

11. Spin und Kopplung von Drehimpulsen; Feinstruktur und Hyperfeinstruktur

11.1

Spin

Motivation: bisher: QM Teilchen hat 3 Freiheitsgrade x, y, z

$$\Rightarrow \text{magnetisches Moment } \vec{\mu} \sim \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \text{mit } l=0,1,2,\dots, m=-l,\dots,l$$

$2l+1$ magnetische
Umlaufzustände
= ungerade Anzahl

Stern-Gerlach Experiment: Aufspaltung eines wasserstoffähnlichen Silberatomstrahls

in inhomogenem $\vec{B}$ -Feld in 2 Teilstrahlen

$\rightarrow$ Aufspaltung in $2 = 2l+1 \rightarrow$ Drehimpuls $l=\frac{1}{2}$ kann kein Bahndrehimpuls sein

Goudsmit + Uhlenbeck: Elektronen besitzen inneren Drehimpuls oder Eigendrehimpuls = Spin $S=\frac{1}{2}$
 $m_s = \pm \frac{1}{2}$

Spinoperator $\hat{S}$ gehorcht Drehimpulsalgebra (zur Erinnerung: gilt für ganz- und halbzahligen Drehimpuls)

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{S}_l$$

2 Arten von Elementarteilchen: Fermionen $\rightarrow$ halbzahliges Spin z.B. Elektronen $S=\frac{1}{2}$

Bosonen $\rightarrow$ ganzzahliges Spin z.B. Photonen $S=1$
 $\rightarrow$ Hohlraumstrahlung
Lichtquanten

Hilbertraum eines $S=\frac{1}{2}$ Spins (Spinraum): $\mathcal{H}_S$ ist $2S+1=2$ dimensional

wird aufgespannt durch $|S=\frac{1}{2}, m_s=-\frac{1}{2}\rangle \equiv |-\rangle$ und $|S=\frac{1}{2}, m_s=+\frac{1}{2}\rangle \equiv |+\rangle$

Darstellung als 2-dim Vektor $\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ und $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

allgemeiner Spinor $\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ mit $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, Normierung $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = \chi^\dagger \chi = 1$

Alle Operatoren lassen sich als 2×2 Matrizen darstellen $\hat{S}_z = \begin{pmatrix} \langle + | \hat{S}_z | + \rangle & \langle + | \hat{S}_z | - \rangle \\ \langle - | \hat{S}_z | + \rangle & \langle - | \hat{S}_z | - \rangle \end{pmatrix}$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Warum z.B. $\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$ $\Rightarrow$ Matrixdarstellung
 $\hat{S}_y$ analog

$$\hat{S}_\pm |S, m_s\rangle = \hbar \sqrt{S(S+1) - m_s(m_s \pm 1)} |S, m_s \pm 1\rangle$$

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \langle + | \hat{S}_+ + \hat{S}_- | + \rangle & \langle + | \hat{S}_+ + \hat{S}_- | - \rangle \\ \langle - | \hat{S}_+ + \hat{S}_- | + \rangle & \langle - | \hat{S}_+ + \hat{S}_- | - \rangle \end{pmatrix}$$

$\hbar$ 0

$\Rightarrow \hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ für $S=\frac{1}{2}$ mit Pauli Matrizen $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$

$= \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)$

$\Rightarrow \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{S}} = \hat{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4} \vec{\sigma}^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4} \mathbb{1} = S(S+1)\hbar^2 \mathbb{1}$

1-Operator im Spinraum = 2×2 $\mathbb{1}$ Matrix

Einheitsmatrix und Pauli Matrizen sind Basis aller Hermiteschen 2×2 Matrizen.

Hilbertraum von N $S=\frac{1}{2}$ Spins hat Dimension 2^N ! $2^{50} = 10^{15}$ huge!

Teilchen mit Spin $S=\frac{1}{2}$: Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_s$ $\rightarrow S=1$ Teilchen $\hat{S}$ in Spindarstellung wird kommutativer Vektor wird die Matrizen

$\uparrow$
Raum quadratisch integrierbarer Funktionen eines Teilchens

Zur vollständigen Charakterisierung benötigt man neben x, y, z noch Spindarstellung

z.B. Wasserstoffatom $\{ |n, l, m\rangle |+\rangle, |n, l, m\rangle |-\rangle \}$

allgemeiner Spinor $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}, t) \\ \Psi_-(\vec{r}, t) \end{pmatrix} \quad |\Psi\rangle = \begin{pmatrix} |\Psi_+\rangle \\ |\Psi_-\rangle \end{pmatrix}$

mit Normierung $\int d^3r (|\Psi_+(\vec{r}, t)|^2 + |\Psi_-(\vec{r}, t)|^2) = 1 = \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$

Wahrscheinlichkeit Spin $m_s = \pm \frac{1}{2}$ $\int d^3r |\Psi_\pm(\vec{r}, t)|^2 = W_{\pm} \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$

Operatoren

Wirkung auf allg. Spinor Ψ

Orbitsoperator $\hat{\vec{r}} \otimes \mathbb{1}_s \rightarrow \begin{pmatrix} \vec{r} & 0 \\ 0 & \vec{r} \end{pmatrix}$ in Ortsdarstellung

$\rightarrow \begin{pmatrix} \vec{r} \Psi_+ \\ \vec{r} \Psi_- \end{pmatrix}$

Impulsoperator $\hat{\vec{p}} \otimes \mathbb{1}_s \rightarrow \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \vec{\nabla} & 0 \\ 0 & \vec{\nabla} \end{pmatrix}$ " "

$\rightarrow \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \vec{\nabla} \Psi_+ \\ \vec{\nabla} \Psi_- \end{pmatrix}$

S_z Komponente

$\mathbb{1} \otimes \hat{S}_z \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$\rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ -\Psi_- \end{pmatrix}$

Frage: $\hat{S}_x, \hat{S}_y$

Gesamtdrehimpuls z-Komponente

$(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}})_z = \hat{L}_z \otimes \mathbb{1}_s + \mathbb{1}_s \otimes \hat{S}_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \partial_\phi & 0 \\ 0 & \partial_\phi \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Erwartungswert des Spinoperator $\hat{S}$ in Zustand $|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} |\Psi_+\rangle \\ |\Psi_-\rangle \end{pmatrix}$

$$\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle = \sum_{j,k=\pm} \underbrace{\langle j | \hat{S} | k \rangle}_{\hat{S}_{jk}} \underbrace{\langle \Psi_j | \Psi_k \rangle}_{\int d^3r \Psi_j^*(\vec{r},t) \Psi_k(\vec{r},t) \equiv \rho_{kj}^{(s)} = \text{Spindichtmatrix}}$$

$$\Rightarrow \langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle = \sum_{j,k=\pm} \hat{S}_{jk} \rho_{kj}^{(s)} = \text{Sp}_{(s)}(\hat{S} \rho)$$

allgemeine Dichtematrix $\rho_{kj}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \Psi_k(\vec{r}, t) \Psi_j^*(\vec{r}', t)$

$$\Rightarrow \langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle = \text{Sp}(\hat{S} \rho)$$

↳ Spur in Spin und $\int d^3r$

allgemeiner Operator

$$\langle \Psi | \hat{S}_m \hat{p}_n | \Psi \rangle = \text{Sp}(\hat{S}_m \hat{p}_n \rho) = \sum_{j,k=\pm} \int d^3r (\hat{S}_m)_{jk} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_n \Psi_k(\vec{r}, t) \right) \Psi_j^*(\vec{r})$$

↑
Impulsoperator

Eigenschaften der allgemeinen Dichtematrix ρ

$$(i) \rho^\dagger = \rho \Leftrightarrow (\rho^\dagger)_{kj}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \rho_{jk}(\vec{r}, \vec{r}', t)$$

" $\rho_{jk}^*(\vec{r}', \vec{r}, t)$ o.k.

$$(ii) \text{Sp}(\rho) = 1 \rightarrow \text{Normierung}$$

$$(iii) \rho^2 = \rho \text{ f\"ur reine Zust\"ande, d.h. Zust\"ande, die durch eine Wellenfunktion beschrieben werden (wie oben)}$$

$$(\rho^{(s)})^2 = \rho^{(s)} \text{ f\"ur Spindichtematrix nur f\"ur Zust\"ande mit konstantem Spin } \Psi(\vec{r}, t) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

Allgemeine Darstellung der Spindichtematrix $\rho^{(s)} = \frac{1}{2} (1 + \hat{\vec{\pi}} \cdot \vec{\sigma})$ f\"ur spin $S = \frac{1}{2}$

Polarisationsvektor $\vec{\pi}$ mit $|\vec{\pi}| \leq 1$

$$\Rightarrow \langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle = \text{Sp}_{(s)} \left(\frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \rho^{(s)} \right) = \frac{\hbar}{2} \vec{\pi}$$

$$\pi_z = \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{N_\uparrow + N_\downarrow} \text{ Polarisation im Ensemble}$$

*) Gemischt ist z.B. Atomstrahl mit 50% Atomen mit Spin $|\uparrow\rangle$ und 50% $|\downarrow\rangle \rightarrow \vec{\pi} = 0$

Wasserstoffatom mit Berücksichtigung des Spins

Experiment: Aufspaltung aller Niveaus mit $l \geq 1$ in zwei Niveaus

→ Feinstruktur (≪ Bahnaufspaltung in Zeeman Effekt mit äußeren $\vec{B}$ Feld)

Kommt durch relativistische QM Korrekturen der Ordnung $\frac{v}{c}$ zustande:

$$\hat{V}_{\text{spin-orbit}} = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}}_{\text{repulsiv}} \underbrace{\frac{\vec{L} \cdot \vec{S}}{\hbar^2}}_{\substack{\text{ab hier dimensionlose} \\ \vec{L}, \vec{S} \text{ Operatoren}}} \quad \text{ohne äußeres Magnetfeld}$$

$\downarrow \quad \downarrow$
 $l(l+1), m \quad S(S+1), m_s$

$$\hat{\vec{p}}_{\text{kin}} = \frac{\hbar \vec{k}}{r}$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_j, \hat{L}_k] &= i \epsilon_{jkl} \hat{L}_l \\ [\hat{S}_j, \hat{S}_k] &= i \epsilon_{jkl} \hat{S}_l \end{aligned}$$

Problem: $[\hat{H}_0 + \hat{V}_{so}, \hat{\vec{L}}] \neq 0$ und $[\hat{H} + \hat{V}_{so}, \hat{\vec{S}}] \neq 0$

Bahndrehimpuls und Spin nicht erhalten, aber

$$[\hat{H}_0 + \hat{V}_{so}, \underbrace{\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}}] = 0 \rightarrow \text{Rotationsinvarianz in } \mathcal{H}_l \otimes \mathcal{H}_s$$

$$\text{Gesamtdrehimpuls } \hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

Addition von Drehimpulsen

Gesamtdrehimpuls erfüllt $[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i \epsilon_{jkl} \hat{J}_l$ wegen $[\hat{L}_j, \hat{S}_k] = 0$

wirken auf $\mathcal{H}_l$ und $\mathcal{H}_s$
(unterschiedliche Räume)

$$\Rightarrow [\underbrace{\hat{H}_0 + \hat{V}}_{=\hat{H}}, \hat{\vec{J}}^2] = [\hat{H}, \hat{J}_z] = [\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{S}^2] = 0$$

⇒ Existieren gute Basiszustände $|(l s) J J_z\rangle$ in denen $\hat{H}$ diagonal

mit

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |(l s) J J_z\rangle &= l(l+1) |(l s) J J_z\rangle \\ \hat{S}^2 |(l s) J J_z\rangle &= s(s+1) |(l s) J J_z\rangle \\ \hat{J}^2 |(l s) J J_z\rangle &= J(J+1) |(l s) J J_z\rangle \\ J_z |(l s) J J_z\rangle &= J_z |(l s) J J_z\rangle \end{aligned}$$

Wie stellen sich $|(ls) j j_z\rangle$ als Linearkombination von $|lm\rangle |s m_s\rangle$ dar?

Dimension für feste $l, s = (2l+1)(2s+1)$

$$\hat{J}_z |lm\rangle |s m_s\rangle = (m + m_s) |lm\rangle |s m_s\rangle \Rightarrow j_z = m + m_s$$

$$\Rightarrow |l-s| \leq |j| \leq l+s$$

$\begin{matrix} \text{min} \\ \text{pos.} \end{matrix} \quad \downarrow \text{max}$

$$\Rightarrow \begin{aligned} & \text{1 Zustand mit maximal } j_z = l+s \rightarrow |ll\rangle |ss\rangle = |(ls) l+s, l+s\rangle \\ & \text{max. neg } j_z = -l-s \rightarrow |l-l\rangle |s, -s\rangle = |(ls) l+s, -l-s\rangle \end{aligned}$$

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_z (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)$$

$$\Rightarrow \hat{J}^2 |ll\rangle |ss\rangle = \underbrace{(l+s)(l+s+1)}_{j(j+1)} |ll\rangle |ss\rangle$$

$\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ \rightarrow 0$

$$\Rightarrow \hat{J}^2 |l-l\rangle |s-s\rangle = \underbrace{(-l-s)(-l-s-1)}_{j(j+1)} |l-l\rangle |s-s\rangle$$

$\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ \rightarrow 0$

Zustände mit $j_z = -1, j_z = -2, \dots, -j_z$ durch Anwenden von $\hat{J}_- = \hat{L}_- + \hat{S}_-$ auf $|(ls) l+s, l+s\rangle$

Beispiel: 2 $S = \frac{1}{2}$ spins: $S_1 = \frac{1}{2}, S_2 = \frac{1}{2}$: $J_- |j m_z\rangle = \sqrt{j(j+1) - m_z(m_z-1)} |j m_z-1\rangle$

Gesamt $S=1, S_z=1$: $|S=1, S_z=1\rangle = |S_1=\frac{1}{2}, m_{s1}=\frac{1}{2}\rangle |S_2=\frac{1}{2}, m_{s2}=\frac{1}{2}\rangle = |+\rangle |+\rangle$

$$\begin{aligned} S=1, S_z=0 : |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2-0}} J_- |1, 1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (S_-^{(1)} + S_-^{(2)}) |+\rangle |+\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-\rangle |+\rangle + |+\rangle |-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_1=\frac{1}{2}, m_{s1}=-\frac{1}{2}\rangle |S_2=\frac{1}{2}, m_{s2}=\frac{1}{2}\rangle \\ &\quad + |S_1=\frac{1}{2}, m_{s1}=\frac{1}{2}\rangle |S_2=\frac{1}{2}, m_{s2}=-\frac{1}{2}\rangle) \end{aligned}$$

$$S=1, S_z=-1 : |1, -1\rangle = |-\rangle |-\rangle$$

$$S=0, S_z=0 : |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle |-\rangle - |-\rangle |+\rangle) \text{ aus Orthogonalität zu } |1, 0\rangle$$

→ Übungsblatt für $L_1 = L_2 = l$

Clebsch-Gordan Koeffizienten $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ (allg. $\vec{J}_1 + \vec{J}_2$)

$$1 = \sum_{l m, s m_s} |l m\rangle |s m_s\rangle \langle l m| \langle s m_s|$$

$$\Rightarrow |(l s) J J_z\rangle = 1 |(l s) J J_z\rangle = \sum_{m, m_s} |l m\rangle |s m_s\rangle \langle l m, s m_s | (l s) J J_z\rangle$$

l, s in bra und ket =

$$\langle l m, s m_s | (l s) J J_z\rangle \equiv C_{l m, s m_s}^{J J_z} \quad \text{Clebsch-Gordan Koeffizient}$$

$$= \text{reell}, \neq 0 \text{ für } |l-s| \leq J \leq l+s$$

$$J_z = m + m_s$$

Addition von 3 Drehimpulsen

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \vec{J}_1 + \vec{J}_2 + \vec{J}_3 = (\vec{J}_1 + \vec{J}_2) + \vec{J}_3 = \vec{J}_{12} + \vec{J}_3 \\ &= \vec{J}_{13} + \vec{J}_2 \\ &= \vec{J}_{23} + \vec{J}_1 \end{aligned}$$

sukzessives Kopplern von 2 Drehimpulsen

zurück zur Spin-Orbit Wechselwirkung und Feinstruktur aufspaltung

$$\hat{V}_{\text{spin-orbit}} = V_{ls} \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$$

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{1}{2} (\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{L}}^2 - \hat{\vec{S}}^2) = \frac{1}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1))$$

$$\text{für } S=1/2: J = J_+ = l + 1/2 \quad \text{und} \quad J_- = l - 1/2 \quad (\text{für } l=0 \text{ nur } J_+)$$

$$\Rightarrow \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{1}{2} \begin{cases} l & , J_+ \\ -(l+1) & , J_- \end{cases}$$

1. Ordnung entartete Störungstheorie

Diagonalisiere $V_L \hat{L} \cdot \hat{S}$ im Unterraum zu gegebenem n

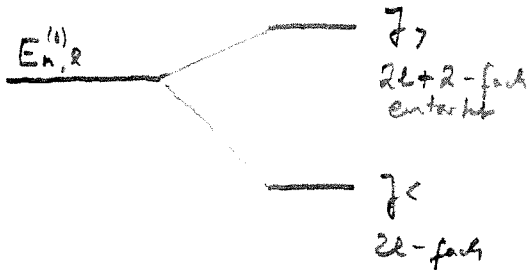
$\hat{L} \cdot \hat{S}$ ist diagonal in gekoppelten Zuständen $|(LS)J J_z\rangle$

$$\Rightarrow E_{n,l}^{(1)} = \int_0^\infty r^2 dr |R_{nl}(r)|^2 V(r) \cdot \frac{1}{2} \begin{cases} l & , J = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & , J = l - \frac{1}{2} \quad (\text{und } l > 0) \end{cases}$$



Feinstruktur aufspaltung in 2 Niveaus für $l \geq 1$

Grundzustand $l=0$ ist $2S+1$ ^{= 2-fach} entartet
(keine Aufspaltung)



insgesamt $(2l+1) \cdot 2 = (2l+1)(2S+1)$

für radiales Integral $\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \rangle = Z\alpha k_e \langle \frac{1}{r^3} \rangle = Z\alpha k_e \frac{Z^3}{n^3 a_0^3} = \left(\frac{m}{\hbar^2 n}\right)^3 (Z\alpha k_e)^4$

$$\Rightarrow \frac{\Delta E_{LS}}{E_{n,l}^{(0)}} = \frac{E_{n,l}^{(1)} - E_{n,l}^{(1)}}{E_{n,l}^{(0)}} \sim \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2 \ll 1 \quad \text{da } \alpha = \frac{1}{137}$$

Hyperfeinstruktur aufspaltung durch Wechselwirkung des Gesamtspins $\hat{J}$ des Elektrons mit Kernspin $\hat{I}$

→ Gesamtspin $\hat{F} = \hat{I} + \hat{J}$, $\hat{I} \cdot \hat{J}$ Wechselwirkung führt zu Hyperfeinstruktur

Wasserstoffatom mit Spin in äußeren $\vec{B}$ -Feld $\vec{B} = (0, 0, B)$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{L} \cdot \hat{S} + \underbrace{\mu_B B \hat{L}_z + g \mu_B B \hat{S}_z}_{m + g m_s}$$

$g \approx 2.00232$ gyromagnetischer Faktor
 $\approx 2 + \frac{\alpha}{2} + O(\alpha^2)$ QED

bei ^{schwachen} kleinem $\vec{B}$ -Feld startet man von $|l s m_l m_s\rangle$ Basis ($\rightarrow$ Störung diagonal für $B \Rightarrow$)

bei großem $\vec{B}$ -Feld mit $|l m\rangle |s m_s\rangle$

Diagonalisierung im n -Unterraum, z.B. $n=2$

