23.11.2007

23.11.07

$$\underline{J} = \underline{J}_1 + \underline{J}_2$$

$$|jm\rangle = \sum_{m_1 m_2} \underbrace{\langle m_1 m_2 | jm \rangle}_{\text{CG-Koeffizienten}} \underbrace{|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle}_{\equiv |m_1 m_2\rangle}$$

Fall: $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$

Zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen

Hilbertraum $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$

Basis: $|\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \equiv |\uparrow\uparrow\rangle$

$|\uparrow\downarrow\rangle$

$|\downarrow\uparrow\rangle$ 4 Basiszustände

$|\downarrow\downarrow\rangle$

Übergang zu einer Basis aus Eigenzuständen von $S^2 \equiv J^2$ und $S_z \equiv J_z$

$$\underline{S} = \underline{S}_1 + \underline{S}_2$$

Basiszustände $|j\,m\rangle \equiv |S, S_z\rangle$

$$|S\rangle \equiv |S=0, S_z=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

Singlett

$$\left(|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2\right)$$

$$\left.\begin{array}{l} |T_1\rangle \equiv |S=1, S_z=1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |T_0\rangle \equiv |S=1\ S_z=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) \\ |T_{-1}\rangle \equiv |S=1, S_z=-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{array}\right\} \text{Triplets}$$

$$S^2|S\rangle = 0$$

$$S^2 |T_i\rangle = S(S+1)|T_i\rangle$$
$$= 1\cdot(1+1)\,|T_i\rangle$$

$i = 1, 0, -1$

Ausgangs-Basis	Gesamtspin-EZ	Bell-Basis
$\lvert\uparrow\uparrow\rangle$	$\lvert S\rangle$	$\lvert S\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$
$\lvert\uparrow\downarrow\rangle$	$\lvert T_1\rangle$	$\phi_+ \; \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\uparrow + \downarrow\downarrow)$
$\lvert\downarrow\uparrow\rangle$	$\lvert T_0\rangle$	$\lvert T_0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow)$
$\lvert\downarrow\downarrow\rangle$	$\lvert T_{-1}\rangle$	$\phi_- \; \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\uparrow - \downarrow\downarrow)$

- $$|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2$$

verschränkt

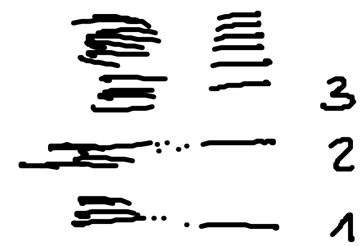
3.8. Spin-Bahn-Kopplung und Feinstruktur des Wasserstoff-Atoms

[Greiner
Nolting
Scherz

Straumann
Landau
Merzbacher

Baym
Schiff
Sakurai]

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$



$\propto \frac{1}{n^2}$

Relativistische Korrekturen aus der Dirac-Gleichung.

Treten als Zusatzterm $\hat{\mathcal{H}}_1$ zu $\hat{\mathcal{H}}_0$ auf

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = \hat{H}_{KE} + \hat{\mathcal{H}}_{Darwin} + \hat{\mathcal{H}}_{SO}$$

1) $E = \sqrt{p^2 + m^2} =$ $\qquad c = \hbar = 1$

$$= m\sqrt{1 + \left(\frac{p}{m}\right)^2} \qquad m \qquad \frac{1}{m^4}$$

$$= m\left\{1c^2 + \frac{1}{2}\frac{p^2}{m^2}\right\} - \frac{1}{2mc^2}\frac{p^4}{4m^2} + \dots$$

2) Darwin-Term

Aus der Dirac-Gleichung

$$\mathcal{H}_{Darwin} = \frac{-e\hbar^2}{8m^2c^2}\underbrace{\Delta\phi(r)}$$

$$\phi(r) = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r} \; ; \qquad \Delta\frac{1}{|\underline{r}|} = -4\pi\,\delta(\underline{r}) \; .$$

3) Spin-Bahn-Wechselwirkung

Aus der Dirac-Gleichung

$$\hat{H}_{SO} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \underline{\sigma} \left(\underline{E}(\underline{r}) \times \underline{p} \right)$$

$$\underline{E}(\underline{r}) = -\underline{\nabla} \phi(r)$$

$\underline{p} = m\underline{v}$

$$\underline{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \; ; \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Elektron im $\underline{E}$-Feld des Kerns, sieht ein Magnetfeld

$$\underline{B} = -\frac{\underline{v} \times \underline{E}}{c^2} \, .$$

Elektron hat magnetisches Moment

$$\underline{\mu} = -\frac{e}{m}\underline{S}, \quad \underline{S} = \frac{1}{2}\hbar\underline{\sigma} \, .$$

$$-\underline{v} \times \underline{E} = \underline{v} \times \nabla \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r} = \underline{v} \times \frac{\underline{r}}{r} \frac{d}{dr} \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r} =$$

$$\left[\underline{L} = \underline{r} \times (\underline{v} \cdot m) \right] \quad = \frac{1}{m} \underline{L} \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r^3}$$

$\underline{L}$: Bahndrehimpuls

$$H_{SO} = -\underline{\mu}\,\underline{B} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2m^2c^2}\frac{\hat{\underline{S}}\cdot\hat{\underline{L}}}{r^3}$$

Faktor 2

hier ohne Herleitung.

Gesamtdrehimpuls $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$

ohne rel. Korrekturen: E_n, $|n l s m_e m_s\rangle$ mit $s = \frac{1}{2}$, $m_s = \sigma$

Übergang zu neuer Basis $|n l s j m\rangle$

$$j = l+s,\ l+s-1,\ \dots,\ |l-s|$$

$$m = m_l + m_s$$

Hier $s = \frac{1}{2}$, deshalb $j = l+\frac{1}{2},\ l-\frac{1}{2}$ für $l \geq 1$

$j = \frac{1}{2}$ für $l = 0$

Schreibe $\hat{\underline{S}}\cdot\hat{\underline{L}} = \frac{1}{2}\left(\underline{J}^2 - \underline{L}^2 - \underline{S}^2\right)$

$\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$

$$\langle n l s j m | \hat{\underline{S}}\hat{\underline{L}} | n l s j m\rangle = \frac{1}{2}\hbar^2\left\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right\}$$

Fall $j = l + \frac{1}{2}$:

$$\langle nlsjm | \hat{H}_{SO} | nlsjm \rangle = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{2m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \cdot \frac{1}{2}\hbar^2 \cdot l$$

Bahnanteile der Wellenfunktion

Fall $j = l - \frac{1}{2}$

$$= \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{2m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \cdot \frac{1}{2}\hbar^2 \cdot (-1)(l+1)$$

Benötigen $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{Z^3}{a_0^3} \frac{2}{n^3 l(l+1)(2l+1)}$, $l \neq 0$

$$\Rightarrow \quad E'_{SO} = \frac{Z^4 e^2 \hbar^2}{2m^2c^2a_0^3 4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{n^3 l(l+1)(2l+1)} \begin{cases} l & ; \; j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & ; \; j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

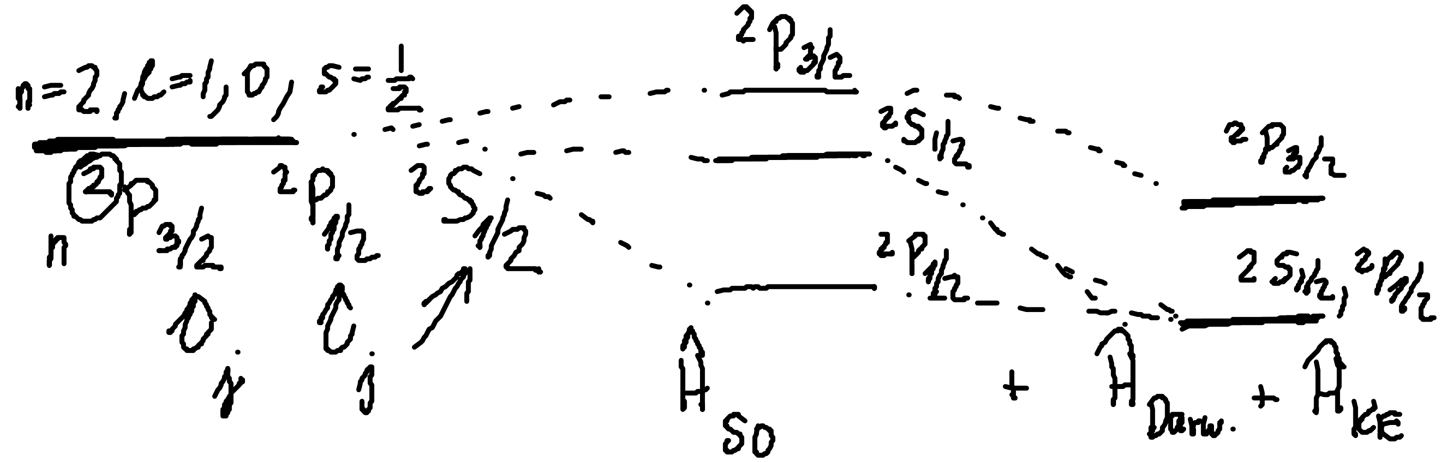
Alles zusammenfassen

$$E_{nlsjm} = E_n^{(0)} + \frac{\left[E_n^{(0)}\right]^2}{2mc^2} \left[3 - \frac{4n}{j + \frac{1}{2}} \right] .$$

$j = l \pm \frac{1}{2}$ $\qquad$ $l \neq 0$

Gasiorowicz falsch!

http://hep.ucsd.edu/branson



Bemerkung

Spin-Bahn-WW auch in Festkörpern:

$$H_{SO} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \underline{\sigma} \left(\underline{E}(\underline{r}) \times \underline{p} \right)$$

interne Elektrische Felder

z.B. in 2 dim. Elektronengasen (2DEG).

$\Rightarrow$ Rashba-Parameter α

$$H_{SO} = -\frac{\alpha}{\hbar} \left[\underline{p} \times \underline{\sigma} \right]_z .$$