

7. Quantenmechanik des Drehimpulses

Motivation:

(i) Bahndrehimpuls \rightarrow Zentralfeld \rightarrow H-Atom \rightarrow Atomspektren, Orbitale.

Bei Bewegung im Zentralfeld spielt die Drehimpulserhaltung eine zentrale Rolle.

(ii) Rotierende Ladungsverteilungen erzeugen ein magnetisches Moment. Dieses wechselwirkt mit einem äußeren Magnetfeld, die Energie im $\underline{\mathbf{B}}$ -Feld ist $U(\underline{\mathbf{r}}) = -\underline{\boldsymbol{\mu}} \cdot \underline{\mathbf{B}}(\underline{\mathbf{r}})$.

klassische Mechanik: $\underline{\mathbf{L}} = \underline{\mathbf{r}} \times \underline{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}$, oder $L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k$

mit Summenkonvention und $i, j, k = 1, 2, 3$ ($= x, y, z$).

Quantenmechanik: Das Bohr'sche Korrespondenzprinzip führt auf $\underline{\mathbf{L}} \rightarrow \hat{\underline{\mathbf{L}}} = \hat{\underline{\mathbf{r}}} \times \hat{\underline{\mathbf{p}}}$ mit den kartesischen Komponenten

$$\hat{\underline{\mathbf{L}}} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix}, \quad \text{z.B. } \hat{L}_z = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x, \quad \text{kompakt } \hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k, \quad (7.1a)$$

und dem Betrag des Bahndrehimpulses $\hat{\underline{\mathbf{L}}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$. (7.1b)

Wir erwarten, dass die Drehimpulserhaltung auch in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle bei der Bewegung in zentralsymmetrischen Feldern $U(r)$ spielt, etwa im Sinne von $\Psi(\underline{\mathbf{r}}) = \psi(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi)$.

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

$$\underline{[\hat{L}_i, \hat{L}_j]} = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad \text{und} \quad \underline{[\hat{\underline{\mathbf{L}}}^2, \hat{L}_i]} = 0, \quad (7.2)$$

vgl. Übungsblatt, nutze $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{imn} = \delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}$ (Summenkonvention).

Beweis (z.B.):

$$\begin{aligned}
 [\hat{L}_3, \hat{L}^2] &= [\hat{L}_3, \hat{L}_1^2] + [\hat{L}_3, \hat{L}_2^2] + \overbrace{[\hat{L}_3, \hat{L}_3^2]}^0 = \hat{L}_3 \hat{L}_1 \hat{L}_1 - \hat{L}_1 \hat{L}_1 \hat{L}_3 + (1 \leftrightarrow 2) = \\
 &= \hat{L}_3 \hat{L}_1 \hat{L}_1 - \underbrace{\hat{L}_1 \hat{L}_3 \hat{L}_1 + \hat{L}_1 \hat{L}_3 \hat{L}_1}_0 - \hat{L}_1 \hat{L}_1 \hat{L}_3 + (1 \leftrightarrow 2) = [\hat{L}_3, \hat{L}_1] \hat{L}_1 + \hat{L}_1 [\hat{L}_3, \hat{L}_1] + (1 \leftrightarrow 2) = \\
 &= [\hat{L}_3, \hat{L}_1] \hat{L}_1 + \hat{L}_1 [\hat{L}_3, \hat{L}_1] + [\hat{L}_3, \hat{L}_2] \hat{L}_2 + \hat{L}_2 [\hat{L}_3, \hat{L}_2] = i\hbar (\hat{L}_2 \hat{L}_1 + \hat{L}_1 \hat{L}_2 - \hat{L}_1 \hat{L}_2 - \hat{L}_2 \hat{L}_1) = 0.
 \end{aligned}$$

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

Welche Messwerte sind für \underline{L}^2 und (z.B.) L_z zu erwarten? Um diese Frage beantworten zu können, müssen wir die Eigenwerte der zugeordneten Operatoren bestimmen.

Die Eigenwertgleichungen schreiben wir in der Form

$$\underline{L}^2 |\ell m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1) |\ell m\rangle \quad \text{und} \quad \hat{L}_z |\ell m\rangle = \hbar m |\ell m\rangle \quad (\text{A})$$

mit den gemeinsamen Eigenfunktionen $|\ell m\rangle$ (vertauschbare Operatoren).

Die unbekannt Größen ℓ und m sind reelle Zahlen, denn \hat{L}_z , \hat{L}_x und \hat{L}_y sind hermitesch, da die Operatoren $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ es sind und den kanonischen Vertauschungsrelationen

$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ genügen. Damit ist auch $\underline{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ hermitesch und besitzt reelle Eigenwerte.

Der Ansatz (A) ist keine Beschränkung der Allgemeinheit. Wir könnten die Eigenwertgleichungen auch in der Form $\underline{L}^2 |\lambda m\rangle = \lambda |\lambda m\rangle$ und $\hat{L}_z |\lambda m\rangle = m |\lambda m\rangle$ schreiben. Die Abtrennung der Faktoren \hbar^2 bzw. \hbar ist aus Dimensionsgründen vernünftig, denn dann sind ℓ und m dimensionslos.

7.1 Der verallgemeinerte Drehimpuls $\hat{\underline{J}}$ und die Drehimpulsalgebra

Um (7.2) zu verallgemeinern, definieren wir

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

$$\underline{\hat{J}}_i, \hat{J}_j = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k \quad \rightarrow \quad \text{Drehimpulsalgebra} \quad (7.3)$$

genügen, heißt **Drehimpulsoperator**. Diese Verallgemeinerung erweist sich im Folgenden als überaus sinnvoll.

Aus $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k$ folgt $[\hat{\underline{J}}^2, J_i] = 0$, Beweis wie $[\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_i] = 0$.

- **Algebraische Lösung des Eigenwertproblems für Drehimpulsoperatoren**

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

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

erfüllt sind, wobei die Komponenten \hat{J}_i der Drehimpulsalgebra genügen.

Zur Bestimmung der Werte von j und m halten wir fest:

(i) Da $0 < \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 = \hat{\underline{J}}^2 - \hat{J}_z^2$ ein positiver Operator ist, folgen nach Projektion auf die $|jm\rangle$ von $\hat{\underline{J}}^2$ und \hat{J}_z die Relation $\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 \geq 0$. Daraus ergeben sich für m die Schranken

$$-\sqrt{j(j+1)} \leq m \leq \sqrt{j(j+1)}. \quad (7.4)$$

(ii) Wir definieren die Operatoren

$$\underline{\text{Def:}} \quad \hat{J}_+ := \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad \hat{J}_- := \hat{J}_x - i\hat{J}_y, \quad \rightarrow \quad \text{Leiteroperatoren} \quad (7.5)$$

\hat{J}_+ und \hat{J}_- sind nicht selbstadjungiert, $(\hat{J}_+)^+ = \hat{J}_-$, $(\hat{J}_-)^+ = \hat{J}_+$. Sie erfüllen die Vertauschungsrelationen (prüfen!)

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm, \quad [\hat{J}_\pm^2, \hat{J}_\pm] = 0. \quad (7.6)$$

$$(iii) \quad \hat{J}_z(\hat{J}_\pm|jm\rangle) = \hat{J}_z\hat{J}_\pm|jm\rangle \stackrel{(7.6)}{=} (\pm\hbar\hat{J}_\pm + \underbrace{\hat{J}_\pm\hat{J}_z}_{m\hbar|jm\rangle})|jm\rangle = (m \pm 1)\hbar\hat{J}_\pm|jm\rangle \quad (7.7)$$

Ist $|jm\rangle$ Eigenfunktion der kommutierenden Operatoren \hat{J}^2 und \hat{J}_z zu den Eigenwerten $\hbar^2 j(j+1)$ bzw. $\hbar m$, dann sind auch $\hat{J}_\pm|jm\rangle$ Eigenfunktionen dieser Operatoren, allerdings zu den Eigenwerten $\hbar^2 j(j+1)$ 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} und ein m_{\min} mit

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

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

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{J}_-\hat{J}_+|jm_{\max}\rangle = (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y)|jm_{\max}\rangle = \left[J_x^2 + J_y^2 + i(\underbrace{\hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y\hat{J}_x}_{i\hbar\hat{J}_z}) \right] |jm_{\max}\rangle = \\ &= (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z)|jm_{\max}\rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m_{\max}^2 - m_{\max}] |jm_{\max}\rangle. \end{aligned}$$

Daraus folgt $m_{\max} = j$. 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. Also ist j ganz- oder halbzahlig

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (7.8)$$

und m nimmt die Werte

$$m = -j, -j+1, \dots, 0, \dots, j-1, j \quad (7.9)$$

an.

Fazit: Drehimpulsoperatoren besitzen diskrete Eigenwerte. Die Beträge der Drehimpulse sind

$\hbar\sqrt{j(j+1)}$ mit $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$, ihre Komponenten ganzzahlige Vielfache von $\hbar/2$ mit $m = 0, \pm 1/2, \pm 1, \dots, \pm(j-1), \pm j$.

Jeder Zustand mit gegebenem J^2 ist genau $(2j+1)$ -fach entartet \rightarrow Richtungsentartung.

In der "alten" Bohr-Sommerfeld'schen Quantenmechanik musste die aus klassischer Sicht verblüffende Richtungsquantelung zusätzlich postuliert werden.

Halbklassisches Vektormodell mit "raumfestem" Vektor als Hilfskonstruktion: Anschaulich

"präzediert $\hat{\underline{J}}$ 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. Der auf der Spitze stehende

Kegel (Symmetrieachse ist die z-Achse) ist $\hbar m$ hoch, seine Mantellinie ist $\hbar\sqrt{j(j+1)}$ lang

und der Kegelradius ergibt sich zu $\hbar\sqrt{j(j+1) - m^2}$.

- **Matrixdarstellung der verallgemeinerten Drehimpulsoperatoren**

Die gesuchten Matrixelemente der Operatoren sind

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

$$\langle jm' | \hat{J}_z | jm \rangle = \hbar m \delta_{m'm}.$$

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

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

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

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

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

also $C_+^2 = \langle jm | \hat{J}_-^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z | jm \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m^2 - m]$

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

Ausgehend von $\langle jm | \hat{J}_+ \hat{J}_- | jm \rangle$ finden wir analog $C_- = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$.

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

und daraus folgt die Behauptung.

Wie oben in (iv) verwendet ergibt sich für

$$m = m_{\max} = j \rightarrow \hat{J}_+ |jm\rangle = 0, \text{ denn } \hat{J}_+ |jj\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - j(j+1)} |j, j+1\rangle = 0,$$

und auch für

$$m = m_{\min} = -j \rightarrow \hat{J}_- |jm\rangle = 0, \text{ da } \hat{J}_- |j, -j\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) + j(-j-1)} |j, j-1\rangle = 0.$$

Aus $\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)$ und $\hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$ ergeben sich schließlich die Matrixelemente für

die x- und die y- Komponente des Drehimpulsoperators (\rightarrow Übung)

- Wichtiges Beispiel: $j = \frac{1}{2} \rightarrow$ **Pauli'sche Spin-Matrizen**

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

\hat{J}_x, \hat{J}_y und \hat{J}_z hängen mit den **Pauli'schen Spinmatrizen** $\underline{\sigma}$ zusammen (vgl. Kap. 7.3)

$$\underline{\text{Def.:}} \quad \underline{s := \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}, \quad \sigma_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},} \quad (7.10)$$

In der Basis $\left\{ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$ sind \hat{J}^2 und \hat{J}_z diagonal. Wir haben ($j = \frac{1}{2}$)

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

Außerdem finden wir $\underline{\hat{J}_+} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

denn von den vier möglichen Matrixelementen

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

ist wegen $\delta_{m', m+1}$ nur

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

verschieden von Null. Analog finden wir $\underline{\hat{J}_-} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

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

7.2 Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses \underline{L}

Der Übergang in die Ortsdarstellung erfolgt durch Projektion der darstellungsunabhängigen Eigenwertgleichungen $\hat{\underline{L}}^2 |\ell m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\ell m\rangle$ und $\hat{L}_z |\ell m\rangle = \hbar m |\ell m\rangle$ auf das VONS $\{|\underline{r}\rangle\}$ des Ortsoperators unter Verwendung von $\langle \underline{r} | \ell m \rangle := \psi_{\ell m}(\underline{r})$.

Da die Eigenwerte darstellungsunabhängig sind, folgen

$$\hat{\underline{L}}^2 \psi_{\ell m}(\underline{r}) = \hbar^2 \ell(\ell+1) \psi_{\ell m}(\underline{r}) \quad \text{und} \quad \hat{L}_z \psi_{\ell m}(\underline{r}) = \hbar m \psi_{\ell m}(\underline{r}).$$

- Ortsdarstellung der Operatoren $\hat{\underline{L}}^2$ und \hat{L}_z

Diese verschaffen wir uns am einfachsten über die Bohr'sche Korrespondenzregel

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

Nützlich ist, insbesondere im Hinblick auf die Behandlung der Bewegung im Zentralfeld im folgenden Kapitel, vor allem die Ortsdarstellung von $\hat{\underline{L}}$ in Kugelkoordinaten r, ϑ, φ gemäß $x = r \sin \vartheta \cos \varphi$, $y = r \sin \vartheta \sin \varphi$, $z = r \cos \vartheta$ (also mit z-Achse als „Drehachse“). Unter Verwendung von (MMP)

$$\underline{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \\ \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \underline{e}_r = \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}, \quad \underline{e}_\vartheta = \begin{pmatrix} \cos \vartheta \cos \varphi \\ \cos \vartheta \sin \varphi \\ -\sin \vartheta \end{pmatrix}, \quad \underline{e}_\varphi = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$

folgt

$$\hat{\underline{L}} = -i\hbar \underline{r} (\underline{e}_r \times \underline{\nabla}) = -i\hbar \underline{r} \left(\underline{e}_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \underline{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = -i\hbar \left\{ \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \begin{pmatrix} \text{ctg} \vartheta \cos \varphi \\ \text{ctg} \vartheta \sin \varphi \\ -1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\} \quad (7.10)$$

denn $\underline{\nabla} = \underline{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \underline{e}_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \underline{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ und $\underline{e}_r \times \underline{e}_r = 0$, $\underline{e}_r \times \underline{e}_\vartheta = \underline{e}_\varphi$, $\underline{e}_r \times \underline{e}_\varphi = -\underline{e}_\vartheta$.

Daran anknüpfend finden wir (prüfen!)

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \dots = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (7.10a)$$

und schließlich

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z \underbrace{\dots}_{\text{Übung}} = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \vartheta} \left[\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (7.11)$$

Wie zu erwarten hängt \hat{L} bei Verwendung von Kugelkoordinaten nur von den beiden Winkeln ϑ und φ ab. Insbesondere gelten die beiden sehr nützlichen Relationen für die z-Komponente des Drehimpulsoperators und den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \text{und} \quad \underline{\nabla}^2 = \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{r^2 \hbar^2}. \quad (7.12)$$

Bem.: $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ folgt sofort aus

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} = \underbrace{r \sin \vartheta (-\sin \varphi)}_y \frac{\partial}{\partial x} + \underbrace{r \sin \vartheta \cos \varphi}_x \frac{\partial}{\partial y} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}.$$

- **Ortsdarstellung der Eigenfunktionen von \hat{L}^2 und \hat{L}_z**

Aus der darstellungsunabhängigen Eigenwertgleichung $\hat{L}_z |\ell m\rangle = \hbar m |\ell m\rangle$ wird in

Kugelkoordinaten $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$. Über Trennung der Variablen finden wir

$$\underline{Y}_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = e^{im\varphi} \Theta(\vartheta). \quad (7.13)$$

Da nur eindeutige Wellenfunktionen physikalisch sinnvoll sind, müssen wir

$Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi + 2\pi)$ fordern. Daraus ergibt sich $e^{im2\pi} = 1$, d.h., m und (wegen $-\ell \leq m \leq \ell$) auch ℓ müssen ganzzahlig sein.

FAZIT:

(i) **Bahndrehimpulse** ($\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{r}} \times \hat{\underline{p}}$) werden durch **ganzzahlige** Quantenzahlen ℓ und m charakterisiert

$$\underline{\ell} = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad \underline{m} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell \quad . \quad (7.14)$$

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

Der ϑ -Anteil der Wellenfunktion $Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = e^{im\varphi} \Theta_{\ell m}(\vartheta)$ hängt von beiden Quantenzahlen ℓ und m ab. Wir bestimmen ihn rekursiv mit Hilfe der Leiteroperatoren (wie im Fall des harmonischen Oszillators):

$$\hat{L}_+ |\ell \ell\rangle = 0 \xrightarrow{\text{Ortsdarstellung}} \left(+ \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{i\ell\varphi} \Theta_{\ell \ell}(\vartheta) = 0, \text{ also } \left(\frac{d}{d\vartheta} - \ell \operatorname{ctg} \vartheta \right) \Theta_{\ell \ell}(\vartheta) = 0 \text{ mit}$$

der Lösung $\Theta_{\ell \ell}(\vartheta) = C_\ell \sin^\ell \vartheta$ und $C_\ell = \text{const.}$

Durch Anwendung von \hat{L}_- auf $\Theta_{\ell \ell}(\vartheta)$ bestimmen wir $\Theta_{\ell, \ell-1}(\vartheta)$ usw.

Nach einiger Rechnung erhalten wir für die Eigenfunktionen $Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$ den Ausdruck

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

Eine häufig verwendete, äquivalente Darstellung ist

$$Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad \rightarrow \quad \underline{\text{Kugelflächenfunktionen}} \quad (7.15)$$

Sie basiert auf den sogenannten zugeordneten Legendre-Polynomen

$$P_\ell^m(x) := \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^\ell. \quad (7.16)$$

Die Kugelflächenfunktionen sind entsprechend

$$\int d\Omega Y_{\ell m}^*(\vartheta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'} \quad (7.17)$$

orthonormiert; dabei bedeutet $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ das Raumwinkelement.

7.3 Spin

Motivation: Wasserstoffatom im äußeren B-Feld

- Aus der Elektrodynamik wissen wir, dass eine rotierende Ladungsverteilung ein magnetisches Moment erzeugt.

Kreist z.B. eine Ladung q mit Geschwindigkeit $v = |\underline{v}| = \text{const}$ auf einer Kreisbahn vom Radius r , dann ergibt sich mit Strom I gleich Ladung pro Zeit, $I = \frac{q}{t} = \frac{qv}{2\pi r}$, ein magnetisches

Moment $\underline{\mu} = I \cdot A = \frac{qv}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{q}{2} v r$. Mit $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$, also $L = m r v$, folgt (stets ist $\underline{\mu} \parallel \underline{L}$)

$$\underline{\mu} = \frac{q}{2m} \underline{L}. \quad (7.18)$$

Der Quotient $\frac{q}{2m}$ heißt gyromagnetisches Verhältnis. Über das magnetische Moment tritt die rotierende Ladung in Wechselwirkung mit Magnetfeldern. Die Energie des magnetischen Moments $\underline{\mu}$ im äußeren B-Feld ist

$$V = -\underline{\mu} \cdot \underline{B}. \quad (7.19)$$

Für ein Elektron ($m = m_e$, $q = e$) im H-Atom tritt in der Hamilton-Funktion H_0 in Gegenwart eines Magnetfelds mit $\underline{B} \parallel \underline{e}_z$ folglich der Zusatzterm $V = -\frac{e}{2m_e} B L_z$ auf. Nach dem Korrespondenzprinzip wird aus dem Hamiltonoperator \hat{H}_0 des freien Wasserstoffatoms der Operator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \hat{H}_0 - \frac{e}{2m_e} B \hat{L}_z$. Nach (7.12) sind ∇^2 (also \hat{H}_0) und \hat{L}^2 vertauschbar; \hat{L}^2 und \hat{L}_z kommutieren sowieso. Folglich haben \hat{H} und \hat{H}_0 gemeinsame Eigenfunktionen $|n\ell m\rangle$, $\hat{H}|n\ell m\rangle = E_0^{(B \neq 0)}|n\ell m\rangle$. Der Zusatzterm \hat{V} ändert die Eigenfunktionen nicht, verschiebt aber die Energieniveaus von \hat{H}_0 entsprechend

$$\underline{E_n^{(B \neq 0)}} = \underline{E_n^{(B=0)} - \mu_B m B} \quad \text{mit} \quad \underline{\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 0,579 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{T}}} \rightarrow \text{Bohr'sches Magneton} \quad (7.20)$$

FAZIT:

Jedes Energieniveau E_n des H-Atoms spaltet im Magnetfeld in $2\ell + 1$ äquidistante Unterniveaus auf. Das äußere Magnetfeld hebt also die Entartung bzgl. m auf. Wegen der Aufhebung der Entartung/Aufspaltung der Energieniveaus im \underline{B} -Feld wird m **Magnetquantenzahl** genannt.

Experimentell bestätigt sich die Vorhersage (7.20) in Form des (normalen) **Zeeman-Effekts**.

Interessanterweise wird aber zusätzlich beim H-Atom eine magnetfeldbedingte Aufspaltung der Energieniveaus und folglich der Spektrallinien in eine gerade Anzahl von Unterniveaus beobachtet. Beispielsweise spaltet der Grundzustand $|100\rangle$ ($1s$ – Zustand) des H-Atoms trotz $\ell = 0$ in zwei Unterniveaus auf.

Um diesen Befund zu erklären, schlug Wolfgang Pauli 1924 einen neuen quantenmechanischen Freiheitsgrad vor, der für das Elektron zwei Werte annehmen sollte. Neben dem Bahndrehimpuls sollte es in der Quantenmechanik halbzahlige "Drehimpulse", den sogenannten Spin geben. Diese Hypothese passt zu unseren Ergebnissen aus Kap. 7.1 über verallgemeinerte Drehimpulsoperatoren $\hat{\underline{J}}$. 1925 postulieren Samuel Abraham Goudsmit und George Eugene Uhlenbeck den Elektronenspin zur Erklärung der Linienaufspaltung in

wasserstoffartigen Atomen (Alkalimetalle, z.B. Natrium-D-Linie) und beim anomalen Zeeman-Effekt.

Weitere Experimentelle Befunde zur Existenz des Spins:

(i): Stern-Gerlach Versuch: Ag-Atome durchlaufen inhomogenes \underline{B} -Feld. Obwohl der 5s Zustand ("Leuchtelektron") mit $\ell = 0$ die Eigenschaften dominiert, wird eine Aufspaltung in zwei Strahlen beobachtet.

(ii): Ferromagnetismus

Einstein-de Haas-Experiment: Drehmomentenstoß auf ferromagnetische Probe bei Umkehr der Richtung des Magnetfeldes.

(iii): Spin-Bahn-Wechselwirkung, mit verantwortlich für die Feinstruktur der Spektren (vgl. Berechnung der Feinstruktur des H-Atoms in ThPh V, QM II, MSc).

(iv): Die Wechselwirkung zwischen Elektronenspin und Kernspin ist verantwortlich für die Hyperfeinstruktur der Atomspektren. Im H-Atom verursacht die Wechselwirkung zwischen Proton (Spin $\frac{1}{2}$) und Elektron (Spin $\frac{1}{2}$) die Aufspaltung des 1s Zustandes. Der Zustand mit parallel zueinander ausgerichteten Spins hat eine geringfügig höhere Energie als derjenige mit antiparallel orientiertem Elektronen- und Protonen-Spin. Der Energieunterschied zwischen beiden Zuständen beträgt etwa $5.9 \cdot 10^{-6}$ eV, ist also extrem klein im Vergleich zur Grundzustandsenergie des H-Atoms von -13.6 eV. Beim Übergang zwischen beiden Zuständen wird Licht der Wellenlänge 21 cm (1420 MHz) abgegeben. Die Entdeckung der 21 cm-Wasserstofflinie war die Geburt der Spektrallinien-Radioastronomie zum Nachweis von atomarem Wasserstoff im Kosmos.

(v): Spin-Statistik-Theorem. Quantenstatistik \rightarrow Bose- und Fermi-Gase.

Dirac verdanken wir die Einsicht, dass der Spin ein relativistischer Effekt ist: In einer relativistisch invarianten Bewegungsgleichung des Elektrons \rightarrow **Dirac-Gleichung** (vgl. ThPh V, QM II) besitzt das Elektron e^- neben seiner Masse m_e und seiner Ladung $-e$ eine weitere intrinsische Eigenschaft "mit Drehimpulscharakter", den Spin $s = \frac{1}{2}$.

Wir müssen deshalb die fünf Postulate der Quantenmechanik ergänzen:

6. Postulat: In der Quantenmechanik können Teilchen einen intrinsischen Drehimpuls, den Spin besitzen. Der Spin wird durch einen Vektoroperator $\underline{\hat{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)^T$ beschrieben. $\underline{\hat{S}}$ genügt der Drehimpulsalgebra

$$\underline{[\hat{S}_i, \hat{S}_j]} = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{S}_k \quad (7.21)$$

Eigenwerte von $\underline{\hat{S}}^2$: $s(s+1)\hbar^2$, $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots, s$,

Eigenwerte von \hat{S}_z : $m_s\hbar$, $m_s = 0, \pm\frac{1}{2}, \pm 1, \dots, \pm s$.

Der Spin-Operator $\underline{\hat{S}}$ wirkt im Spin-Zustandsraum:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\text{Ort}} \otimes \mathbf{H}_{\text{Spin}} \quad \text{d.h.} \quad |\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} |\psi_s\rangle \\ \vdots \\ |\psi_{-s}\rangle \end{pmatrix}$$

\mathbf{H} -Raum der Teilchenzustände Orts-Zustandsraum Spinzustandsraum, aufgespannt von $2s+1$ gemeinsamen Eigenzuständen von $\underline{\hat{S}}^2$ und \hat{S}_z

■ Beispiel: Elektron, $s = \frac{1}{2}$ ($j = \frac{1}{2}$)

Der Spin ist eine intrinsische, d.h. untrennbar mit dem Elektron verbundene unveränderliche Eigenschaft. Das bedeutet, es existiert genauso wenig ein Elektron ohne Spin $s = \frac{1}{2}$, wie es kein Elektron ohne Ladung $-e$ und kein Elektron ohne Ruhemasse m_e gibt.

Der Wert $s = \frac{1}{2}$ (und damit $\sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{3/2}\hbar$) liegt fest; ändern kann sich lediglich die Richtung des Spins entsprechend der beiden möglichen Werte für $s_z = \pm s\hbar = \pm \hbar/2$. Diese beiden Orientierungen werden mit "spin up", \uparrow , bzw. "spin down", \downarrow , bezeichnet. Der Spin kann zwischen \uparrow und \downarrow flippen \rightarrow Flip-Dynamik.

Die halbklassische Veranschaulichung spricht von einem "Spin-Vektor" der Länge $\sqrt{3}/2 \hbar$ mit zwei möglichen Werten $\pm \hbar/2$ für die z-Komponente. Dieser "Spin-Vektor" ist um $\vartheta = \arccos(1/\sqrt{3}) = 55^\circ$ gegen die z-Achse geneigt.

In der Ortsdarstellung lassen sich die Produktwellenfunktion in der Form

$$\psi(\underline{r}, t) = \phi_{\uparrow}(\underline{r}, t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \phi_{\downarrow}(\underline{r}, t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (7.22)$$

schreiben.

FAZIT:

- (i) Spin- $1/2$ -Teilchen besitzen einen intrinsischen Drehimpuls von $\sqrt{3}/2 \hbar$ mit genau zwei Orientierungen bzgl. äußerer Magnetfelder.
- (ii) Deshalb spaltet (z.B.) der Grundzustand im H-Atom (s-Zustand) trotz $\ell = 0$ magnetfeldbedingt in $2s + 1 = 2$ Unterniveaus auf.
- (iii) $\langle \hat{S}^2 \rangle = \hbar^2 s(s+1) \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} 0$, d.h. es gibt kein klassisches Analogon zum Spin. Dagegen kann der Bahndrehimpuls $\langle \hat{L}^2 \rangle$ den "klassischen Limes" $\hbar \rightarrow 0$ für $\ell \rightarrow \infty$ "überleben" ...
- (iv) Mit Hilfe der Pauli'schen Spinmatrizen lässt sich der Spin des e^- ohne die Ortsdynamik behandeln, bzw. von der Ortsdynamik entkoppeln.
- (v) Die gemeinsamen Eigenzustände von \hat{S}^2 und \hat{S}_z bilden keinen Vektor, sondern eine Objekt im Spin-Zustandsraum, ein sogenannter Spinor. Das Transformationsverhalten des Spinors unter Drehungen unterscheidet sich von dem eines Vektors. Beispielsweise gilt für den zweikomponentigen Spinor, der den Zustand von Spin $1/2$ -Teilchen beschreibt, bei Drehungen um $\varphi = 2\pi$ gerade $|\psi\rangle \rightarrow -|\psi\rangle$,

denn $e^{im\varphi} = e^{i\frac{1}{2}\varphi} = e^{i\frac{1}{2}2\pi} = e^{i\pi} = \cos\pi + i\sin\pi = -1$. Erst bei Drehungen um $\varphi = 4\pi$ folgt $|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle$.

7.3 Spin $\frac{1}{2}$. Pauli-Gleichung

Wir können den dimensionslosen Proportionalitätsfaktor zwischen Drehimpuls \underline{J} und magnetischem Moment $\underline{\mu}$ als Produkt aus Bohr'schem Magneton μ_B und g-Faktor schreiben

$$\underline{\mu} = g \mu_B \underline{J} .$$

Der g- oder Lande-Faktor im gyromagnetischen Verhältnis ist für jede Teilchenart eine charakteristische Konstante, die experimentell ermittelt werden kann.

Für das Bahndrehmoment des Elektrons ist $g = 1$ in Übereinstimmung mit (7.18)

$$\underline{\mu}_L = \frac{q}{2m} \underline{L} = \frac{e}{2m_e} \underline{L} = \frac{\mu_B}{\hbar} \underline{L} , \quad \mu_B = \frac{e \hbar}{2m_e} .$$

Dagegen wird für das Spinnmoment des freien Elektrons ein etwa doppelt so großer Wert $g \cong 2.00232$ gemessen

$$\hat{\underline{\mu}}_S \cong 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\underline{S}} = \mu_B \underline{\sigma} . \tag{7.23}$$

Aufgrund seines Spins besitzt das Elektron also in einem äußeren Magnetfeld eine zusätzliche Energie $\hat{V} = -\mu_B \underline{\sigma} \cdot \underline{\hat{B}}$.

Pauli führte zur Beschreibung des quantenmechanischen Zustands des Elektrons eine zwei-zeilige Wellenfunktion (Spinzustandsraum für $s = \frac{1}{2}$ ist zweidimensional) ein, den Pauli-Spinor

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\underline{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\underline{r}, t) \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \text{Pauli-Spinor} . \tag{7.24}$$

Der Pauli-Spinor beschreibt den Zustand des nichtrelativistischen Elektrons im Rahmen der Quantenmechanik vollständig.

Befindet sich nun ein Elektron (m_e , $-e$, $s = 1/2$) im elektromagnetischen Feld mit Vektorpotenzial $\underline{A}(\underline{r}, t)$ und skalarem Potenzial $\phi(\underline{r}, t)$, so lautet seine Hamilton-Funktion

$$H(\underline{p}, \underline{r}, t) = \frac{1}{2m_e} (\underline{p} + e\underline{A})^2 - e\phi - \underline{\mu} \cdot \nabla \times \underline{A}.$$

Aus dem Korrespondenzprinzip ergeben sich daraus unter Berücksichtigung von (7.23) der Hamilton-Operator \hat{H} und die Schrödinger-Gleichung wie folgt

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} (\hat{\underline{p}} + e\hat{\underline{A}})^2 - e\hat{\phi} - \underbrace{\mu_B}_{\substack{\text{Ortsraumoperator} \rightarrow \text{diagonal im} \\ \text{Spinraum, d.h. multipliziert mit } \underline{1}}} \underbrace{\underline{\sigma} \nabla \times \hat{\underline{A}}}_{\substack{\text{nichtdiagonal im} \\ \text{Spinraum,} \\ \text{koppelt } \psi_\uparrow \text{ und } \psi_\downarrow}}, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \rightarrow \text{Pauli (1927)}. \quad (7.25)$$

Gleichung (7.25) heißt Pauli-Gleichung. Wie die Schrödinger-Gleichung, entspricht sie der nichtrelativistischen Energie-Impuls-Beziehung $E = p^2 / 2m_e$. Die relativistisch korrekte Beschreibung des Elektrons auf der Basis der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung erfolgt durch die Dirac-Gleichung; das ist eine Differentialgleichung erster Ordnung für eine vierzeilige Wellenfunktion (4-Spinor).

Zur Interpretation von $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\underline{r}, t) \\ \psi_\downarrow(\underline{r}, t) \end{pmatrix}$:

- $|\psi_\uparrow(\underline{r}, t)|^2 d^3r \rightarrow$ Wahrscheinlichkeit, das Elektron zur Zeit t am Ort \underline{r} mit "spin up".
- $(|\psi_\uparrow(\underline{r}, t)|^2 + |\psi_\downarrow(\underline{r}, t)|^2) d^3r \rightarrow$ Wahrscheinlichkeit, das Elektron zur Zeit t am Ort \underline{r} .
- $\int d^3r |\psi_\downarrow(\underline{r}, t)|^2 \rightarrow$ Wahrscheinlichkeit für "spin down" zur Zeit t , usw.

Bem.: Die Abweichungen $g - 2$ sind von der Größenordnung der Sommerfeld'schen Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \sim \frac{1}{137}$. Sie resultieren aus der Wechselwirkung des Elektrons mit

seinem eigenen Strahlungsfeld, die im Rahmen der Quantenelektrodynamik (Bestandteil von ThPh V QM II im Master-Studiengang) behandelt wird.

Bei Nukleonen treten auch nicht ganzzahlige Werte für den g -Faktor auf.

■ **Beispiel: Spinpräzession im homogenen Magnet-Feld**

Wir betrachten ein homogenes Magnetfeld in z-Richtung. Die Pauli-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\underline{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\underline{r}, t) \end{pmatrix} = \hat{H} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\underline{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\underline{r}, t) \end{pmatrix}, \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_B B \hat{\sigma}_z = \hat{H}_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Für $B = \text{const}$ wirkt der zweite Term in \hat{H} nicht auf die Bahnbewegung, und \hat{H}_0 wirkt nicht auf den Spin. Sei \hat{H}_0 zeitunabhängig und $\hat{H}_0 \psi(\underline{r}) = E \psi(\underline{r})$. Nach dem Separationsansatz

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\underline{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\underline{r}, t) \end{pmatrix} = \psi(\underline{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

erhalten wir

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \text{also} \quad \begin{array}{l} i\hbar \frac{da}{dt} = \mu_B B a \\ i\hbar \frac{db}{dt} = -\mu_B B b \end{array} \quad \text{d.h.} \quad \begin{array}{l} a(t) = a(0) e^{-i\omega_L t} \\ b(t) = b(0) e^{i\omega_L t} \end{array}$$

Folglich führt das Elektron eine Präzessionsbewegung um die Feldrichtung mit der Frequenz

$$\omega_L := \frac{\mu_B B}{\hbar} = \frac{eB}{2m_e} \quad \rightarrow \quad \underline{\text{Larmor-Frequenz}} \quad (7.26)$$

aus.

Beachte die Abhängigkeit der Präzession vom Anfangszustand. Ist der Anfangszustand Eigenzustand von \hat{H} und folglich von $\hat{\sigma}_z$, so folgt aus

$$\begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\underline{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\underline{r}, t) \end{pmatrix} = \psi(\underline{r}) \begin{pmatrix} e^{-i\omega_L t} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und aus} \quad \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\underline{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\underline{r}, t) \end{pmatrix} = \psi(\underline{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\omega_L t} \end{pmatrix}.$$

Für diese Anfangszustände reduziert sich die Zeitabhängigkeit auf eine Multiplikation des gesamten Zustandsvektors mit einem physikalisch irrelevanten Phasenfaktor, die Richtung des Spins ändert sich nicht.

Anders, wenn der Anfangszustand (z.B.) Eigenzustand von \hat{S}_x bzw $\hat{\sigma}_x$ ist. Aus

$$\begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\underline{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\underline{r}, t) \end{pmatrix} = \psi(\underline{r}) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega_L t} \\ e^{i\omega_L t} \end{pmatrix}$$

also Spinpräzession.

Durch Einwirkung elektromagnetischer Strahlung der Frequenz ω_L werden in Atomen Niveauübergänge des Kernspins angeregt, so dass mit variierender Frequenz ein Absorptionsspektrum entsteht. Auf dieser Kernspinresonanz basiert der aus der modernen Medizin nicht mehr wegzudenkende Kernspin-Tomograph.