8. Quantentheorie des Drehimpulses

8.1 Bahndrehimpuls

Motivation: Bahndrehimpuls $\rightarrow$ Zentralfeld $\rightarrow$ H-Atom $\rightarrow$ Atomspektren, Orbitale

KM: $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$

QM: Korrespondenzprinzip $\underline{L} \rightarrow \underline{\hat{L}} = \underline{\hat{r}} \times \underline{\hat{p}}$

mit den kartesischen Komponenten $\underline{L} \rightarrow \underline{\hat{L}} = \left(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z\right)^+$, z.B. $\hat{L}_z = \hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x$

und dem Betrag des Bahndrehimpulses $\underline{\hat{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$.

Aus den kanonische Vertauschungsrelationen $\left[\hat{x}_i, \hat{x}_j\right] = 0$, $\left[\hat{p}_i, \hat{p}_j\right] = 0$, $\left[\hat{x}_i, \hat{p}_j\right] = i\hbar\,\delta_{ij}$

folgt

$$\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k \quad \text{bzw.} \quad \left[\underline{\hat{L}}, \underline{\hat{L}}\right] = i\hbar\,\underline{\hat{L}} \quad \text{und} \quad \left[\underline{\hat{L}}^2, \hat{L}_i\right] = 0 \tag{8.1}$$

Schlussfolgerung: Die Komponenten des Drehimpulsoperators $\underline{\hat{L}}$ sind nicht gleichzeitig scharf messbar; aber jede Komponente $\hat{L}_i$ und $\underline{\hat{L}}^2$ können gleichzeitig scharf gemessen werden.

Welche Messwerte sind für $\underline{\hat{L}}^2$ und (z.B.) $\hat{L}_z$ zu erwarten? Um diese Frage beantworten zu können, müssen wir die beiden EWPe

$$\underline{\hat{L}}^2 \left|lm\right\rangle = \hbar^2\, l(l+1)\left|lm\right\rangle,\ l \in \Re \qquad \text{und} \qquad \hat{L}_z \left|lm\right\rangle = \hbar m \left|lm\right\rangle,\ m \in \Re \tag{8.2}$$

lösen.

8.2 Eigenwertproblem für Drehimpulsoperatoren

Def.: Jeder Vektoroperator $\underline{\hat{J}}$ mit $\underline{\hat{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$, dessen Komponenten der Vertauschungsrelation

$$\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k \qquad \rightarrow \qquad \textbf{Drehimpulsalgebra} \tag{8.3}$$

genügen, heißt **Drehimpulsoperator**.

- **Algebraische (darstellungsunabhängige) Lösung des EWP für Drehimpulsoperatoren**

Wir suchen reelle Zahlen j und m sowie EZ $|jm\rangle$ derart, dass

$$\underline{\hat{J}}^2 |jm\rangle = \hbar^2\, j(j+1)|jm\rangle \qquad \text{und} \qquad \hat{J}_z|jm\rangle = \hbar\, m|jm\rangle$$

erfüllt sind und die Komponenten $\hat{J}_i$ der Drehimpulsalgebra genügen.

(i) Da $\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 = \underline{\hat{J}}^2 - \hat{J}_z^2$ ein positiver Operator ist, folgt nach Projektion auf die EZ $\hbar^2\, j(j+1) - \hbar^2 m^2 \geq 0$ und es ergeben sich die Schranken

$$-\sqrt{j(j+1)} \leq m \leq \sqrt{j(j+1)}\ . \tag{8.4}$$

(ii) Def.: $\hat{J}_+ := \hat{J}_x + i\hat{J}_y,\ \hat{J}_- := \hat{J}_x - i\hat{J}_y$ $\rightarrow$ **Leiteroperatoren** (8.5)

Sie erfüllen die Vertauschungsrelationen (prüfen!)

$$\left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = 2\hbar\hat{J}_z,\ \left[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{J}_\pm,\ \left[\underline{\hat{J}}^2, \hat{J}_\pm\right] = 0\ . \tag{8.6}$$

(iii) $\hat{J}_z\left(\hat{J}_\pm|jm\rangle\right)=\hat{J}_z\hat{J}_\pm|jm\rangle \overset{(8.6)}{=} (\pm\hbar\hat{J}_\pm+\hat{J}_\pm\underbrace{\hat{J}_z)|jm\rangle}_{m\hbar|jm\rangle}=(m\pm 1)\hbar\hat{J}_\pm|jm\rangle$ (8.7)

$\rightarrow$ Ist $|jm\rangle$ EF der kommutierenden Operatoren $\hat{\underline{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ zu den EW $\hbar^2\,j(j+1)$ bzw. $\hbar m$, dann sind auch $\hat{J}_\pm|jm\rangle$ EF dieser Operatoren, allerdings zu den EW $\hbar^2\,j(j+1)$ und $\hbar(m\pm 1)$. Deshalb werden die Leiteroperatoren auch Auf- bzw. Absteigeoperatoren genannt: Mehrfache Anwendung von $\hat{J}_\pm$ auf $|jm\rangle$ lässt j konstant, ändert aber m in ganzzahligen Schritten.

(iv) Wegen $m^2 \leq j(j+1)$, (ii), muss die Leiter in beiden Richtungen abbrechen. Also existiert für jedes j ein $m_{max}(j)$ und ein $m_{min}(j)$ mit

$\hat{J}_+|jm_{max}\rangle = 0$ bzw. $\hat{J}_-|jm_{min}\rangle = 0$.

$\hat{J}_-$ angewendet auf die linke Relation ergibt $\underline{m_{max} = j}$, denn

$$0=\hat{J}_-\hat{J}_+|jm_{max}\rangle=(\hat{J}_x-i\hat{J}_y)(\hat{J}_x+i\hat{J}_y)|jm_{max}\rangle=\left[J_x^2+J_y^2+i\underbrace{(\hat{J}_x\hat{J}_y-\hat{J}_y\hat{J}_x)}_{i\hbar\hat{J}_z}\right]|jm_{max}\rangle=$$

$$=(\underline{\hat{\underline{J}}^2-\hat{J}_z^2-\hbar\hat{J}_z})|jm_{max}\rangle=\hbar^2\left[j(j+1)-m_{max}^2-m_{max}\right]|jm_{max}\rangle.$$

Analog führt $\hat{J}_+\hat{J}_-|jm_{min}\rangle = 0$ auf $\underline{m_{min} = -j}$.

Da m sich in ganzzahligen Schritten ändert, muss $m_{max}-m_{min}=2j$ eine ganze Zahl sein, d.h.

$$\underline{j=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\ldots.} \tag{8.8}$$

ist ganz- oder halbzahlig und m nimmt die Werte

$$\underline{m=-j,-j+1,\ldots,0,\ldots,j-1,j} \tag{8.9}$$

an.

Fazit: Drehimpulsoperatoren besitzen diskrete EW. Die Beträge der Drehimpulse sind $\hbar\sqrt{j(j+1)}$ mit $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, ...$, ihre Komponenten ganzzahlige Vielfache von $\hbar$ mit $m = 0, \pm 1/2, \pm 1, ..., \pm(j-1), \pm j$. Damit ist jeder Zustand mit gegebenem $\hat{\underline{J}}^2$ genau $2j+1$ – fach entartet $\rightarrow$ **Richtungsentartung**.

Anschauliche Darstellung:

(halbklassisches Vektormodell mit "raumfestem" Vektor als Hilfskonstruktion)

Anschaulich "präzediert $\underline{J}$ um die z-Achse" auf einem Kegelmantel,

da mit gegebenem $\hat{J}_z$ die Komponenten $\hat{J}_x$ und $\hat{J}_y$

nicht gleichzeitig scharf messbar sind.

- Höhe des Kegels: $\hbar m$,
- Mantellinie: $\hbar\sqrt{j(j+1)}$,
- Kegelradius: $\hbar\sqrt{j(j+1) - m^2}$.

8.3 Matrixdarstellung der Drehimpulsoperatoren

Die gesuchten Matrixelemente der Operatoren sind

$$\langle jm' | \hat{\underline{J}}^2 | jm \rangle = \hbar^2 j(j+1)\, \delta_{m'm},$$
$$\langle jm' | \hat{J}_z | jm \rangle = \hbar m\, \delta_{m'm}. \tag{8.10}$$

Außerdem gilt

$$\langle jm' | \hat{J}_\pm | jm \rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\; \delta_{m'm\pm 1}. \tag{8.11}$$

Um das zu beweisen, normieren wir zunächst die EF $\hat{J}_\pm \,|\, jm\rangle$

$$\hat{J}_+ \,|\, jm\rangle = C_+ \,|\, j, m+1\rangle \; , \qquad \hat{J}_- \,|\, jm\rangle = C_- \,|\, j, m-1\rangle$$

($\hat{\underline{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ bilden einen <u>vollständigen Satz von Operatoren</u>, deshalb keine Entartung !).

$$C_+ : \langle jm|\; \hat{J}_- \hat{J}_+ |jm\rangle \overset{\hat{J}_-^+ = \hat{J}_+}{=} \langle \hat{J}_+ \, jm | \hat{J}_+ \, jm\rangle = C_+^2 \underbrace{\langle j, m+1 | j, m+1\rangle}_{\text{seien normiert}} = C_+^2$$

$$C_+^2 = \langle jm|\; \hat{\underline{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z \,|jm\rangle = \hbar^2 \left[j(j+1) - m^2 - m \right],$$

$$C_+ = \hbar \sqrt{\, j(j+1) - m^2 - m \,} = \hbar \sqrt{\, (j-m)(j+m+1)}$$

Die analoge Berechnung von $\langle jm|\; \hat{J}_+ \hat{J}_- |jm\rangle$ führt auf $C_- = \hbar \sqrt{\, (j+m)(j-m+1)}$.
Also ist

$$\underline{\hat{J}_\pm \,|\, jm\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \;|\, j, m+1\rangle}$$

und wir erhalten (8.11).

<u>Beachte:</u> Tatsächlich folgt nur für $m = m_{max} = j$ wie in **(iv)** verwendet $\hat{J}_+ \,|\, jm\rangle = 0$, denn
$\hat{J}_+ \,|\, jj\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - j(j+1)} \;|\, j, j+1\rangle = 0$, sowie nur für $m = m_{min} = -j$ auch $\hat{J}_- \,|\, jm\rangle = 0$, da
$\hat{J}_- \,|\, j, -j\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) + j(-j-1)} \;|\, j, j-1\rangle = 0$.

Aus $\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + J_-)$ und $\hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - J_-)$ ergeben sich die Matrixelemente für die x- und die y- Komponente des Drehimpulsoperators.

Übungsaufgabe: Normieren Sie die Zustände $\hat{J}_{\pm}\,|jm\rangle$ und geben Sie die Matrixdarstellung der Operatoren $\hat{\underline{J}}^2, \hat{J}_z, \hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_+$ und $\hat{J}_-$ zur Basis $|jm\rangle$ an.

■ Wichtiges Beispiel: $j = \frac{1}{2}$

Dann ist $2j+1=2$ und die Drehimpulsoperatoren sind 2 x 2 Matrizen. Die möglichen m – Werte (ganzzahlige Schritte!) sind $m = \pm\frac{1}{2}$.

$\hat{\underline{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ sind in dieser Basis diagonal, für $j = \frac{1}{2}$ folgt

$$\hat{\underline{J}}^2 = \hbar^2\, j(j+1)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{J}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die EW von $\hat{J}_z$ sind $\pm\frac{\hbar}{2}$; explizit ist $\left\langle \frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|\hat{J}_z\middle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{2}$ und $\left\langle \frac{1}{2},-\frac{1}{2}\middle|\hat{J}_z\middle|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{\hbar}{2}$.

$$\hat{J}_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

denn wegen $\delta_{m',m+1}$ ist von den vier möglichen Matrixelementen

$$\left\langle \frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|\hat{J}_+\middle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle,\ \left\langle \frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|\hat{J}_+\middle|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle,\ \left\langle \frac{1}{2},-\frac{1}{2}\middle|\hat{J}_+\middle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle,\ \left\langle \frac{1}{2},-\frac{1}{2}\middle|\hat{J}_+\middle|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

nur

$$\left\langle \frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|\hat{J}_+\middle|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\;\delta_{m'm+1} \underbrace{=}_{j=\frac{1}{2},\,m=-\frac{1}{2}} \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)+\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}+1\right)}\;\underbrace{\delta_{m'm+1}}_{m'=\frac{1}{2}\;\; m+1=-\frac{1}{2}+1=\frac{1}{2}} = \hbar$$

verschieden von Null. Analog finden wir

$$\hat{J}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + J_-) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - J_-) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

$\hat{J}_x, \hat{J}_y$ und $\hat{J}_z$ hängen mit den **Pauli´schen Spinmatrizen** zusammen:

Def.: $\underline{s} = \frac{\hbar}{2}\underline{\sigma}$, $\sigma_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, vgl. Kap 8.5, Spin.

8.4 Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses

Nolting, 3.253: Der formale Übergang in die Ortsdarstellung erfolgt durch skalare Multiplikation der EWGen (8.2) mit dem Bra-Ortseigenzustand $\langle \underline{r}|$: $\langle \underline{r}|lm\rangle := \psi_{lm}(\underline{r})$. Die EW sind darstellungsunabhängig:

$$\hat{\underline{L}}^2\, \psi_{lm}(\underline{r})|lm\rangle = \hbar^2\, l(l+1)\, \psi_{lm}(\underline{r}) \ , \qquad \hat{L}_z\, \psi_{lm}(\underline{r}) = \hbar m\, \psi_{lm}(\underline{r})$$

Die Ortsdarstellung der Operatoren $\hat{\underline{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ verschaffen wir uns am einfachsten über die

Korrepondenzregel $\quad \hat{\underline{L}}^2 = (-i\hbar)^2(\underline{r}\times\underline{\nabla})^2 \ , \qquad \hat{L}_z = -i\hbar(\underline{r}\times\underline{\nabla})_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$

Nützlich ($\rightarrow$ z.B. im Hinblick auf die Behandlung der Bewegung im Zentralfeld) ist vor allem die Ortsdarstellung von $\hat{\underline{L}}$ in Kugelkoordinaten r, ϑ, φ entsprechend

$x = r\sin\vartheta\cos\varphi,\ y = r\sin\vartheta\sin\varphi,\ z = r\cos\varphi$ (also mit z-Achse als „Drehachse“). Unter Verwendung von $\underline{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta}, \frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$ folgt nach einfacher Rechnung

$$\underline{\hat{L}} = -i\hbar\, r\,(\underline{e}_r \times \underline{\nabla}) = -i\hbar\, r\left(\underline{e}_r \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \underline{e}_\vartheta \frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = -i\hbar\left\{\begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix}\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \begin{pmatrix} \mathrm{ctg}\vartheta\cos\varphi \\ \mathrm{ctg}\vartheta\sin\varphi \\ -1 \end{pmatrix}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\} \quad (8.12)$$

. Daran anknüpfend finden wir

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \hbar\, e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\,\mathrm{ctg}\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \quad (8.13)$$

und schließlich

$$\underline{\hat{L}}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z = \ldots = -\frac{\hbar^2}{\sin^2\vartheta}\left[\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \quad (8.14)$$

Beachte, dass $\underline{\hat{L}} \leftrightarrow$ Drehungen wie zu erwarten in Kugelkoordinaten nur von den beiden Winkeln ϑ und φ abhängt; insbesondere gelten die beiden sehr nützlichen Relationen für die z-Komponente des Drehimpulsoperators und den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad \text{und} \quad \underline{\nabla}^2 = \Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\underline{\hat{L}}^2}{r^2\hbar^2}. \quad (8.15)$$

Aus der darstellungsunabhängigen EWG $\hat{L}_z|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle$ wird

$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \hbar m\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ mit der Lösung $\underline{Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = e^{im\varphi}\,\Theta(\vartheta)}$. Da für uns nur eindeutige WF physikalisch sinnvoll sind, fordern wir

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = Y_{lm}(\vartheta,\varphi + 2\pi).$$

Daraus ergibt sich $e^{im2\pi} = 1$, d.h., m und (wegen $-l \le m \le l$) auch l müssen ganzzahlig sein.

FAZIT:

(i) Bahndrehimpulse werden durch ganzzahlige Quantenzahlen l und m

$$l = 0,1,2,3,... \;, \qquad m = 0,\pm 1,\pm 2,...,\pm l \tag{8.16}$$

charakterisiert.

(ii) Die Operatoren $\hat{\underline{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ sind in der Ortsdarstellung Differentialoperatoren.

- **Eigenfunktionen der Bahndrehimpulsoperatoren in Ortsdarstellung**

Den ϑ - Anteil der Wellenfunktion $\Theta_{lm}(\vartheta)$ bestimmen wir wie im Fall des HO rekursiv:

$$\hat{L}_+ |ll\rangle = 0 \xrightarrow{\text{Ortsdarstellung}} \left(+\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\,\mathrm{ctg}\vartheta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) e^{il\varphi}\,\Theta_{ll}(\vartheta) = 0\,,\ \text{bzw.}\ \left(\frac{d}{d\vartheta} - l\,\mathrm{ctg}\vartheta \right) \Theta_{ll}(\vartheta) = 0\,.$$

Die Lösung dieser Gleichung ist $\Theta_{ll}(\vartheta) = C_l \sin^l\vartheta$ mit der Konstanten C_l. Durch Anwendung von $\hat{L}_-$ auf $\Theta_{ll}(\vartheta)$ berechnen wir $\Theta_{l,l-1}(\vartheta)$ usw. Im Ergebnis erhalten wir für die EF

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{e^{im\varphi}}{\sin^m\vartheta} \left(\frac{d}{d\cos\vartheta} \right)^{l-m} \sin^{2l}\vartheta\,,\ \text{mit}\ \begin{cases} l = 0,1,2,3,... \\ m = 0,\pm 1,\pm 2,...,\pm l \end{cases}.$$

Eine äquivalente, häufig verwendete Darstellung dieser → **Kugelflächenfunktionen**

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, P_l^m(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi} \tag{8.17}$$

basiert auf den <u>zugeordneten Legendre-Polynomen</u> $P_l^m(x) := \frac{(-1)^m}{2^l\, l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l$.

Die Kugelflächenfunktionen sind entsprechend

$$\int d\Omega \; Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'} \tag{8.18}$$

normiert; dabei ist $d\Omega = \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$ das Raumwinkelelement.

8.5 Spin

Motivation: H-Atom (z.B.) im äußeren $\underline{B}$-Feld

- Aus der Elektrodynamik wissen wir, dass eine rotierende Ladungsverteilung („Kreisstrom") ein magnetisches Moment erzeugt. Kreist eine Ladung q mit $v = |\underline{v}| = \text{const}$ auf einer Kreisbahn vom Radius r ist der Strom $I = \dfrac{q\,v}{2\pi r}$; mit der Fläche $A = \pi r^2$ ergibt sich das magnetische Moment $\mu = I\,A = \dfrac{q}{2} v\,r$. Unter Verwendung des Bahndrehimpulses $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} \;\rightarrow\; L = m\,r\,v$ haben wir insgesamt

$$\underline{\mu} = \underbrace{\frac{q}{2m}}_{\text{gyromagnetisches Verhältnis}} \underline{L} \quad . \tag{8.19}$$

Die Energie des magnetischen Moments/Dipols im äußeren $\underline{B}$-Feld ist $V = -\underline{\mu}\cdot\underline{B}$.

Für ein Elektron ($m = m_e$, $q = e$) tritt daher im Fall von $\underline{B} \parallel \underline{e}_z$ der Zusatzterm $V = -\dfrac{e}{2m_e} B L_z$ in der Hamilton-Funktion des Systems H-Atom + B-Feld auf. Nach dem Korrespondenzprinzip wird dann aus dem Hamiltonoperator $\hat{H}_0$ des Wasserstoffatoms

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} .$$

Da $\hat{V}$ mit $\hat{H}_0$, also auch mit $\hat{H}$ und vertauschbar ist, ändert der Zusatzterm die EF nicht. Die EW (Energieniveaus) werden jedoch beeinflusst, denn

$$E_n^{(B\neq 0)} = E_n^{(B=0)} - \mu_B m B \quad \text{mit} \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 0{,}579 \cdot 10^{-4} \frac{eV}{T} \rightarrow \underline{\text{Bohr´sches Magneton}} \qquad (8.20)$$

FAZIT: Jedes Energieniveau des H-Atoms spaltet im Magnetfeld in 2l + 1 äquidistante Unterniveaus auf. Das äußere Feld hebt die Entartung bzgl. m auf. Bei Feldstärken von 1T beträgt die Aufspaltung $\Delta E \sim 0.610^{-4}\,\text{eV}$.

Experimentell bestätigt sich die Vorhersage (8.20) → (normaler) Zeeman-Effekt. Interessanterweise wird aber <u>zusätzlich</u> (bei Atomen mit ungerader Ordnungszahl/Elektronenzahl) eine magnetfeldbedingte Aufspaltung in eine <u>gerade</u> Anzahl von Unterniveaus beobachtet. Beispielsweise spaltet der Grundzustand $|100\rangle$ (1s – Zustand) des H-Atoms trotz $l = 0$ in zwei Unterniveaus auf.

<u>Vermutung/Hypothese</u>: Neben dem Bahndrehimpuls gibt es in der QM halbzahlige Drehimpulse → Spin

Diese Vermutung passt zu den Ergebnissen von Kap. 8.2 und wird durch weitere experimentelle Befunde gestützt:

(i) Stern-Gerlach Versuch: Ag-Atome durchlaufen inhomogenes $\underline{B}$-Feld.

(ii) Ferromagnetismus
→ Einstein-de Haas-Experiment: Drehmoment auf ferromagnetische Probe bei Umkehr der Richtung des Magnetfeldes.

(iii) Spin-Bahn-Wechselwirkung → Feinstruktur der Spektren

(iv) Wechselwirkung mit dem Kernspin → Hyperfeinstruktur der Spektren

Dirac verdanken wir die Einsicht, dass der Spin ein relativistischer Effekt ist: In einer relativistisch invarianten Bewegungsgleichung des Elektrons → **Dirac-Gleichung** (vgl. ThPh V, Quantenmechanik II) besitzt das e^- neben seiner Masse m_e und seiner Ladung q eine weitere intrinsische Eigenschaft "mit Drehimpulscharakter", den Spin.

6. Postulat: In der QM können Teilchen einen intrinsischen Drehimpuls, den Spin besitzen. Der Spin wird durch einen Vektoroperator $\underline{\hat{S}}$ beschrieben. $\underline{\hat{S}}$ genügt der Drehimpulsalgebra

$$\underline{\hat{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z), \ \left[\hat{S}_i, \hat{S}_j\right] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k \quad .$$

$\underline{\hat{S}}$ wirkt nicht im Ortsraum, sondern im Spinzustandsraum:

$$\mathcal{H} \quad = \quad \mathcal{H}_{\text{Ort}} \quad \underset{\otimes}{\overset{\text{Tensorprodukt}}{\downarrow}} \quad \mathcal{H}_{\text{Spin}} \qquad \text{d.h.} \quad |\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} |\psi_s\rangle \\ \vdots \\ |\psi_{-s}\rangle \end{pmatrix}$$

$\mathcal{H}$-Raum der Teilchenzustände	Ortszustands-raum	Spinzustandsraum (aufgespannt von 2s+1 gemeinsamen EZ von $\underline{\hat{S}}^2$ und $\hat{S}_z$)