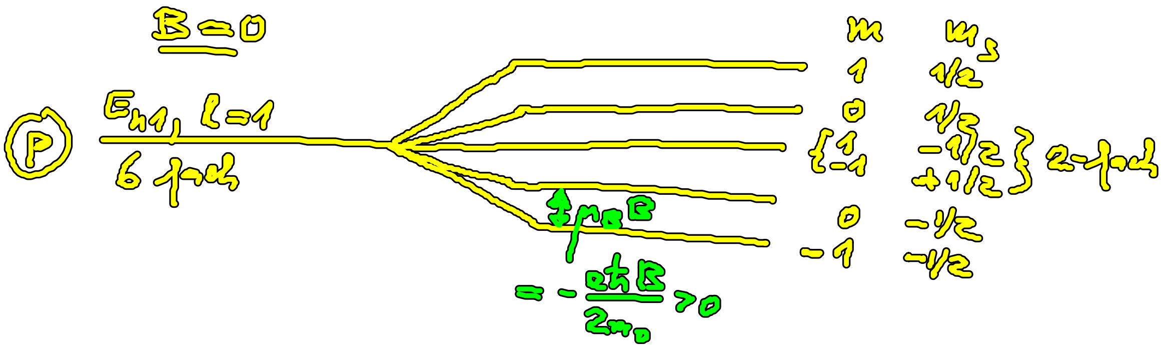
2(2l+1)fache Entartung

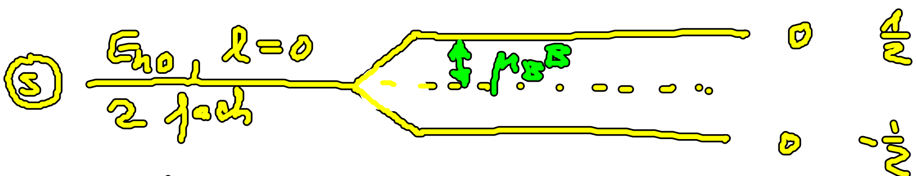
(Beim H-Atom zusätzl. l-Entartung)

$\underline{B} \neq 0$:

$$\hat{H}|nlmm_s\rangle = \hat{H}_0|nlm\rangle|m_s\rangle - \frac{eB}{2m_0}\left\{\underbrace{(\hat{L}_3|nlm\rangle)}_{\hbar m|nlm\rangle}|m_s\rangle + \hbar\underbrace{(\hat{\sigma}_3|m_s\rangle)}_{2m_s|m_s\rangle}|nlm\rangle\right\}$$

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





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

↑ wegen Landé-Faktor $g = 2$