

\* DAS WASSERSTOFFATOM IN ELEKTROMAGNETISCHEN FELDER

\* Wir wollen nun unsere Theorie des Wasserstoffatoms erweitern, um die Wechselwirkung mit einem äußeren elektromagnetischen Feld zu beschreiben.

\* Quellen wir zuerst die klassische Theorie.

- Sei  $\vec{E} \equiv$  Elektrisches Feld
- $\vec{B} \equiv$  Magnetisches Feld

Die Wechselwirkung eines punktförmigen Elektrons der Masse  $\mu$  mit einem elektromagnetischen Feld wird durch die Lorentzkraft beinhalten Bewegungsgleichung gegeben:

$$\mu \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \underbrace{-e \left[ \vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}(\vec{r}, t) \right]}_{\text{Lorentzkraft.}}$$

\* Aus der Theorie des Elektromagnetismus kennen wir

- \* Das skalare Potential  $\phi(\vec{r}, t)$
- \* Das Vektorpotential  $\vec{A}(\vec{r}, t)$

wobei:

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, t)$$

Bemerkung: die skalare- und Vektorpotentiale sind nicht ganz definiert, da

$$\left. \begin{aligned} \vec{A}' &= \vec{A} - \vec{\nabla} f \\ \phi' &= \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \end{aligned} \right\} \text{wobei } f \text{ ist eine Funktion}$$

erfüllen auch  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}'$   
 $\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}'}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi'$

↖ Eichtransformationen

\* In der Hamilton-Mechanik sind die Bewegungsgleichungen

$$\frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{dx}{dt} \quad \text{und} \quad \frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{dp_x}{dt}$$

wobei  $H \equiv$  Hamilton-Funktion.

\* In Abwesenheit von Feldern  $H_0 = \frac{p^2}{2\mu}$

wie ist  $H$  wenn Felder dabei sind?

\* Man kann beweisen, dass wenn es Felder gibt:

$$H = \frac{1}{2\mu} \left[ \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right]^2 - e\phi(\vec{r}, t)$$

\* Wir werden das für ein Beispiel beweisen, aber es ist im Allgemeinen gültig. Sei  $\vec{A} = (A_x, A_y, 0)$ ;  $A_x, A_y$  z-unabhängig.

$$H = \frac{1}{2\mu} \left( p_x + \frac{e}{c} A_x \right)^2 + \frac{1}{2\mu} \left( p_y + \frac{e}{c} A_y \right)^2 - e\phi$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{1}{\mu} \left( p_x + \frac{e}{c} A_x \right) = \frac{dx}{dt} = v_x$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial x} &= \frac{1}{\mu} \left( \frac{e}{c} \right) \frac{\partial A_x}{\partial x} \left( p_x + \frac{e}{c} A_x \right) + \frac{1}{\mu} \left( \frac{e}{c} \right) \frac{\partial A_y}{\partial x} \left( p_y + \frac{e}{c} A_y \right) - e \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ &= \frac{e}{c} \frac{\partial A_x}{\partial x} v_x + \frac{e}{c} \frac{\partial A_y}{\partial x} v_y - e \frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{d}{dt} p_x \end{aligned}$$

Aber  $p_x = \mu v_x - \frac{e}{c} A_x$

$$\begin{aligned} \text{Dann} \quad \frac{dp_x}{dt} &= \mu \frac{dv_x}{dt} = \frac{e}{c} \frac{dA_x}{dt} = \mu \frac{d^2 x}{dt^2} - \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial A_y}{\partial y} \right) \\ &= -\frac{e}{c} \frac{\partial A_x}{\partial x} v_x - \frac{e}{c} \frac{\partial A_y}{\partial x} v_y + e \frac{\partial \phi}{\partial x} \end{aligned}$$

$$\text{Dann} \quad \mu \frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_x}{\partial t} \right) + e \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{e}{c} \left( \frac{\partial}{\partial x} A_y - \frac{\partial}{\partial y} A_x \right) v_y$$

Aber  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \vec{u}_z = B \vec{u}_z$

und damit  $\vec{u} \times \vec{B} = B u_y \vec{u}_x \neq B u_x \vec{u}_y$

Also  $B u_y = (\vec{v} \times \vec{B})_x$

Dann 
$$\mu \frac{d^2 x}{dt^2} = -e \left[ -\frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} - \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] - \frac{e}{c} B u_y$$

$$= -e E_x - \frac{e}{c} (\vec{v} \times \vec{B})_x$$

Man kann genau das gleiche für die y-Richtung machen:

$$\mu \frac{d^2 y}{dt^2} = -e E_y - \frac{e}{c} (\vec{v} \times \vec{B})_y$$

Also 
$$\mu \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -e \vec{E} - \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{B}$$
 also die Bewegungsgleichung mit der Lorentzkraft, wie wir wollten.

\* Also 
$$H = \frac{1}{2\mu} \left[ \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 - e\phi$$

Quantenmechanisch  $\vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$ , also

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left[ -i\hbar \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 - e\phi$$

$$\frac{1}{2\mu} (-i\hbar \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A})^2 \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi - \frac{i\hbar e}{\mu c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi - \frac{i\hbar e}{2\mu c} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \psi + \frac{e^2}{2\mu c^2} \vec{A}^2 \psi$$

Wir wählen die sogen. Coulombgleichung:  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$

Also 
$$(\hat{H} + e\phi) \psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi - \frac{i\hbar e}{\mu c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi + \frac{e^2}{2\mu c^2} \vec{A}^2 \psi$$

Für ein konstantes homogenes Feld  $\vec{B}$ , können wir annehmen

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{B} \quad \rightarrow \quad \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}$$

Also

$$[\hat{H} + e\phi] \psi = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu} \psi + \underbrace{\frac{i e \hbar}{2\mu c} (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla}}_{\text{2. Glied}} \psi + \underbrace{\frac{e^2}{8\mu c^2} (\vec{r} \times \vec{B})^2}_{\text{3. Glied}} \psi$$

Das 2. Glied ist

$$\begin{aligned} \frac{i e \hbar}{2\mu c} (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla} \psi &= -\frac{i e \hbar}{2\mu c} \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \vec{\nabla}) \psi = \frac{e}{2\mu c} \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \hat{p}) \psi \\ &= \frac{e}{2\mu c} \vec{B} \cdot \hat{L} \psi \quad \uparrow \\ &\quad \text{B in die z-Richtung} \end{aligned}$$

Das 3. Glied ist:

$$\frac{e^2}{8\mu c^2} (\vec{r} \times \vec{B})^2 \psi = \frac{e^2}{8\mu c^2} [r^2 B^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2] \psi \quad \downarrow = \frac{e^2 B^2}{8\mu c^2} (x^2 + y^2) \psi$$

\* Wir wollen nun die Größenordnung der beiden Glieder mit einander vergleichen.

- Für  $\langle L_z \rangle$  setzen wir  $\hbar$
- Für  $\langle x^2 + y^2 \rangle$  setzen wir  $a_0^2$

$$\text{Also } \frac{\text{GLIED 3}}{\text{GLIED 2}} \sim \frac{\frac{e^2 B^2}{8\mu c^2} a_0^2}{\frac{e}{2\mu c} \hbar} = \frac{1}{4} \frac{e^2}{\pi c} \frac{B}{e/a_0^2} = \frac{\cancel{\alpha}}{4} \frac{B}{e/a_0^2} \approx \frac{B}{9 \times 10^9 \text{ Gauss}}$$

Für normale Felder  $B \ll 9 \times 10^9$  GAUSS, also GLIED 3  $\ll$  GLIED 2

• Auf ähnliche Weise können wir den in B linearen Term (Glieder) mit der Coulombschen Potentialenergie des Wasserstoffatoms ( $\sim e^2/a_0$ ) vergleichen:

GLIED 2 ~  $\frac{e}{2\mu c} \hbar B = \frac{\alpha}{2} \frac{B}{e/a_0} \approx \frac{B}{5 \times 10^9 \text{ Gau\ss}}$

COULOMB.

Deswegen wird das 2. Glied die atomaren Energieniveaus nur als eine sehr schwache Störung beeinflussen (Wir werden später die Störungstheorie studieren)

Wir wollen zunächst allein den ungestörten Term betrachten. Der für den Fall  $\vec{B}=0$  geltende Hamilton-Operator

$$\hat{H}_0 = \frac{P^2}{2m} + V_{\text{Coulomb}}(r)$$

wird nun erweitert  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$

wobei  $\hat{H}_1 = \frac{e}{2\mu c} B \hat{L}_z$  }  $\hat{H}_1 = \omega_L \hat{L}_z$

Sei  $\omega_L = \frac{eB}{2\mu c} \Rightarrow$  Larmor-Frequenz

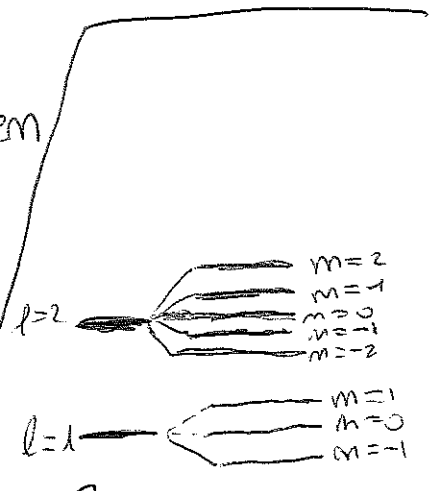
Die Eigenzustände des Wasserstoffatoms waren

$$\Psi_{n\ell m}(\vec{r}) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Wir müssen uns erinnern, dass  $\hat{L}_z Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m}$

Also  $\hat{H}_1 \Psi_{n\ell m}(\vec{r}) = \hbar \omega_L m \Psi_{n\ell m}(\vec{r})$

Da  $\hat{H}_0 \Psi_{n\ell m}(\vec{r}) = -\frac{\mu c^2}{2} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \Psi_{n\ell m}(\vec{r})$



Dann sind die Eigenwerte der Form:

$$E = -\frac{\mu c^2}{2} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} + \hbar \omega_L m$$

← Normaler Zeeman-Effekt

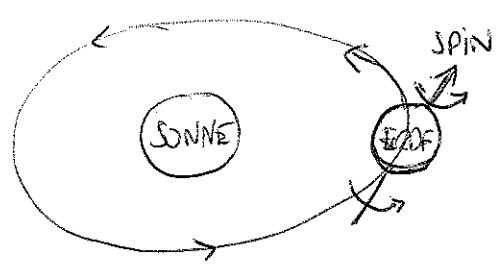
Die bestehende ~~2~~ Niveaus mit ihren  $(2\ell+1)$ -fachen Entartung werden also nun in  $(2\ell+1)$  äquidistante Niveaus aufgespalten. Diese Aufspaltung nennt man den normalen Zeeman-Effekt

• DER SPIN

• Wir haben schon eine einfache Theorie des Wasserstoffatoms gelernt. Es ist aber nicht möglich eine tiefgehende Diskussion um Atome ohne Einbeziehung des Elektronenspins. Wir werden nun die Idee um Spin einführen.

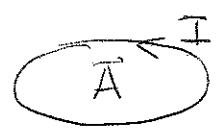
\* DER STERN-GERLACH-VERSUCH

\* Nehmen wir ein klassisches System, nämlich die Erde um die Sonne. Die Erde hat Drehimpuls, weil die um die Sonne kreist, aber auch weil die um der Erdeachse dreht



\* 1922 führten O. Stern und W. Gerlach ein Experiment, um zu bestimmen ob die Elektronen (wie die Erde) auch ein intrinsisches Spin haben.

\* Aber bevor wir den Stern-gerlach-Versuch einführen, sollten wir vielleicht ein Paar Ideen der Elektrodynamik auffrischen. Denken wir zuerst an einer Spule die mit einer Intensität  $I$  (Strom) durchgeflossen wird. Die Fläche der Spule ist  $\vec{A}$ .

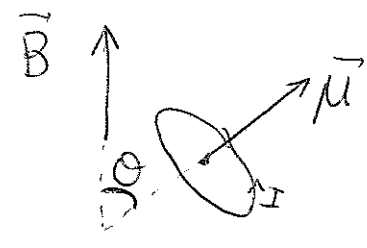


Die Spule hat ein assoziiertes magnetisches Moment  $\vec{\mu} = I \vec{A}$ .

\* Wenn es ein Magnetfeld  $\vec{B}$  gibt, erfährt die Spule

eine magnetische Energie

$$E_{MAG} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu B \cos \theta$$



Wenn  $\vec{B}$  inhomogen ist (z.B.  $\vec{B} = \vec{B}(z)$ ) dann spürt die Spule eine Kraft

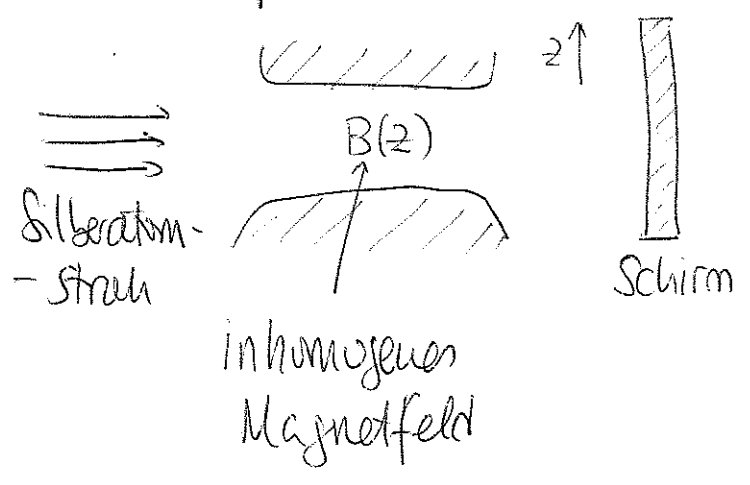
$$\vec{F} = -\vec{\nabla} E_{MAG} = \mu \frac{dB}{dz} \cos \theta \hat{z}$$

\* Wir können irgendwie den spinnenden Elektron wie eine Spule mit einem magnetischen Moment  $\vec{\mu}$  denken.



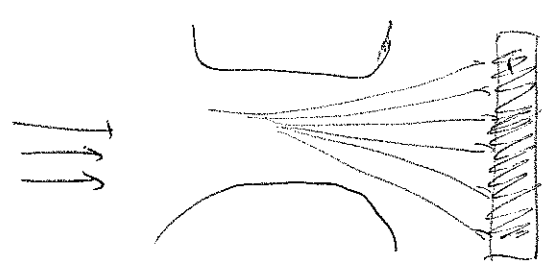
\* Klassisch betrachtet wäre die Verteilung der möglichen Richtungen von  $\vec{\mu}$  ganz beliebig (also  $\theta$  wäre beliebig). Das war aber nicht was Stern und Gerlach beobachteten.

\* In dem Stern-gerlach versuch wurden Silberatome aus einem Atomstrahl durch ausgesampt und kollimiert. Dieser Strahl ging durch ein homogenes Magnetfeld. Auf einem Schirm wurden die Atome detektiert.



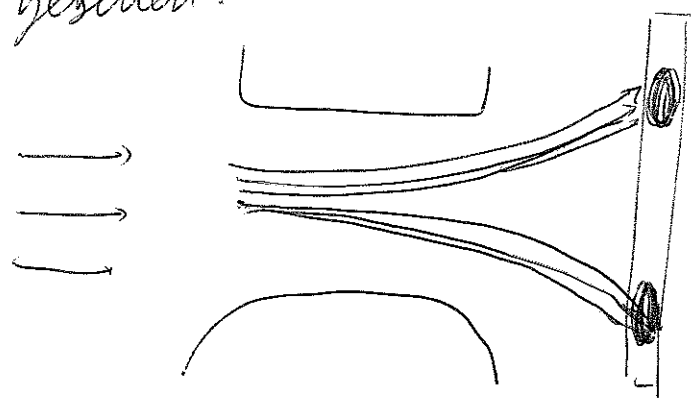
ging durch ein homogenes Magnetfeld. Auf einem Schirm wurden die Atome detektiert.

• Wenn die Spinneude Elektronen klassisch wären, hätte man eine kontinuierliche Verteilung auf dem Schirm gesehen, weil



alle Orientierungen um  $\vec{\mu}$  gleich möglich wären.

\* Aber das war nicht was beobachtet wurde. Di haben folgenden gesehen:



Die haben ganz deutlich 2 abgetrennte Flecken gesehen. Die Teilchen gingen entweder nach oben oder nach unten.

Ganz deutlich war die Orientierung des Magnetischen Moments quantisiert.

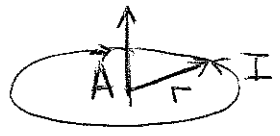
\* In einer Spule  $\vec{\mu} = I \cdot \vec{A}$

$I = \frac{e \vec{u}}{2\pi r} \Rightarrow$  Intensität

$|\vec{A}| = \pi r^2$

$\left. \begin{array}{l} \vec{\mu} = I \cdot \vec{A} \\ I = \frac{e \vec{u}}{2\pi r} \\ |\vec{A}| = \pi r^2 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \mu = \frac{e}{2m} m v r \\ = \frac{e}{2m} L \end{array}$

↑  
Drehimpuls.



\* Ähnlicherweise für ein Elektron, der intrinsische Magnetische Moment  $\vec{\mu}$  ist verknüpft mit einem intrinsischen Drehimpuls  $\rightarrow$  Spin-Drehimpuls  $\vec{S}$ .



\* In dem Stern-Gerlach versucht mit  $\vec{B} = B(z) \hat{z}$ ,  
 wir messen die Orientierung um  $\vec{\mu}$  in Vergleich zu  $\vec{B}$ ,  
 also wir messen die Projektion  $\mu_z$ , und damit wir  
 messen  $S_z$ .

\* Also assoziiert mit der Messung um Stern und Gerlach  
 können wir ein Operator  $\hat{S}_z$  einführen. Die Messung  
 zeigt ganz deutlich, daß dieser Operator 2 verschiedene  
 Eigenzustände  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$  (also  $|OBER\rangle$  und  $|UNTEN\rangle$ )

hat:

$$\hat{S}_z |+\rangle = a |+\rangle \quad (\text{Diracsche-Schreibweise})$$

$$\hat{S}_z |-\rangle = -a |-\rangle$$

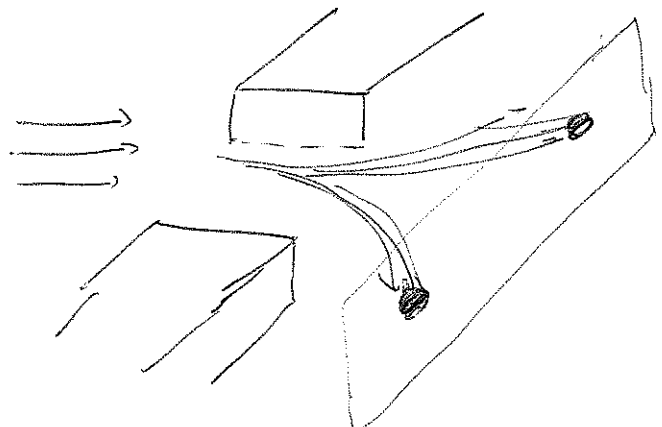
wobei  $a$  ist eine gewisse Konstante (mit Einheiten von Drehimpuls)  
 die wir sofort bestimmen werden.

\* Wir können also  $\hat{S}_z$  so schreiben:

$$\hat{S}_z = a (|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|)$$

*Bemerkung: wir verstehen  
 daß  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$  orthogonal  
 sind, also  $\langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1$   
 und  $\langle +|-\rangle = \langle -|+\rangle = 0$*

\* Nehmen wir nun anstatt  $\vec{B} = B(z) \hat{z}$ ,  $\vec{B} = B(x) \hat{x}$ .  
 Dann würden wir genau das gleiche bekommen aber in  $x$ :



- Diese Messung ist nun  
 eine Messung um  $S_x \equiv$   
 $\equiv$  Komponente des Spin-Drehimpuls  
 in der  $x$ -Richtung

\* Also für diese neue Messung haben wir auch ein Operator  $\hat{S}_x$  und 2 neue Eigenzustände  $|+\rangle_x, |-\rangle_x$ , wobei

$$\hat{S}_x |+\rangle_x = a |+\rangle_x$$

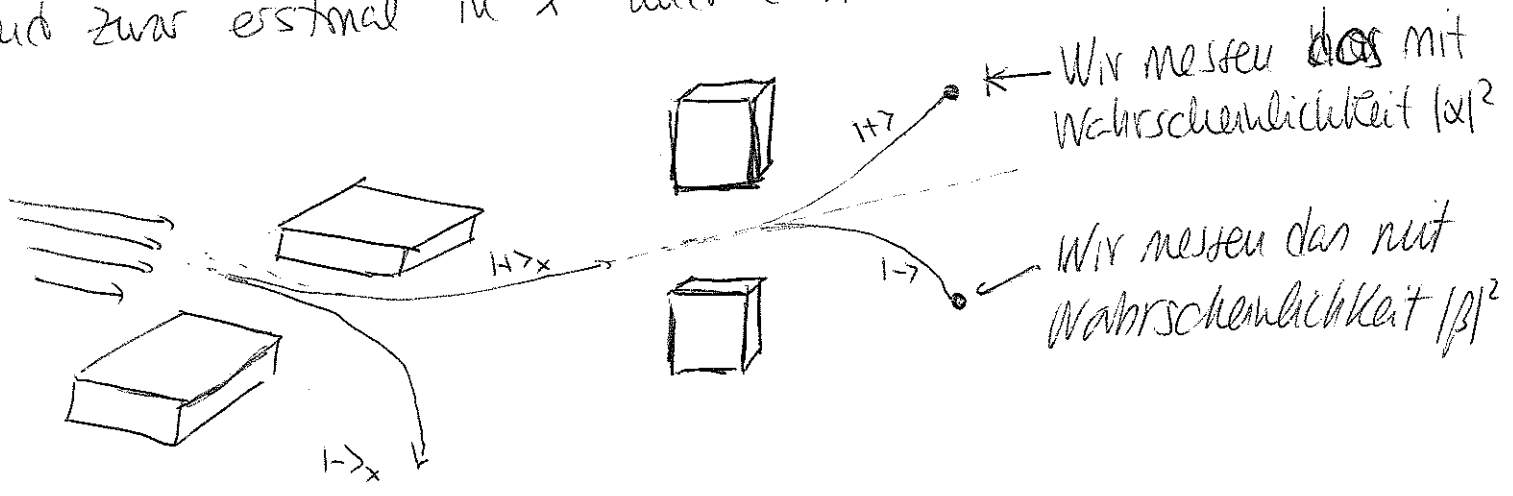
$$\hat{S}_x |-\rangle_x = -a |-\rangle_x$$

$$\text{Also } \hat{S}_x = a [|+\rangle_x \langle +| - |-\rangle_x \langle -|]$$

\* Wir können die Eigenzustände  $| \pm \rangle_x$  als Linearkombination von  $| \pm \rangle$  ausdrücken:

$$|+\rangle_x = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle$$

\* Versuchen wir die Bedeutung von  $\alpha$  und  $\beta$  zu verstehen. Machen wir nun ein doppeltes Stern-gerade-Experiment, und zwar erstmal in  $x$  und dann in  $z$ :



Man bekommt  $|\alpha|^2 = |\beta|^2$

$$\text{Außerdem } \langle + | + \rangle_x = 1 = |\alpha|^2 + |\beta|^2$$

Also  $|\alpha|^2 = |\beta|^2 = \frac{1}{2}$ , und damit

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} ( |+\rangle + e^{i\delta_x} |-\rangle )$$

wobei  $\delta_x$  ist eine Phase.

Da  $\langle -1+ \rangle_x = 0 \rightarrow |-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |+\rangle - e^{i\delta_x} |-\rangle ]$

\* Wir können das gleiche mit der y-Richtung machen ( $\hat{S}_y$ )

$\hat{S}_y | \pm \rangle_y = \pm a | \pm \rangle_y \rightarrow \hat{S}_y = a ( |+\rangle_y \langle +| - |-\rangle_y \langle -| )$

$| \pm \rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |+\rangle \pm e^{i\delta_y} |-\rangle ]$

\* Wir haben schon gesehen daß  $| \alpha |^2 = | \langle +1+ \rangle_x |^2 = 1/2$

Da der Raum isotrop ist, das ist gültig auch für

$| \langle +1+ \rangle_x |^2 = 1/2$

Aber:

$\langle +1+ \rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [ \langle +1 + e^{-i\delta_y} \langle -1 | ] [ |+\rangle + e^{i\delta_x} |-\rangle ]$

$= \frac{1}{2} [ 1 + e^{i(\delta_x - \delta_y)} ]$

$| \langle +1+ \rangle_x | = \frac{1}{2} | 1 + e^{i(\delta_x - \delta_y)} | = \frac{1}{\sqrt{2}}$

then:  $[ 1 + \cos(\delta_x - \delta_y) ]^2 + \sin^2(\delta_x - \delta_y) = 2$

Also  $\rightarrow \cos(\delta_x - \delta_y) = 0 \rightarrow \delta_x - \delta_y = \pm \pi/2$

\* Wir wählen (ohne Verlust an Allgemeinheit)  $\delta_x = 0, \delta_y = \pi/2$

und damit  $| \pm \rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |+\rangle \pm |-\rangle ]$

$| \pm \rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |+\rangle \pm i |-\rangle ]$

\* Damit können wir  $\hat{S}_x, \hat{S}_y$  und  $\hat{S}_z$  so schreiben:

$$\hat{S}_z = a (|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|)$$

$$\hat{S}_x = a (|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|)$$

$$\hat{S}_y = a (-i|+\rangle\langle-| + i|-\rangle\langle+|)$$

\* Wir haben schon gezeigt, daß  $\vec{S}$  ist ein Drehimpuls.

Also wenn  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  die drei Komponenten eines Drehimpuls sind, dann z.B.

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_z] = -i\hbar \hat{S}_y$$

Aber:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_z] = \hat{S}_x \hat{S}_z - \hat{S}_z \hat{S}_x = a^2 \left\{ \begin{aligned} &[|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|][|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|] \\ &- [ |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| ][ |+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| ] \end{aligned} \right\}$$

$$= a^2 [ (|-\rangle\langle+| - |+\rangle\langle-|) - (|+\rangle\langle-| - |-\rangle\langle+|) ]$$

$$= 2 a^2 [ |-\rangle\langle+| - |+\rangle\langle-| ] = -2ia [ a [ -i|+\rangle\langle-| + i|-\rangle\langle+| ] ]$$

$$= -2ia \hat{S}_y$$

Damit bekommen wir  $a = \frac{\hbar}{2}$ , und damit erhalten

wir die endgültige Form der Spin Operatoren:

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &= \frac{\hbar}{2} ( |+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+| ) \\ \hat{S}_y &= \frac{\hbar}{2} ( -i|+\rangle\langle-| + i|-\rangle\langle+| ) \\ \hat{S}_z &= \frac{\hbar}{2} ( |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| ) \end{aligned}$$

\* Also, der Spin-Drehimpuls des Elektrons kann  $\pm \hbar/2$  sein. Also einer fraktionaler Spin.  $\hat{S}^2 |\pm\rangle = \hbar^2 (\frac{1}{2}) [\frac{1}{2} + 1] |\pm\rangle = \frac{3\hbar^2}{4} |\pm\rangle$

\* Es ist viel bequemer in der Matrixdarstellung zu arbeiten. (die Matrixdarstellung der Quantenmechanik haben wir schon gesehen).

Sei  $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  und  $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

die 2 Vektoren der Basis von Eigenzustände von  $\hat{S}_z$ .

In dieser Basis:

$\hat{S}_z \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  (weil  $\hat{S}_z |\pm\rangle = \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle$ )

$\hat{S}_x \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  (weil  $\hat{S}_x |-\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle$ )  
z.B.

$\hat{S}_y \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

Wir können nun die sogen. Pauli-Matrizen einführen:

$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

und damit  $\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_j$   $j = x, y, z$

Die Pauli-Matrizen sind sehr nützlich, und die erfüllen:

$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1}$  (also  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ )

$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0$  (für alle  $i = x, y, z$  und  $j \neq i$ )

\* Alle mögliche Spin-Zustände sind also der Form:

$$|X\rangle = \alpha_+ |+\rangle + \alpha_- |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}$$

\* Wir werden später die Effekte des Spins in dem Wasserstoffatom studieren.

Betrachten wir nun was passiert wenn ein Elektron im freien Raum in Präsenz von einem Magnetfeld ist.

Der magnetische Moment ist (wie schon erwähnt) mit  $\vec{S}$  verknüpft

$$\vec{\mu} = -\frac{e\hbar}{2mc} \vec{S} \quad \text{wobei } g \approx 2 \text{ ist das } \underline{\text{gyromagnetische}} \underline{\text{Verhältnis}}$$

( $m =$  Masse des Elektrons)

\* Nehmen wir ein lokalisiertes Elektron (d.h. der Elektron kann sich nicht bewegen, und damit die kinetische Energie  $\approx 0$ )  
(Bemerkung: das ist eine gute Näherung in manchen Festkörper-Systeme). Dann ist der Hamilton Operator:

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (\text{ich erinnere euch die Definition von EMAGNETISCH})$$

$$\text{Also, sei } \vec{B} = B \hat{z} \longrightarrow \hat{H} = -\mu_z B_z = \frac{e\hbar}{2mc} B \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z$$

Die Eigenzustände von  $\hat{H}$  sind also

$$\hat{H} |\pm\rangle = \pm \frac{e\hbar B \hbar}{4mc} |\pm\rangle \approx \pm \frac{eB\hbar}{2mc} |\pm\rangle$$

$$\text{Sei } \omega = \frac{eB}{mc} \equiv \underline{\underline{\text{Larmor-Frequenz}}}$$

dann:  $\hat{H} | \pm \rangle = \pm \frac{\hbar\omega}{2} | \pm \rangle$

\* Sagen wir, daß am Anfang ( $t=0$ )  $|\psi(0)\rangle = |+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$   
wie ist  $|\psi(t)\rangle$ ?

Ganz einfach:  $|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+(0) e^{i\omega t/2} \\ \psi_-(0) e^{-i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\frac{3\omega}{2}t} \\ e^{-i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \text{* Damit } \langle \psi(t) | \hat{S}_x | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega}{2}t} & e^{i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\frac{3\omega}{2}t} \\ e^{-i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \cos \omega t \end{aligned}$$

und ähnlicherweise:

$$\langle \psi(t) | \hat{S}_y | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \omega t$$

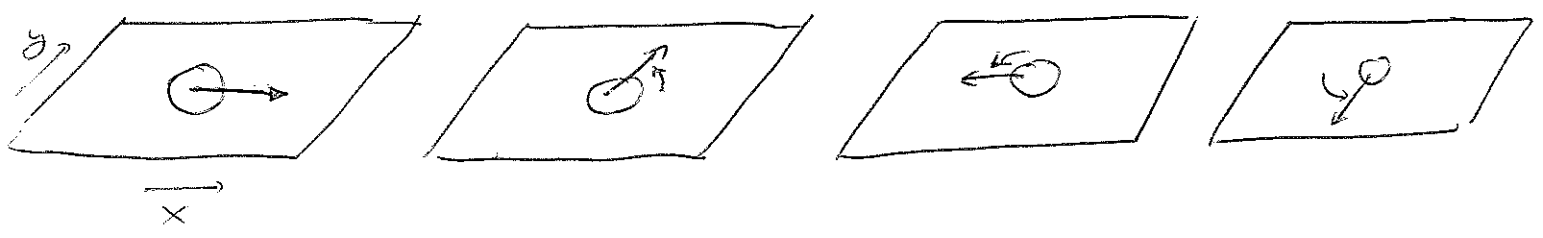
$$\text{Also } \langle \vec{S}(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} (\cos \omega t, \sin \omega t, 0)$$

$t=0$

$t = \frac{\pi}{2\omega}$

$t = \frac{\pi}{\omega}$

$t = \frac{3\pi}{\omega}$



Das ist die Larmor Präzession.