Spin- und Ortsraum-Wellenfunktion

- Der Spin „lebt" in einem unabhängigen abstrakten Raum.

Spin- und Ortsraum-Wellenfunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Der Spin „lebt" in einem unabhängigen abstrakten Raum.
- Gesamtwellenfunktion, z.B. eines Elektrons ($s = \frac{1}{2}$): $\Psi_{ges}(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t)\chi(t)$
  - $\psi(\vec{x}, t)$ Ortsraum-Wellenfunktion (wie bisher)
  - $\chi(t) = \begin{pmatrix} c_\uparrow(t) \\ c_\downarrow(t) \end{pmatrix}$ Spinraum-Wellenfunktion

Spin- und Ortsraum-Wellenfunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Der Spin „lebt" in einem unabhängigen abstrakten Raum.
- Gesamtwellenfunktion, z.B. eines Elektrons ($s = \frac{1}{2}$): $\Psi_{ges}(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t)\chi(t)$
  - $\psi(\vec{x}, t)$ Ortsraum-Wellenfunktion (wie bisher)
  - $\chi(t) = \begin{pmatrix} c_\uparrow(t) \\ c_\downarrow(t) \end{pmatrix}$ Spinraum-Wellenfunktion
- Quantenzahlen des Wasserstoff-Atoms: $(\underbrace{n, \ell, m}_{Ort}, \underbrace{m_s}_{Spin})$ (+ Kernspin)

Spin- und Ortsraum-Wellenfunktion

- Der Spin „lebt" in einem unabhängigen abstrakten Raum.
- Gesamtwellenfunktion, z.B. eines Elektrons ($s = \frac{1}{2}$): $\Psi_{ges}(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t)\chi(t)$
  - $\psi(\vec{x}, t)$ Ortsraum-Wellenfunktion (wie bisher)
  - $\chi(t) = \begin{pmatrix} c_\uparrow(t) \\ c_\downarrow(t) \end{pmatrix}$ Spinraum-Wellenfunktion
- Quantenzahlen des Wasserstoff-Atoms: $(\underbrace{n, \ell, m}_{Ort}, \underbrace{m_s}_{Spin})$ (+ Kernspin)
- Bisher enthielt $\hat{H}$ keine Spin-Operatoren $\Rightarrow$ $m_s = \pm\frac{1}{2}$ entartet

Spin- und Ortsraum-Wellenfunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Der Spin „lebt" in einem unabhängigen abstrakten Raum.
- Gesamtwellenfunktion, z.B. eines Elektrons ($s = \frac{1}{2}$): $\Psi_{ges}(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t)\chi(t)$
  - $\psi(\vec{x}, t)$ Ortsraum-Wellenfunktion (wie bisher)
  - $\chi(t) = \begin{pmatrix} c_\uparrow(t) \\ c_\downarrow(t) \end{pmatrix}$ Spinraum-Wellenfunktion
- Quantenzahlen des Wasserstoff-Atoms: $(\underbrace{n, \ell, m}_{Ort}, \underbrace{m_s}_{Spin})$ (+ Kernspin)
- Bisher enthielt $\hat{H}$ keine Spin-Operatoren $\Rightarrow$ $m_s = \pm\frac{1}{2}$ entartet
- Aufhebung der Entartung:
  - externes Magnetfeld: $V \sim \vec{B} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\left(B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z\right)$

Spin- und Ortsraum-Wellenfunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Der Spin „lebt” in einem unabhängigen abstrakten Raum.
- Gesamtwellenfunktion, z.B. eines Elektrons ($s = \frac{1}{2}$): $\Psi_{ges}(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t)\chi(t)$
  - $\psi(\vec{x}, t)$ Ortsraum-Wellenfunktion (wie bisher)
  - $\chi(t) = \begin{pmatrix} c_\uparrow(t) \\ c_\downarrow(t) \end{pmatrix}$ Spinraum-Wellenfunktion
- Quantenzahlen des Wasserstoff-Atoms: $(\underbrace{n, \ell, m}_{Ort}, \underbrace{m_s}_{Spin})$ (+ Kernspin)
- Bisher enthielt $\hat{H}$ keine Spin-Operatoren $\Rightarrow$ $m_s = \pm\frac{1}{2}$ entartet
- Aufhebung der Entartung:
  - externes Magnetfeld: $V \sim \vec{B} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\left(B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z\right)$
  - „Spin-Bahn-Kopplung”: $V_{LS} \sim \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$ ($\rightarrow$ „Feinstruktur”)

5.3 Addition von Drehimpulsen am Beispiel des Spins

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: Elektron und Proton im Grundzustand des H-Atoms

5.3 Addition von Drehimpulsen am Beispiel des Spins

- Beispiel: Elektron und Proton im Grundzustand des H-Atoms
- Unabhängige Spin-Operatoren $\hat{\vec{S}}^{(e)}$ und $\hat{\vec{S}}^{(p)}$

5.3 Addition von Drehimpulsen am Beispiel des Spins

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: Elektron und Proton im Grundzustand des H-Atoms
- Unabhängige Spin-Operatoren $\hat{\vec{S}}^{(e)}$ und $\hat{\vec{S}}^{(p)}$
- Beide Spins können gleichzeitig gemessen werden. $\Rightarrow$ $[\hat{S}_i^{(e)}, \hat{S}_j^{(p)}] = 0$

5.3 Addition von Drehimpulsen am Beispiel des Spins

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: Elektron und Proton im Grundzustand des H-Atoms
- Unabhängige Spin-Operatoren $\hat{\vec{S}}^{(e)}$ und $\hat{\vec{S}}^{(p)}$
- Beide Spins können gleichzeitig gemessen werden. $\Rightarrow$ $[\hat{S}_i^{(e)}, \hat{S}_j^{(p)}] = 0$
- Def.: $\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}^{(e)} + \hat{\vec{S}}^{(p)}$ „Gesamt-Spin"

5.3 Addition von Drehimpulsen am Beispiel des Spins

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: Elektron und Proton im Grundzustand des H-Atoms
- Unabhängige Spin-Operatoren $\hat{\vec{S}}^{(e)}$ und $\hat{\vec{S}}^{(p)}$
- Beide Spins können gleichzeitig gemessen werden. $\Rightarrow \quad [\hat{S}_i^{(e)}, \hat{S}_j^{(p)}] = 0$
- Def.: $\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}^{(e)} + \hat{\vec{S}}^{(p)}$ „Gesamt-Spin"
- Man kann nachrechnen:
  - $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z \,, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x \,, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$
  - $[\hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_x] = [\hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_y] = [\hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_z] = 0$

d.h. $\hat{\vec{S}}$ ist wirklich ein Spin-Operator!

- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(e)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(e)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_e\rangle_e$
- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(p)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(p)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$

- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(e)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(e)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_e\rangle_e$
- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(p)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(p)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$
- unabhängige Spin-Räume $\quad \Rightarrow \quad \hat{S}_i^{(e)}$ wirkt nicht auf $|\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$ und umgekehrt.

- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(e)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(e)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_e\rangle_e$
- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(p)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(p)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$
- unabhängige Spin-Räume $\Rightarrow$ $\hat{S}_i^{(e)}$ wirkt nicht auf $|\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$ und umgekehrt.
- Wie sehen die gemeinsamen Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^2$ und $\hat{S}_z$ aus?

- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(e)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(e)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_e\rangle_e$
- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(p)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(p)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$
- unabhängige Spin-Räume $\Rightarrow$ $\hat{S}_i^{(e)}$ wirkt nicht auf $|\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$ und umgekehrt.
- Wie sehen die gemeinsamen Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^2$ und $\hat{S}_z$ aus?
- Ansatz: Produktzustände $|m_e, m_p\rangle \equiv |\frac{1}{2}, m_e\rangle_e \otimes |\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$

  $\rightarrow$ vier Basiszustände: $|\uparrow,\uparrow\rangle, \quad |\uparrow,\downarrow\rangle, \quad |\downarrow,\uparrow\rangle, \quad |\downarrow,\downarrow\rangle$

- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(e)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(e)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_e\rangle_e$
- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(p)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(p)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$
- unabhängige Spin-Räume $\Rightarrow$ $\hat{S}_i^{(e)}$ wirkt nicht auf $|\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$ und umgekehrt.
- Wie sehen die gemeinsamen Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^2$ und $\hat{S}_z$ aus?
- Ansatz: Produktzustände $|m_e, m_p\rangle \equiv |\frac{1}{2}, m_e\rangle_e \otimes |\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$

  $\rightarrow$ vier Basiszustände: $|\uparrow,\uparrow\rangle$, $|\uparrow,\downarrow\rangle$, $|\downarrow,\uparrow\rangle$, $|\downarrow,\downarrow\rangle$
- $\hat{S}_z|m_e, m_p\rangle = \hat{S}_z^{(e)}|m_e, m_p\rangle + \hat{S}_z^{(p)}|m_e, m_p\rangle = (m_e + m_p)\,\hbar|m_e, m_p\rangle$

- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(e)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(e)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_e\rangle_e$
- gem. Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^{(p)\,2}$ und $\hat{S}_z^{(p)}$: $\quad |\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$
- unabhängige Spin-Räume $\Rightarrow$ $\hat{S}_i^{(e)}$ wirkt nicht auf $|\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$ und umgekehrt.
- Wie sehen die gemeinsamen Eigenzustände von $\hat{\vec{S}}^2$ und $\hat{S}_z$ aus?
- Ansatz: Produktzustände $|m_e, m_p\rangle \equiv |\frac{1}{2}, m_e\rangle_e \otimes |\frac{1}{2}, m_p\rangle_p$

  $\rightarrow$ vier Basiszustände: $|\uparrow,\uparrow\rangle$, $|\uparrow,\downarrow\rangle$, $|\downarrow,\uparrow\rangle$, $|\downarrow,\downarrow\rangle$
- $\hat{S}_z|m_e, m_p\rangle = \hat{S}_z^{(e)}|m_e, m_p\rangle + \hat{S}_z^{(p)}|m_e, m_p\rangle = (m_e + m_p)\,\hbar|m_e, m_p\rangle$

$$\Rightarrow \quad \left\{ \begin{array}{ll} |\uparrow,\uparrow\rangle & m_s = 1 \\ |\uparrow,\downarrow\rangle,\ |\downarrow,\uparrow\rangle & m_s = 0 \\ |\downarrow,\downarrow\rangle & m_s = -1 \end{array} \right.$$

- Anwendung von Leiter-Operatoren:
  - $\hat{S}_+|\uparrow,\uparrow\rangle = \hat{S}_+^{(e)}|\uparrow,\uparrow\rangle + \hat{S}_+^{(p)}|\uparrow,\uparrow\rangle = 0 + 0 = 0$

    $\Rightarrow$ $|\uparrow,\uparrow\rangle$ ist der höchst-mögliche m_s-Zustand zu gegebenem s

    $\Rightarrow$ $|\uparrow,\uparrow\rangle = |s = 1, m_s = 1\rangle$

- Anwendung von Leiter-Operatoren:
  - $\hat{S}_+|\uparrow,\uparrow\rangle = \hat{S}_+^{(e)}|\uparrow,\uparrow\rangle + \hat{S}_+^{(p)}|\uparrow,\uparrow\rangle = 0 + 0 = 0$

    $\Rightarrow \quad |\uparrow,\uparrow\rangle$ ist der höchst-mögliche m_s-Zustand zu gegebenem s

    $\Rightarrow \quad |\uparrow,\uparrow\rangle = |s = 1, m_s = 1\rangle$
  - analog: $\quad \hat{S}_-|\downarrow,\downarrow\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad |\downarrow,\downarrow\rangle = |s = 1, m_s = -1\rangle$

- Anwendung von Leiter-Operatoren:
  - $\hat{S}_+|\uparrow,\uparrow\rangle = \hat{S}_+^{(e)}|\uparrow,\uparrow\rangle + \hat{S}_+^{(p)}|\uparrow,\uparrow\rangle = 0 + 0 = 0$

    $\Rightarrow$ $|\uparrow,\uparrow\rangle$ ist der höchst-mögliche m_s-Zustand zu gegebenem s

    $\Rightarrow$ $|\uparrow,\uparrow\rangle = |s = 1, m_s = 1\rangle$
  - analog: $\hat{S}_-|\downarrow,\downarrow\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad |\downarrow,\downarrow\rangle = |s = 1, m_s = -1\rangle$
  - $|s = 1, m_s = 0\rangle \sim \hat{S}_-|\uparrow,\uparrow\rangle = \hat{S}_-^{(e)}|\uparrow,\uparrow\rangle + \hat{S}_-^{(p)}|\uparrow,\uparrow\rangle = |\downarrow,\uparrow\rangle + |\uparrow,\downarrow\rangle$

- Anwendung von Leiter-Operatoren:
  - $\hat{S}_+ |\uparrow,\uparrow\rangle = \hat{S}_+^{(e)} |\uparrow,\uparrow\rangle + \hat{S}_+^{(p)} |\uparrow,\uparrow\rangle = 0 + 0 = 0$

    $\Rightarrow$ $|\uparrow,\uparrow\rangle$ ist der höchst-mögliche m_s-Zustand zu gegebenem s

    $\Rightarrow$ $|\uparrow,\uparrow\rangle = |s = 1, m_s = 1\rangle$
  - analog: $\hat{S}_- |\downarrow,\downarrow\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad |\downarrow,\downarrow\rangle = |s = 1, m_s = -1\rangle$
  - $|s = 1, m_s = 0\rangle \sim \hat{S}_- |\uparrow,\uparrow\rangle = \hat{S}_-^{(e)} |\uparrow,\uparrow\rangle + \hat{S}_-^{(p)} |\uparrow,\uparrow\rangle = |\downarrow,\uparrow\rangle + |\uparrow,\downarrow\rangle$

$\Rightarrow$ normierte Spin-1-Zustände („Triplett”):

$$
\begin{aligned}
|s = 1, m_s = 1\rangle &= |\uparrow,\uparrow\rangle \\
|s = 1, m_s = 0\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}} \big(|\uparrow,\downarrow\rangle + |\downarrow,\uparrow\rangle \big) \\
|s = 1, m_s = -1\rangle &= |\downarrow,\downarrow\rangle
\end{aligned}
$$

- Da wir ursprünglich zwei $m = 0$-Zustände hatten ($|\uparrow,\downarrow\rangle$ und $|\downarrow,\uparrow\rangle$), gibt es noch einen weiteren Basis-Zustand, der zu $|s=1, m_s=0\rangle$ orthogonal ist:

$$|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle\right)$$

- Da wir ursprünglich zwei $m = 0$-Zustände hatten ($|\uparrow,\downarrow\rangle$ und $|\downarrow,\uparrow\rangle$), gibt es noch einen weiteren Basis-Zustand, der zu $|s = 1, m_s = 0\rangle$ orthogonal ist:

$$|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle\right)$$

- Man kann nachrechnen: $\quad \hat{S}_+|\xi\rangle = \hat{S}_-|\xi\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad |\xi\rangle = |s = 0, m_s = 0\rangle$

- Da wir ursprünglich zwei $m = 0$-Zustände hatten ($|\uparrow,\downarrow\rangle$ und $|\downarrow,\uparrow\rangle$), gibt es noch einen weiteren Basis-Zustand, der zu $|s = 1, m_s = 0\rangle$ orthogonal ist:

  $$|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle\right)$$

- Man kann nachrechnen: $\hat{S}_+|\xi\rangle = \hat{S}_-|\xi\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad |\xi\rangle = |s = 0, m_s = 0\rangle$

$\Rightarrow$ normierter Spin-0-Zustände („Singulett"):

$$|s = 0, m_s = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle\right)$$

- Da wir ursprünglich zwei $m = 0$-Zustände hatten ($|\uparrow,\downarrow\rangle$ und $|\downarrow,\uparrow\rangle$), gibt es noch einen weiteren Basis-Zustand, der zu $|s = 1, m_s = 0\rangle$ orthogonal ist:

$$|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle\right)$$

- Man kann nachrechnen: $\hat{S}_+|\xi\rangle = \hat{S}_-|\xi\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad |\xi\rangle = |s = 0, m_s = 0\rangle$

$\Rightarrow$ normierter Spin-0-Zustände („Singulett"):

$$|s = 0, m_s = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle\right)$$

- also: zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen koppeln zu Spin 0 oder zu Spin 1
  - Spin-0-Singulett: antisymmetrisch unter Vertauschung
  - Spin-1-Triplett: symmetrisch unter Vertauschung