Review: • Spin operator $\hat{\vec{S}}$

obeys angular momentum algebra $[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{S}_l$

Chapter 8

• Eigenstates of $\hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_z$: $\quad \hat{\vec{S}}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s\, m_s\rangle$

$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$

$m_s = \underbrace{-s, -s+1, \ldots, s-1, s}_{2s+1}$ $\quad \hat{S}_z |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s\, m_s\rangle$

• Particles have either: half-integer spin $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots \rightarrow$ Fermions

integer spin $s = 0, 1, 2, \ldots \rightarrow$ Bosons

• Spin (Hilbert) space $\mathcal{H}_s$

for $s = \frac{1}{2}$: 2 dimensional, general spinor $\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \alpha, \beta \in \mathbb{C}$

e.g. e^-

basis states: $|\uparrow\rangle \equiv |s = \tfrac{1}{2}, m_s = \tfrac{1}{2}\rangle \rightarrow \chi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$\rightarrow$ Ws e^- $m_s = \frac{1}{2}$: $|\alpha|^2$

$m_s = -\frac{1}{2}$: $|\beta|^2$

$|\downarrow\rangle \equiv |s = \tfrac{1}{2}, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle \rightarrow \chi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$\hat{\vec{S}} : \underset{\mathcal{H}_s}{\chi} \rightarrow \underset{\mathcal{H}_s}{\chi'} = \hat{S}_j \chi$

$\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2} \sigma_j \qquad \vec{\sigma} = \left(\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{j=x}, \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}}_{j=y}, \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{j=z} \right)$

Vorlesung heute:

• Spin continued ✓

• Wasserstoffatom mit Spin $\quad \hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} - \frac{Z\alpha\hbar c}{r}}_{} + \underbrace{\ldots}_{} ?$

• Addition von Drehimpulsen $\quad \hat{\vec{L}}, \hat{\vec{S}}$

• Feinstruktur und Hyperfeinstruktur

• Wasserstoffatom mit Spin in $\vec{B}$ Feld

Spin continued

Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$: Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\vec{r}} \otimes \mathcal{H}_s$

$\mathcal{H}_{\vec{r}}$: Raum quad. integralen Fkten

$\mathcal{H}_s$: $\{|s m_s\rangle\}$

→ zur vollständigen Beschreibung eines Teilchens mit Spin benötigt man neben bisherigem Zustand $|\psi\rangle$ noch Spinfreiheitsgrad

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

z.B. Wasserstoffatom: Basiszustände $\{ \underbrace{|n l m\rangle |\uparrow\rangle}_{|n l m;\, s=\frac{1}{2},\, m_s=+\frac{1}{2}\rangle}, |n l m\rangle |\downarrow\rangle \}$

→ allgemeiner Spinor $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{r}) \\ \psi_\downarrow(\vec{r}) \end{pmatrix} \longleftrightarrow |\Psi\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_\uparrow\rangle \\ |\psi_\downarrow\rangle \end{pmatrix}$

mit Normierung $\int d^3r \left(|\psi_\uparrow(\vec{r})|^2 + |\psi_\downarrow(\vec{r})|^2 \right) = 1$

Ws, dass Teilchen $m_s = -\frac{1}{2}$: $\int d^3r \, |\psi_\downarrow(\vec{r})|^2$

Operator (Ortsdarstellung für $\mathcal{H}_{\vec{r}}$) — **Wirkung auf allg. Spinor Ψ**

Ortsoperator

$$\hat{\vec{r}} \otimes \mathbb{1}_s \longrightarrow \begin{pmatrix} \vec{r} & 0 \\ 0 & \vec{r} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \vec{r}\,\psi_\uparrow \\ \vec{r}\,\psi_\downarrow \end{pmatrix}$$

Impulsoperator

$$\hat{\vec{p}} \otimes \mathbb{1}_s \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \vec{\nabla} & 0 \\ 0 & \vec{\nabla} \end{pmatrix} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \vec{\nabla}\psi_\uparrow \\ \vec{\nabla}\psi_\downarrow \end{pmatrix}$$

Spin-z Komponente

$$\mathbb{1}_{\vec r} \otimes \hat{S}_z \longrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \longrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} +\psi_\uparrow \\ -\psi_\downarrow \end{pmatrix}$$

Gesamtdrehimpuls

$$(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}})_z$$

$$= \hat{L}_z \otimes \mathbb{1}_s + \mathbb{1}_{\vec r} \times \hat{S}_z \rightarrow \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\varphi} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial\varphi} \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

alg. Ψ

$$\rightarrow \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\varphi}\psi_\uparrow \\ \frac{\partial}{\partial\varphi}\psi_\downarrow \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ -\psi_\downarrow \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow [\hat{L}_z, \hat{S}_z] = \underbrace{\hat{L}_z\hat{S}_z - \hat{S}_z\hat{L}_z}_{} = 0$$

Wirkung auf Ψ $\quad \frac{\hbar}{i}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \partial_\varphi\psi_\uparrow \\ -\partial_\varphi\psi_\downarrow \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \partial_\varphi\psi_\uparrow \\ -\partial_\varphi\downarrow \end{pmatrix} = 0$

$$[\hat{P}_x, \hat{P}_y] = 0$$

r, θ, φ

$$\hat{L}_z \underbrace{\hat{S}_z \Psi} = \hat{L}_z \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec r) \\ -\psi_\downarrow(\vec r) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \partial_\varphi\psi_\uparrow(\vec r) \\ -\partial_\varphi\psi_\downarrow(\vec r) \end{pmatrix}$$

Erwartungswert des Spinoperators $\hat{\vec{S}}$ im Zustand $|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_\uparrow\rangle \\ |\psi_\downarrow\rangle \end{pmatrix}$

$$\langle \Psi | \hat{\vec{S}} | \Psi \rangle = \sum_{j,k=\uparrow,\downarrow} \underbrace{\langle j | \hat{\vec{S}} | k \rangle}_{\hat{\vec{S}}_{jk}} \underbrace{\langle \psi_j | \psi_k \rangle}$$

s. letzte Vorlesung

Spindichtematrix

$$\langle \psi_j \underset{\hat{\mathbb{1}}}{|} \psi_k \rangle = \int d^3r \; \underbrace{\psi_j^*(\vec{r},t)\, \psi_k(\vec{r},t)} \equiv \rho_{kj}^{(s)}$$

z.B. $j = k = \uparrow$ $\quad |\psi_\uparrow(\vec{r},t)|^2$

$$\Rightarrow \langle \Psi | \hat{\vec{S}} | \Psi \rangle = \sum_{j,k=\uparrow,\downarrow} \hat{\vec{S}}_{jk}\, \rho_{kj}^{(s)} = Sp^{(s)}\left(\hat{\vec{S}} \cdot \rho^{(s)}\right)$$

$$(\;)_{jk} \cdot (\;)_{kj} = (\;)_{jj}$$

allgemeine Dichtematrix $\quad \rho_{kj}(\vec{r},\vec{r}\,';t) = \psi_k(\vec{r},t)\, \psi_j^*(\vec{r}\,',t)$

$$\Rightarrow \langle \Psi | \hat{\vec{S}} | \Psi \rangle = Sp\left(\hat{\vec{S}} \cdot \rho\right)$$

mit $Sp = \sum_{j=\uparrow,\downarrow} \int d^3r$

$\rightarrow$ Erwartungswert: Spur von Operator $\cdot$ Dichtematrix

Allgemeiner Operator $\quad \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle = Sp\left(\hat{O}\, \rho\right)$

gesamte Information des System in Dichtematrix

Eigenschaften der allg. Dichtematrix ρ

(i) $\rho^{+} = \rho \iff \rho^{*}_{jk}(\vec{r}\,',\vec{r};t) = \rho_{kj}(\vec{r},\vec{r}\,';t)$

$$\psi_j^{*}(\vec{r}\,',t)\,\psi_k(\vec{r},t) = \psi_k(\vec{r},t)\,\psi_j^{*}(\vec{r}\,',t)$$

(ii) $$\mathrm{Sp}(\rho) = \sum_{k=\uparrow,\downarrow} \int d^3r\, \rho_{kk}(\vec{r},\vec{r};t)$$

$$= \sum_{k=\uparrow,\downarrow} \int d^3r\, |\psi_k(\vec{r},t)|^2 = 1$$

(iii) Für reine Zustände, d.h. Zustände die nur durch eine Wellenfkt beschrieben werden

dann gilt $\rho^2 = \rho$

Spezialfall $(\rho^{(s)})^2 = \rho^{(s)}$ für Zustände mit konst. Spinor

$$\Psi = \psi(\vec{r},t)\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$$

Allg. kann man Spindichtematrizen schreiben als

(ii)

$$\rho^{(s)} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + \vec{\pi}\cdot\vec{\sigma}\right) \quad \text{für Spin } \tfrac{1}{2}$$

$$\mathrm{Sp}(\cdot\cdot) = \mathrm{Sp}\,\tfrac{1}{2}\mathbb{1} = 1$$

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

Wasserstoffatom unter Berücksichtigung des Elektronenspins $(\vec{B} = 0!)$

Experiment: Alle Energieniveaus mit $l \geq 1$ spalten in 2 Niveaus auf

$\rightarrow$ Feinstrukturaufspaltung ($\ll$ Aufspaltung in $\vec{B}$ Feld mit Effekt)

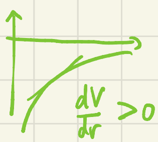
kommt durch relativistische QM Korrektur der Ordnung $\underbrace{\frac{v}{c}}_{\text{klein}}$ zustande

$$\hat{V}_{\substack{\text{Spin-}\\\text{Bahn}}} = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}}_{\text{repulsiv } > 0} \underbrace{\frac{\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}}{\hbar^2}}_{\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} \text{ dimlos}}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} \underbrace{- \frac{Z\alpha\hbar c}{r}}_{V(r)} + \hat{V}_{\substack{\text{Spin-}\\\text{Bahn}}} \qquad (\vec{B} = 0!)$$

ab jetzt dimensionslose $\frac{\hat{\vec{S}}}{\hbar} \rightarrow \hat{\vec{S}}$ $\qquad \frac{\hat{\vec{L}}}{\hbar} \rightarrow \vec{L}$

V(r)



Problem: $\quad [\hat{H}, \hat{\vec{L}}] \neq 0 \qquad\qquad [\hat{H}, \hat{\vec{S}}] \neq 0$

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{LS}$

$$[\ldots + \cdot \hat{L}_j \cdot \hat{S}_j, \hat{L}_k] \neq 0$$

Bahndrehimpuls und Spin sind nicht erhalten

$\Rightarrow \quad |n\, l\, m\rangle\, |s\, m_s\rangle$ keine guten Eigenzustände von $\hat{H}$

$$\underbrace{\left(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}\right)}_{\substack{\text{Gesamtdrehimpuls} \\ \hat{\vec{J}}}}^{2} = \hat{\vec{L}}^2 + \hat{\vec{S}}^2 + \underbrace{\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}} + \hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}}}_{2\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{L}}^2 - \hat{\vec{S}}^2\right)$$

$$\rightarrow \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \text{radial} \cdot \frac{1}{2}\left(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{S}}^2\right)$$

$\hat{H}_0$ ↙ Radialteil ↘ $\hat{\vec{L}}^2$

$$\Rightarrow \quad [\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{\vec{S}}^2] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{\vec{J}}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{\vec{J}}_k] = 0$$

→ Simultane Eigenzustände $|(l\,s)\,j\,j_z\rangle$

und nicht $|l m, s m_s\rangle$

→ $\hat{H}$ ist rotationsinvariant unter gleichzeitiger Rotation im Orts- und Spinraum → $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$