

8.3 Superauswahlregeln für den Gesamtdrehimpuls

Drehung eines Drehimpulszustandes um 2π :

$$(497) \quad \hat{D}_{\vec{n}}(2\pi) |j m \ell s\rangle = (-1)^{2j} |j m \ell s\rangle \\ = \pm |j m \ell s\rangle$$

Observable müssen aber stetig invariant unter Drehung im Raum um 2π sein!

D.h.

$$(498) \quad \langle \hat{D}_{\vec{n}}(2\pi) \phi | \hat{A} | \hat{D}_{\vec{n}}(2\pi) \phi \rangle \stackrel{!}{=} \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle$$

Das ist nur möglich, wenn

entweder

$|\phi\rangle$ Superposition aus Zuständen mit ganzzahligem Gesamtdrehimpuls

$$j = 0, 1, 2, 3, \dots$$

oder

$|\phi\rangle$ Superposition aus Zuständen mit halbzahligem Gesamtdrehimpuls

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

sind

Kombinationen aus halb- und ganzzahligen Drehimpuls sind nicht zulässig

Bew.: $|\phi_+\rangle$ ist zstd mit $j \in \{0, 1, 2, 3, \dots\}$

$|\phi_-\rangle$ ist zstd mit $j \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots\}$

$$|\tilde{\phi}_+\rangle \equiv \hat{D}_{\vec{n}}(2\pi) |\phi_+\rangle = |\phi_+\rangle$$

$$|\tilde{\phi}_-\rangle \equiv \hat{D}_{\vec{n}}(2\pi) |\phi_-\rangle = -|\phi_-\rangle$$

$$\langle \tilde{\phi}_+ | \hat{A} | \tilde{\phi}_+ \rangle = \langle \phi_+ | \hat{A} | \phi_+ \rangle \quad \checkmark$$

$$\langle \tilde{\phi}_- | \hat{A} | \tilde{\phi}_- \rangle = \langle \phi_- | \hat{A} | \phi_- \rangle \quad \checkmark$$

aber: $|\phi\rangle = \alpha |\phi_+\rangle + \beta |\phi_-\rangle \quad \alpha, \beta \neq 0$

$$|\tilde{\phi}\rangle = \hat{D}_{\vec{n}}(2\pi) |\phi\rangle = \alpha |\phi_+\rangle - \beta |\phi_-\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\phi} | \hat{A} | \tilde{\phi} \rangle &= |\alpha|^2 \langle \phi_+ | \hat{A} | \phi_+ \rangle \\ &\quad + |\beta|^2 \langle \phi_- | \hat{A} | \phi_- \rangle \end{aligned}$$

$$- \alpha^* \beta \langle \phi_+ | \hat{A} | \phi_- \rangle - \alpha \beta^* \langle \phi_- | \hat{A} | \phi_+ \rangle$$

$$\neq \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle \quad \Downarrow \quad \square$$

Folgerung

Bei jedem dynamischen Prozeß kann sich der Gesamtdrehimpuls nur um ganzzahlige Schritte ändern.

8.4 Spin $1/2$ Teilchen im Magnetfeld

Wie sieht der Hamiltonoperator eines Teilchens mit zweikomponentiger Wellenfunktion (Spin $1/2$) in einem äußeren elm. Feld aus?

$$\psi(\vec{r}, t) \longrightarrow \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} m_s = +\frac{1}{2} \\ m_s = -\frac{1}{2} \end{array}$$

Pauli Spinor

Aus der relativistischen Quantenmechanik des Elektrons (Dirac Theorie, QM II)

$$(499) \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right) \cdot \vec{\sigma} \right]^2 + q\Phi \cdot \mathbb{1}_2$$

$$\text{mit } \vec{\sigma} = \sigma_x \vec{e}_x + \sigma_y \vec{e}_y + \sigma_z \vec{e}_z$$

kinetischer Impuls

$$(500) \quad m \hat{v}_k = \hat{p}_k - \frac{q}{c} \hat{A}_k \equiv \hat{\pi}_k$$

$\Rightarrow$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_{k,e=1}^3 \hat{\pi}_k \hat{v}_k \hat{\pi}_e \hat{v}_e + q\Phi$$

mit

$$(501) \quad \hat{v}_k \hat{v}_e = \frac{1}{2} [\hat{v}_k, \hat{v}_e] + \frac{1}{2} \{\hat{v}_k, \hat{v}_e\} \\ = \delta_{ke} + i \varepsilon_{kej} \hat{v}_j$$

folgt

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_{k,e=1}^3 \hat{\pi}_k \hat{\pi}_e (\delta_{ke} + i \varepsilon_{kej} \hat{v}_j) + q\Phi$$

d.h. $\Rightarrow \dots \Rightarrow$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{\hat{p}} - \frac{q}{c} \vec{\hat{A}} \right)^2 - \frac{q\hbar}{2mc} \vec{B} \cdot \vec{\hat{v}} + q\Phi$$

$$(502) \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{\hat{p}} - \frac{q}{c} \vec{\hat{A}} \right)^2 - \underbrace{\text{sgn}(q) \frac{\mu}{\hbar} 2 \vec{B} \cdot \vec{\hat{S}}}_{\text{Kopplung des Spins an Magnetfeld}} + q\Phi$$

Kopplung des Spins an Magnetfeld

— 200 —

Auch der innere Drehimpuls eines geladenen Teilchens hat ein magnetisches Moment.

Man beachte den Faktor 2 in Gl. (502)

anomalies magnetisches Moment
des Spins

$$(503) \quad \vec{M}_{\text{spin}} = 2 \operatorname{sgn}(q) \frac{\mu}{\hbar} \vec{S}$$

Speziell findet man für ein konstantes Magnetfeld (zusätzlich nehmen wir ein Potential $V(\vec{r})$ an)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) + \frac{q^2}{8mc^2} (\vec{r} \times \vec{B})^2 + q\Phi - \operatorname{sgn}(q) \frac{\mu}{\hbar} \vec{B} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S})$$

(504)

Betrachten jetzt nur interne Dynamik

(Vernachlässigung der Bewegung des Teilchens)

Elektron $\operatorname{sgn}(q) = -1$ O.B.d.A. $\vec{B} = B \vec{e}_z$

$$(505) \quad \hat{H} = 2 \frac{\mu}{\hbar} B \hat{S}_z$$

Eigenzustände von $\hat{S}_z$

$$|\chi_+\rangle$$

$$E_+ = \mu B$$

$$|\chi_-\rangle$$

$$E_- = -\mu B$$

Betrachten nun die zeitliche Entwicklung eines anfänglichen Superpositionszustandes aus $|\chi_+\rangle$ und $|\chi_-\rangle$

$$(506) \quad |\chi(t=0)\rangle = \alpha |\chi_+\rangle + \beta |\chi_-\rangle$$

$$\Rightarrow (507) \quad |\chi(t)\rangle = \alpha e^{-i \frac{\mu B}{\hbar} t} |\chi_+\rangle + \beta e^{+i \frac{\mu B}{\hbar} t} |\chi_-\rangle$$

Wählen speziell $\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$, d.h. $|\chi(t=0)\rangle$ ist Eigenzustand von $\hat{S}_x$ mit $m_x = +1$

$$|\chi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Dann

$$|\chi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i\omega_0 t}, e^{i\omega_0 t})$$

$$\langle \hat{S}_x(t) \rangle = \langle \chi(t) | \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} | \chi(t) \rangle$$

$$\underline{\underline{\langle \hat{\sigma}_x(t) \rangle}} = \frac{1}{2} (e^{\frac{i\omega_0 t}{2}}, e^{-\frac{i\omega_0 t}{2}}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\omega_0 t}{2}} \\ e^{\frac{i\omega_0 t}{2}} \end{pmatrix}$$

$$(508) \quad = \frac{1}{2} (e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t})$$

$$= \underline{\underline{\cos \omega_0 t}}$$

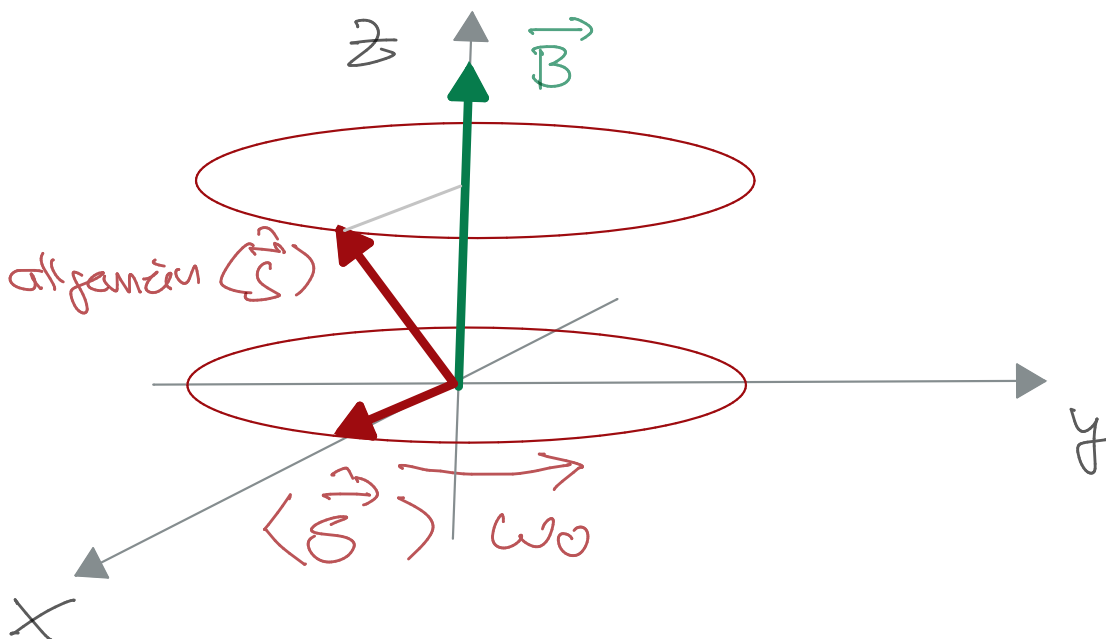
$$(509) \text{ wobei } \underline{\underline{\omega_0 = \frac{2\mu B}{\hbar}}}$$

analog findet man

$$(510) \quad \underline{\underline{\langle \hat{\sigma}_y(t) \rangle = \sin \omega_0 t}}$$

$$\underline{\underline{\langle \hat{\sigma}_z(t) \rangle = \langle \hat{\sigma}_z(0) \rangle = 0}}$$

Spinpräzession



8.5 Spin-Bahnpkopplung und Feinstruktur beim Wasserstoff

Aus der relativistischen Behandlung des Wasserstoffproblems ergeben sich mehrere Zusatzterme zum Hamiltonoperator. Der wichtigste Korrekturterm ist die Spin-Bahn Kopplung

Im Schwerpunktsystem und mit $\mu \approx m_e \equiv m$

$$(511) \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} + f(r) \vec{L} \cdot \vec{S} \equiv H_0 + H_{SB}$$

Wechselwirkungsenergie der magnetischen Momente von Bahn- und Spindrehimpuls

$$(512) \quad \hat{H}_{SB} = f(r) \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Es gilt offensichtlich

$$(513) \quad [\hat{H}_{SB}, \vec{J}^2] = 0 \quad \text{aber} \quad [\hat{H}_{SB}, L_z] \neq 0 \\ [\hat{H}_{SB}, S_z] \neq 0$$

Da $\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}$ folgt

$$(514) \quad \hat{H}_{SB} = \frac{f(r)}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$$

$\Rightarrow$ gekoppelte Basis $|j, m, l, s\rangle$

Die Eigenzustände von H_0 waren

$$(515) \quad \phi_E(\vec{r}) = \frac{u_{le}(r)}{r} \phi_{j m l s = \frac{1}{2}} \begin{cases} \nearrow j = l + \frac{1}{2} \\ \searrow j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Eigenzustände von H

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) f(r) \right] u_{lje}(r) = E u_{lje}(r)$$

$$\bullet \quad l, s = \frac{1}{2}, j = l + \frac{1}{2} \quad u_{le}^+(r)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2} e f(r) \right] u_{le}^+(r) = E u_{le}^+(r)$$

$$\bullet \quad l, s = \frac{1}{2}, j = l - \frac{1}{2}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2} (l+1) f(r) \right] u_{le}^-(r) = E u_{le}^-(r)$$

Potential nicht mehr Coulomb!

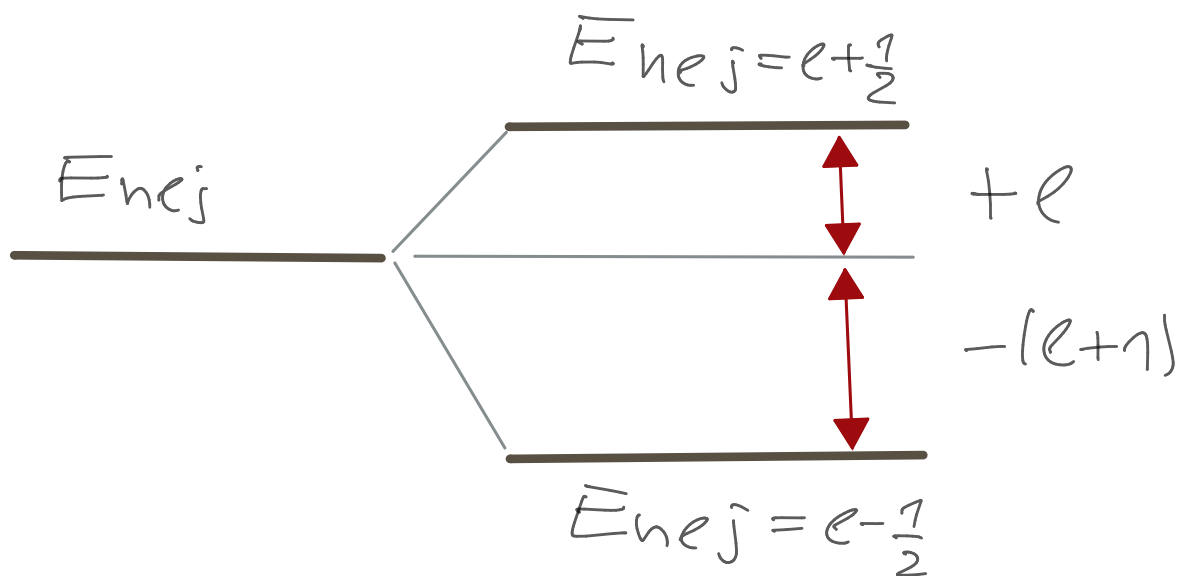
Abschätzung der Eigenwerte

$$f(r) \longrightarrow \langle f(r) \rangle_{ne} = \text{konst}$$

↑
Eigenzustände ohne HSB

$$E_{nj} \approx E_n + \frac{\hbar^2}{2} \langle f(r) \rangle_{ne} \begin{cases} +\ell & j = \ell + \frac{1}{2} \\ -(\ell+1) & j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Feinstruktur



Bem: Hyperfeinstruktur: Kopplung von magnetischem Moment des Elektrons an das magnetische Moment des Kerns