

3.4 Hydrogen atom

Eigenstates $\psi_{nlm} \sim (2Kl)^{-1} e^{-Kr} L_{n+l}^{2l+1}(2Kr) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$

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

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 $\underline{A} = \frac{1}{2} (\underline{B} \times \underline{r})$ $B = (0, 0, B)$

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

↑
magnetic moment

$$E = E_{nl} - \frac{\hbar e B}{2m_0} m$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0} m$$



H atom E_n
(l -degeneracy)

$m = -l, \dots, l$ Zeeman splitting
magnetic quantum number

SFB - Präsentation

Mo 30.6

9:15 : 12:30

EW 201

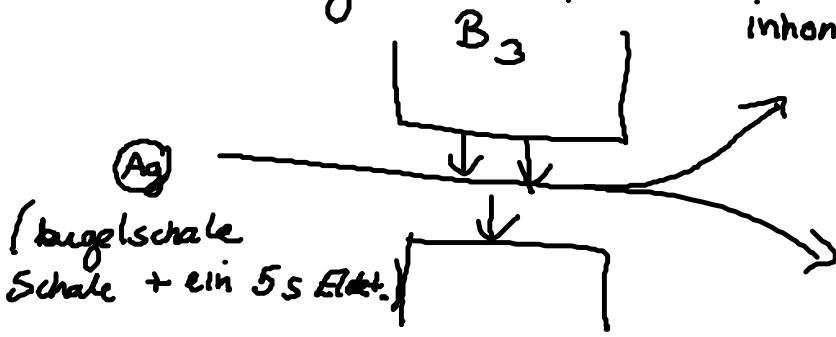
↑
unbedingt pünktlich,
nicht vorzeitig gehen !!!

4 Spin und Systeme identischer Teilchen

4.1 Spin - Operatoren und -zustände

Stein - Gerlach Experiment (1922)

inhomogenes Magnetfeld $\nabla B_z \perp \text{Strahl}$



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

\Rightarrow Ablenkung $\sim \mu_z$

gesamte Drehimpuls des Elektrons

$\mu_z \sim \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$

Bahndrehimpuls L ergäbe $(2L+1)$ -fache Strahl aufspaltung
ungeradzahlig

beobachtet 2-fache Aufspaltung

$\mu \sim \underline{S}$

Eigendrehimpuls des Elektrons

Spin

$S_z = m_s \hbar$

$m_s = \pm 1/2$ $l \equiv s = 1/2$

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

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

$\Rightarrow \mu_z = \frac{e}{2m_0} S_z = \pm \frac{e\hbar}{4m_0}$ ∇ falsch

exp $= g \frac{e}{2m_0} S_z$

$= -g m_s \mu_B$ mit $g = 2,0023$

Landé - Faktor

gyromagn. Faktor

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

Spin als zusätzlicher Freiheitsgrad des Elektrons

Spin - Eigenzustände $|m_s\rangle \in \mathcal{M}_s$

Spin - Hilbertraum
(2-dim)

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

"Spin up"

$$|-1/2\rangle = |\downarrow\rangle$$

"Spin down"

Dimensionsloser Spin - Operator

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

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

$$\boxed{\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \underline{\hat{\sigma}}}$$

\Rightarrow

$\hat{\sigma}$

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_z |\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle \\ \hat{\sigma}_z |\downarrow\rangle &= -|\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Eigenwerte ± 1

Orthogonalität:

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

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

Vollständigkeit

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

\Rightarrow Jeder beliebige, auch zeitabhängige Spin Zustand 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-Vertauschungsrelation)

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

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

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

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

$$s = 1/2$$

$$\Rightarrow$$

$\hat{G}_1^2 \uparrow\rangle$	$= 3 \uparrow\rangle$
$\hat{G}_1^2 \downarrow\rangle$	$= 3 \downarrow\rangle$

Spin - Leiteroperatoren

$$\hat{\sigma}_{\pm} := \hat{\sigma}_1 \pm i \hat{\sigma}_2$$

$$\text{mit } \hat{\sigma}_+ |\uparrow\rangle = 0$$

$$\hat{\sigma}_- |\downarrow\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \hat{\sigma}_1 |\uparrow\rangle = -i \hat{\sigma}_2 |\uparrow\rangle \quad \otimes$$

$$\hat{\sigma}_1 |\downarrow\rangle = i \hat{\sigma}_2 |\downarrow\rangle$$

Andersseits $\hat{\sigma}_+ |\downarrow\rangle = \alpha |\uparrow\rangle$ $\hat{\sigma}_- |\uparrow\rangle = \beta |\downarrow\rangle$

Berechnung von α, β :

$$\alpha^* \alpha = \langle \downarrow | \hat{\sigma}_+^\dagger \hat{\sigma}_+ | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | (\hat{\sigma}_1 - i \hat{\sigma}_2) (\hat{\sigma}_1 + i \hat{\sigma}_2) | \downarrow \rangle$$

$$= \langle \downarrow | \underbrace{\hat{\sigma}_1^2 + \hat{\sigma}_2^2}_{\hat{\sigma}^2 - \hat{\sigma}_3^2} + i \underbrace{[\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2]}_{2i \hat{\sigma}_3} | \downarrow \rangle$$

$$= \langle \downarrow | (\hat{\sigma}^2 - \hat{\sigma}_3^2 - 2\hat{\sigma}_3) | \downarrow \rangle$$

$$= \langle \downarrow | (3 - 1 + 2) | \downarrow \rangle = 4 \Rightarrow |\alpha| = 2$$

Weiter $\langle \uparrow | \hat{\sigma}_+ | \downarrow \rangle = \alpha \langle \uparrow | \uparrow \rangle = \alpha$

$$= \langle \hat{\sigma}_2^\dagger \uparrow | \downarrow \rangle = \beta^* \langle \downarrow | \downarrow \rangle = \beta^*$$

$$\text{also } \alpha = \beta^*$$

Wähle obdA: $\alpha = \beta = 2$

$$\Rightarrow (\hat{\sigma}_1 + i \hat{\sigma}_2) |\downarrow\rangle = 2 |\uparrow\rangle$$

$$\otimes \hat{\sigma}_1 |\downarrow\rangle \quad \uparrow \quad \alpha$$

$$(\hat{\sigma}_1 - i \hat{\sigma}_2) |\uparrow\rangle = 2 |\downarrow\rangle$$

$$\otimes -\hat{\sigma}_1 |\uparrow\rangle \quad \uparrow \quad \beta$$

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

$$\hat{\sigma}_1 |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad \text{Spin-Flip}$$

op

einsetzen
 \Rightarrow $\hat{\sigma}_2 |\uparrow\rangle = i |\downarrow\rangle$

$$\hat{\sigma}_2 |\downarrow\rangle = -i |\uparrow\rangle$$

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 :

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

\uparrow Operatorkomponente
 \uparrow Matrixelemente
 $i = 1, 2, 3$

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

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

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

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

S_3 - Darstellung der Zustände

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

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

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

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

$$\hat{S}_1 \uparrow \uparrow = \uparrow \downarrow \uparrow \text{ usw.}$$

4.2 Dynamik des 2-Zustands System

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

$$\boxed{V = -\underline{\mu} \underline{B}} \quad \text{mit } \underline{\mu} = g \frac{e}{2m_0} \underline{S} = + \frac{e\hbar}{2m_0} \underline{\hat{S}} \quad (g < 0)$$

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

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

Wenn der Spin an keine weitere Variable angeschlossen,

ist $\hat{H} = \hat{H}_0$ der Hamiltonoperator der Spin Variable

(im Spin Hilbertraum)

Dynamik eines Spins im Magnetfeld

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

Erwartungswerte mit $[\hat{S}_3, \hat{S}_k] = i\hbar \epsilon_{3k}$:

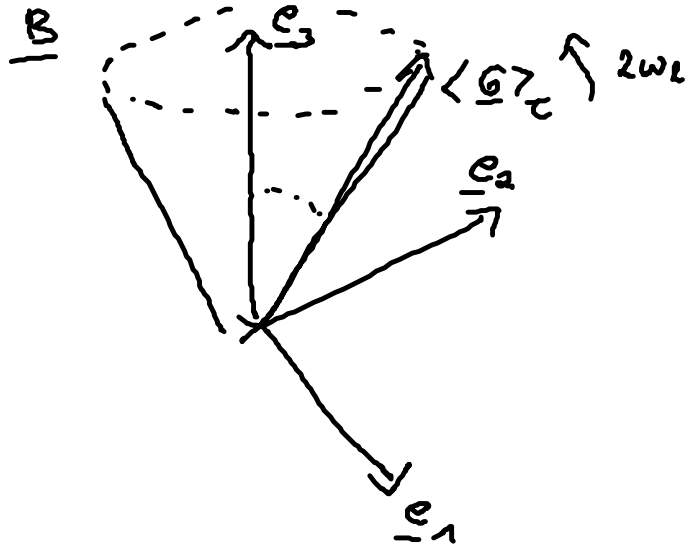
$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{S}_1 \rangle &= -2\omega_L \langle \hat{S}_2 \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{S}_2 \rangle &= 2\omega_L \langle \hat{S}_1 \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{S}_3 \rangle &= 0 \end{aligned} \right\} \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{S}_1 \rangle + (2\omega_L)^2 \langle \hat{S}_1 \rangle = 0$$

oszill in der x-y Ebene

Lösung $\langle \hat{S}_1 \rangle_t = \langle \hat{S}_2 \rangle_0 \sin(2\omega_L t) + \langle \hat{S}_1 \rangle_0 \cos(2\omega_L t)$

$\langle \hat{S}_2 \rangle_t = \langle \hat{S}_2 \rangle_0 \cos(2\omega_L t) - \langle \hat{S}_1 \rangle_0 \sin(2\omega_L t)$

$\langle \hat{S}_3 \rangle_t = \langle \hat{S}_3 \rangle_0$



Anfangs bed. ($\circ B \parallel A$): $\langle \hat{S}_z \rangle_0 = 0$

$$\begin{aligned} \Rightarrow |\langle \hat{S} \rangle_0|^2 &= \langle \hat{S}_x \rangle^2 + \langle \hat{S}_y \rangle^2 + \langle \hat{S}_z \rangle^2 \\ &= \langle \hat{S}_x \rangle_0^2 [\cos^2 2\omega_L t + \sin^2 2\omega_L t] + \langle \hat{S}_z \rangle_0^2 \\ &= |\langle \hat{S} \rangle_0|^2 = \text{const} \end{aligned}$$

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

Schrodingergl. für die Spinzustände

$$\boxed{\frac{\hbar \omega_L \hat{S}_z}{H} |a(t)\rangle = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} |a(t)\rangle}$$

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

Matrix-Darstellung

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

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

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

$$a_2(t) = a_{20} e^{-i\omega_e t}$$

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

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