4.3 Zustände mit Bahn- & Spin-Freiheitsgraden

- **Bisher**:
  - Zum Einen Quantenzahlen der Bahnbewegung
    $\longrightarrow$ Zustand $|\underline{r}\rangle = |x, y, z\rangle$, oder $|n, l, m\rangle$
  - Zum Anderen Quantenzahlen des Spin $\left(\frac{1}{2}\right)$
    $\longrightarrow$ Zustand $|s = 1/2, m_s = \pm 1/2\rangle \equiv |m_s = \pm 1/2\rangle$
  - Zwei verschiedene Hilbert-Räume, deren Zustände unabhängig voneinander sind

$\longrightarrow$ Hilbert-Raum $\mathcal{H}_B$ der Bahn-Bewegung:

$$|\underline{r}\rangle \in \mathcal{H}_B$$

$\longrightarrow$ Hilbert-Raum $\mathcal{H}_S$ für den Spin:

$$|m_s\rangle \in \mathcal{H}_S$$

- **Jetzt**:
  - Bilde „Produktzustand" aus Bahn- & Spinzustand:

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

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

$$\langle \underline{r}, m_s | \underline{r}', m_s'\rangle = \langle \underline{r} | \underline{r}'\rangle \langle m_s | m_s'\rangle$$
$$= \delta(\underline{r} - \underline{r}')\, \delta_{m_s, m_s'}$$

Orthonormalität

  - **Vollständigkeit**:

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

Eins-Operator im
Bahn- , Spin-
Raum

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

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

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

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

Projiziert nur Spin- nicht Bahnfreiheitsgrade aus $|\psi\rangle$

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

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

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

Damit: $$|\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix}|\psi_+\rangle\\ |\psi_-\rangle\end{pmatrix}$$ „Spinoren"

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

- $|\langle \underline{r}, m_s = \pm\tfrac{1}{2} | \psi\rangle|^2 \, d^3r = |\langle \underline{r} | \psi_{m_s=\pm\frac{1}{2}}\rangle|^2 d^3r$

  $= |\psi_{m_s=\pm\frac{1}{2}}(\underline{r})|^2 d^3r$

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

- <u>Schrödinger-Gleichung im Spin-Bahn-Raum</u>

- Hamilton-Operator für <u>Bahn</u>-Bewegung:

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

wirkt auf Zustände in $\mathcal{H}_B$

- Hamilton-Operator für <u>Spin</u> des Teilchens:

$$\hat{H}_s = \hbar\omega_e \hat{\sigma}_3 \quad , \text{ wirkt auf Zustände in } \mathcal{H}_s$$

- <u>Gesamt</u>-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 $\mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_s$

$\rightarrow$ 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

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

  - $\hat{H}_S \equiv \mathbb{1}_B \otimes \hat{H}_S = \hbar\omega_e \mathbb{1}_B \otimes \hat{\sigma}_3 \doteq \hbar\omega_e \mathbb{1}_B \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

    $= \begin{pmatrix} \hbar\omega_e & 0 \\ 0 & -\hbar\omega_e \end{pmatrix}$

Zusammen:

$$\boxed{\begin{aligned} &i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} |\psi_{m_s=+\frac{1}{2}}(t)\rangle \\ |\psi_{m_s=-\frac{1}{2}}(t)\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_B + \hbar\omega_e & 0 \\ 0 & \hat{H}_B - \hbar\omega_e \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} |\psi_{+\frac{1}{2}}(t)\rangle \\ |\psi_{-\frac{1}{2}}(t)\rangle \end{pmatrix} \\ &\text{bzw. in Komponenten} \quad \text{„Pauli-Gleichung"} \\ &i\hbar\partial_t |\psi_{+\frac{1}{2}}(t)\rangle = (\hat{H}_B + \hbar\omega_e)\,|\psi_{+\frac{1}{2}}(t)\rangle \\ &i\hbar\partial_t |\psi_{-\frac{1}{2}}(t)\rangle = (\hat{H}_B - \hbar\omega_e)\,|\psi_{-\frac{1}{2}}(t)\rangle \end{aligned}}$$

$$|\psi_\pm\rangle \equiv |\psi_{m_s=\pm 1/2}\rangle$$

- <u>Anwendung: einfacher Zeeman-Effekt mit Spin</u>
  - Betrachte ein Elektron im kugelsymmetrischen Potential $V(\underline{r})$ <u>und</u> homogenen Magnetfeld $\underline{B} = B\,\underline{e}_z$:

$$\hat{H} = \left[\frac{(\hat{\underline{p}} - e\hat{\underline{A}})^2}{2m_0} + V(\hat{\underline{r}})\right] \otimes \mathbb{1}_S + \mathbb{1}_B \otimes \hbar\omega_e \hat{\sigma}_3$$

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

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

$$\text{da} \quad \hat{\underline{p}}\cdot\hat{\underline{A}} = \frac{1}{2}\hat{\underline{p}}\cdot(\underline{B}\times\hat{\underline{r}}) = \frac{1}{2}\sum_{n,k,l} \hat{p}_n\, \underset{\substack{\uparrow \\ n\neq l \Rightarrow [\hat{p}_n, \hat{x}_l] = 0}}{\varepsilon_{nkl}}\, B_k\, \hat{x}_l$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{n,k,l} \varepsilon_{nkl}\, B_k\, \hat{x}_l\, \hat{p}_n$$

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

$$\Rightarrow \hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m_0} + V(\hat{\underline{r}})}_{=:\hat{H}_0} - \frac{eB}{2m_0}\left(\hat{L}_3 + \hbar\hat{\sigma}_3\right) + \cancel{\mathcal{O}(\hat{\underline{A}}^2)} \to 0$$

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

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

$\underline{B=0}$: Eigenzustände $|n,l,m\rangle$

Eigenenergien $E_{n,l}$

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

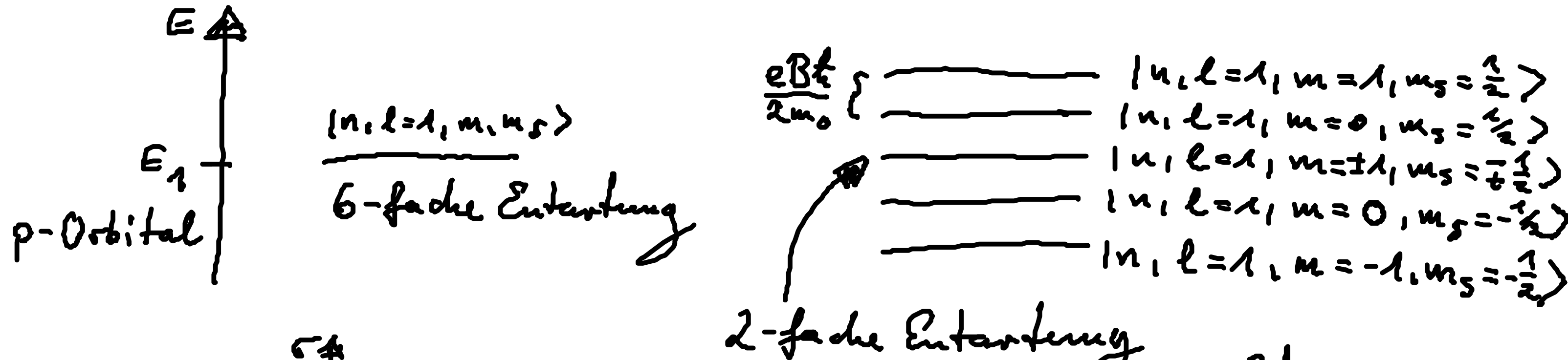
⌜ beim H-Atom zusätzlich $(2l+1)$-fache Entartung ⌟

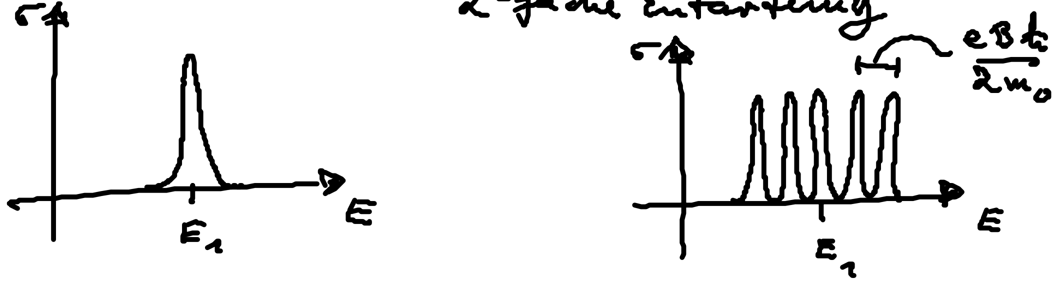
$\underline{B\neq 0}$:
$$\hat{H}|n,l,m,m_s\rangle = \hat{H}_0|n,l,m,m_s\rangle + \dots$$
$$\dots - \frac{eB}{2m_0}\Big(\underbrace{\hat{L}_3|n,l,m,m_s\rangle}_{=\hbar m|n,l,m,m_s\rangle} + \underbrace{\hbar\hat{\sigma}_3|n,l,m,m_s\rangle}_{\hbar 2m_s|n,l,m,m_s\rangle}\Big)$$
$$= \underbrace{\left[E_{n,l}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

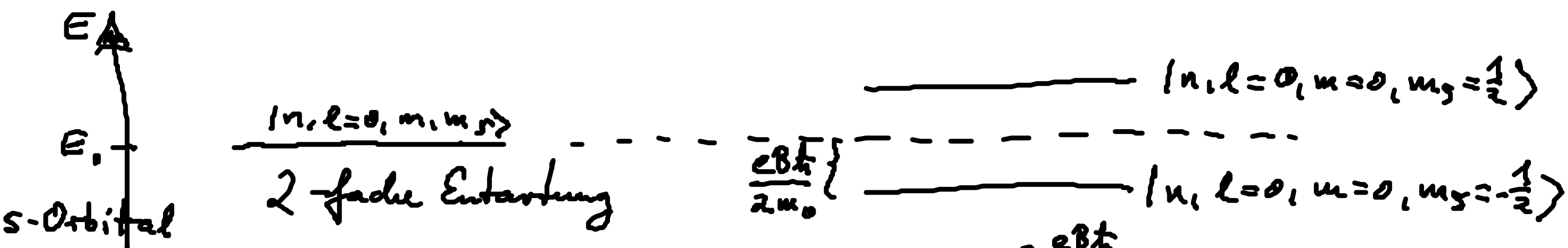
$\rightarrow$ teilweise Aufhebung der Entartung

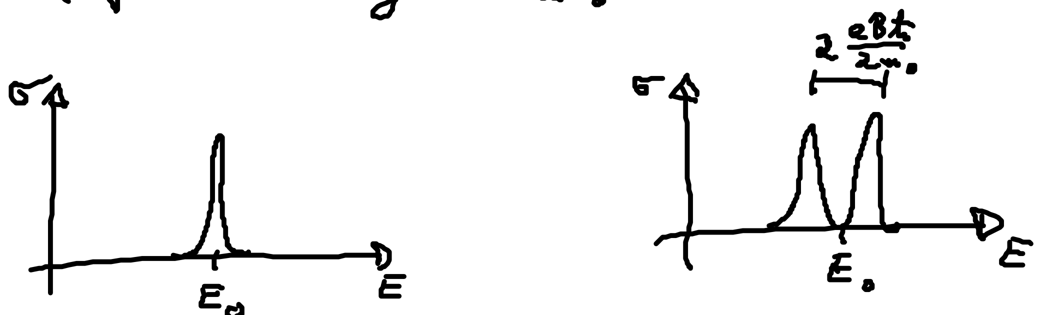
Bsp.:

$\underline{B=0}$ $\qquad\qquad\qquad\qquad$ $\underline{B\neq 0}$









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

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...	$-e_0$
Proton	1/2	5,59	e_0
Neutron	1/2	-3,83	0
Neutrino	1/2	0	0
Photon	1	0	0

← Korrektur zu $g=2$ durch QED

Infos zur Klausur

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