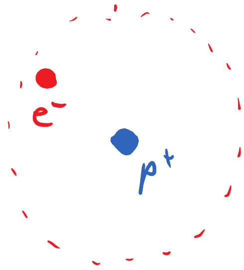
Das H-Atom im Magnetfeld

Monday, October 22, 2018 5:01 PM



^1H : $1\times p^+$ + $1\times e^-$

$I = \frac{1}{2}$ $\downarrow$ $m_I = \pm\frac{1}{2}$

$L = 0$; $S = \frac{1}{2}$ $\downarrow$ $m_S = \pm\frac{1}{2}$

$\Phi = \psi \cdot \chi$

Orts- Spin- Wellenfunktion

4 mögliche magnetische Eigenzustände : $|m_S, m_I\rangle$ - Basis

$\Longrightarrow$ $|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$, $|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$, $|-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$, $|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$

$|\alpha\alpha\rangle$, $|\alpha\beta\rangle$, $|\beta\alpha\rangle$, $|\beta\beta\rangle$

$|++\rangle$, $|+-\rangle$, $|-+\rangle$, $|--\rangle$

$|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$, $|4\rangle$

Zeeman-Wechselwirkung $E(m_j) = -\hbar\gamma m_j B_0$ $(j = S, I)$

$\Longrightarrow$ Zeeman-Aufspaltung $\boxed{\Delta E = \hbar\gamma B_0}$

γ: gyromagnetisches Verhältnis

$$\gamma = g \cdot \frac{q}{2m}$$

$$\Longrightarrow \gamma_S = g_e \cdot \frac{-e}{2m_e} = -\frac{g_e \cdot \mu_B}{\hbar}$$

$$\gamma_H = g_n^{1H} \cdot \frac{e}{2m_p} = \frac{g_n^{1H} \cdot \mu_n}{\hbar}$$

$\gamma_S = -2\pi \cdot 28.0\ \mathrm{GHz\ T^{-1}}$

$\gamma_H = 2\pi \cdot 42.6\ \mathrm{MHz\ T^{-1}}$ $\rightarrow$ $\frac{\gamma_S}{\gamma_H} = 659$!

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.274 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{J\ T^{-1}}$

Bohrsches Magneton

$g_e = 2.0023\ldots$

g-Wert des freien Elektrons

$g_n^{1H} = 5,586$

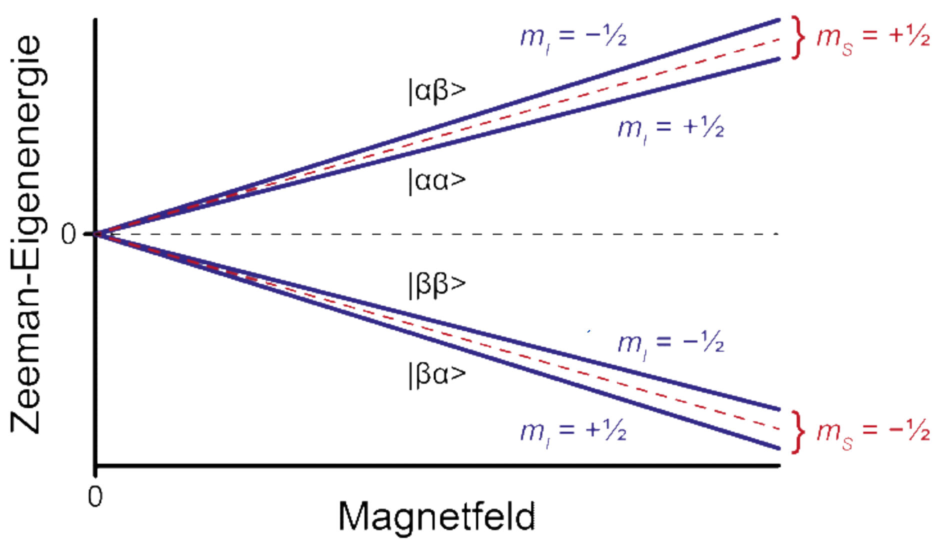
Kern-g-Faktor

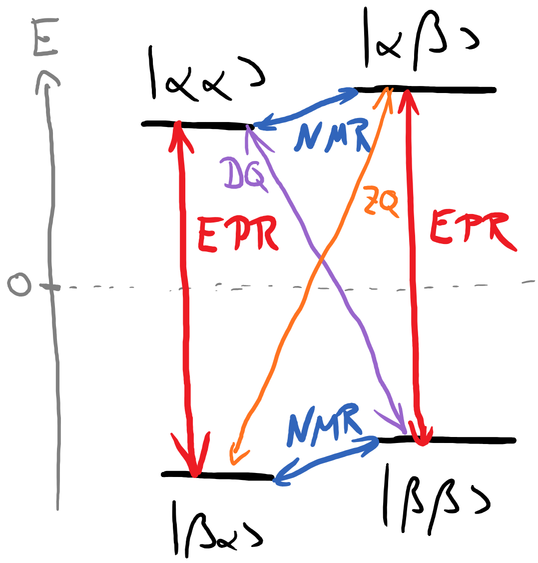
$\mu_n = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5.051 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{J\ T^{-1}}$

Kern-Magneton

Zeeman-Aufspaltung und Resonanzbedingung

Tuesday, October 23, 2018 10:33 AM





→ Wieviele Spin-Übergänge sind möglich und bei welcher Resonanzbedingung?

Insgesamt $\binom{4}{2}$ Kombinationen → 6 "theoretische" Übergänge

Auswahlregeln:

EPR: $\Delta m_S = \pm 1$ $\Delta m_I = 0$

NMR: $\Delta m_S = 0$ $\Delta m_I = \pm 1$

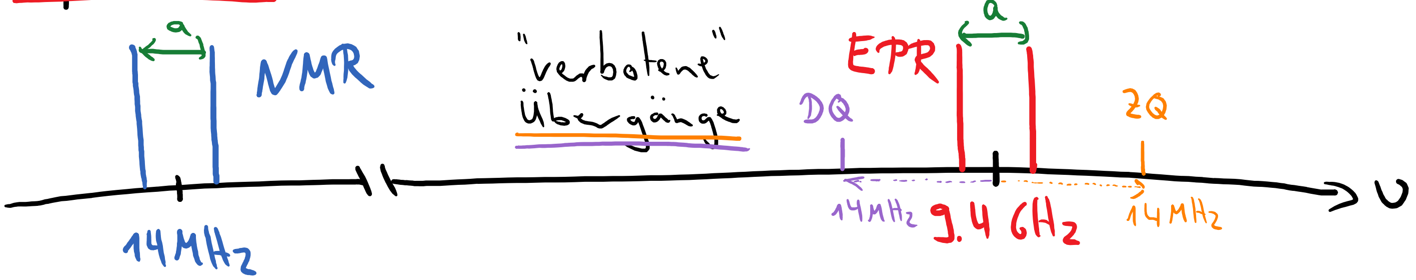
DQ: $\Delta m_S = \pm 1$ $\Delta m_I = \pm 1$

Double Quantum

ZQ: $\Delta m_S = \pm 1$ $\Delta m_I = \mp 1$

Zero Quantum

Spektrum:



Hyperfein-Wechselwirkung: $E_{HFI} = a \cdot m_S \cdot m_I$

→ Lokales Magnetfeld der Spins

QM-Hintergrund

Monday, October 22, 2018 5:18 PM

Spin-Operator-Vektor $\hat{\vec{S}} = \begin{pmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{pmatrix}$

Kommutationseigenschaften:

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

$\Rightarrow$ S_x, S_y, S_z : komplementäre Observablen!

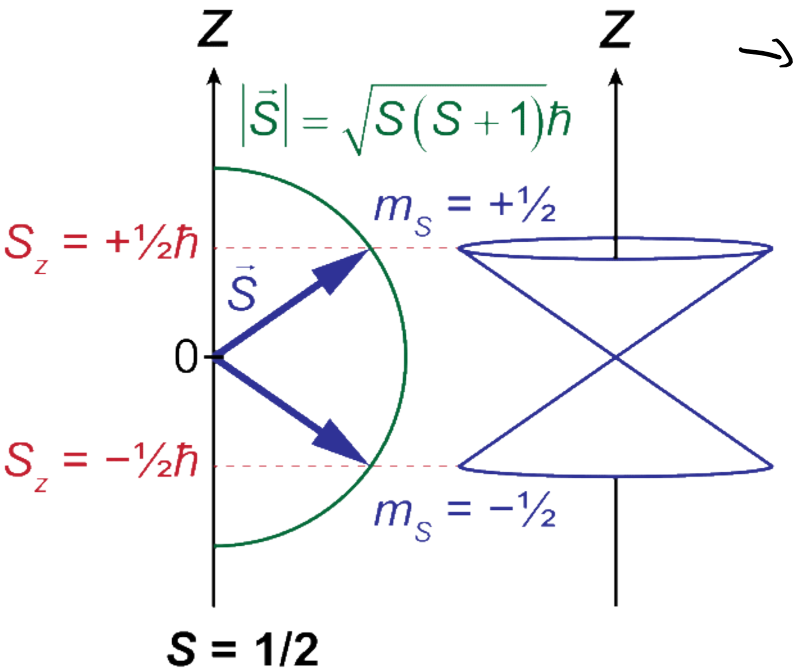
Heisenbergsche Unschärferelation

S_z bestimmt $\rightarrow$ S_x, S_y unbestimmt!

$$\hat{S}_z \chi_e = m_s \hbar \chi_e$$

$\hat{S}_z |\alpha\rangle = +\frac{1}{2}\hbar |\alpha\rangle$

$\hat{S}_z |\beta\rangle = -\frac{1}{2}\hbar |\beta\rangle$



$\rightarrow$ χ_e keine Eigenfunktion zu $\hat{S}_x, \hat{S}_y$

aber:

$$\hat{\vec{S}}^2 \chi_e = S(S+1)\hbar^2 \chi_e$$

$\rightarrow$ χ_e ist Eigenfunktion zu $\hat{\vec{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$

Erwartungswerte: $\langle S_z \rangle = m_s \hbar$ $\rightarrow$ $S_z = m_s \hbar$

$\langle \vec{S}^2 \rangle = S(S+1)\hbar^2$ $\rightarrow$ $|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\,\hbar$

Spin-Vektoren und Operator-Matrizen

Monday, October 22, 2018 6:18 PM

Spin ⟷ magn. Moment: $\vec{\mu} = g \cdot \frac{q}{2m} \cdot \vec{S}$ $\quad \vec{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_x \\ \mu_y \\ \mu_z \end{pmatrix}$

$$\vec{\mu} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot g \cdot \vec{S} \qquad E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \rightarrow \text{Zeeman-WW}$$

$$|\vec{\mu}| = \mu_B \cdot g \cdot \sqrt{S(S+1)} \qquad \mu_z = -\mu_B \cdot g \cdot m_s$$

deBroglie/Schrödinger ⟺ Born/Heisenberg

$\hat{H}\Psi = E\Psi$ ⟺ $\hat{H}\vec{\Psi} = E\vec{\Psi}$

Operator/Wellenfunktion — Matrix/Zustandsvektor

Wellenmechanik — Matrizenmechanik

Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

↳ **Spin-Matrizen**

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x \qquad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y \qquad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$

Spin-Zustandsvektoren

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

!

Spin-Messungen

Monday, October 22, 2018 6:59 PM

$$\hat{S}_x|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cdot\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \neq c\cdot|\alpha\rangle$$ kein Eigenzustand

$$\hat{S}_z|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}|\alpha\rangle$$ Eigenzustand!

↳ $\hat{S}_z$ misst Ausrichtung des Spins entlang Magnetfeld

⇒ **Polarisation**

Erwartungswerte (von Zeeman-Eigenzuständen)

$$\langle S_z\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{S}_z|\alpha\rangle = (1,0)\cdot\frac{\hbar}{2}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \qquad \langle S_z\rangle_\beta = -\frac{\hbar}{2}$$

$$\langle S_x\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{S}_x|\alpha\rangle = (1,0)\cdot\frac{\hbar}{2}\cdot\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = 0 \qquad \langle S_x\rangle_\beta = 0$$

Im Ensemble (therm. GGW): $\langle S_z\rangle/\hbar = P_S = \frac{n_\beta - n_\alpha}{n_\beta + n_\alpha} = \tanh\left(\frac{\hbar\gamma B_0}{2k_BT}\right)$

Spin-Polarisation

Was kann durch $\hat{S}_x$ gemessen werden?

$$\chi_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\alpha\rangle + |\beta\rangle\right) = \frac{\hbar}{2}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$$ Superposition

$$\hat{S}_x|\chi_x\rangle = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\cdot\frac{\hbar}{2}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\chi_x$$ Eigenfunktion!

$$\langle S_x\rangle_x = \langle\chi_x|\hat{S}_x|\chi_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)\cdot\frac{\hbar}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2\cdot 2}(1+1) = \frac{\hbar}{2}$$

↳ $\hat{S}_x$ (oder $\hat{S}_y$) misst Überlagerung von Polarisationszuständen

→ **Kohärenz**

Auf-/Absteigeoperatoren

Monday, October 22, 2018 7:26 PM

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right]$$

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+|\alpha\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \qquad \hat{S}_+|\beta\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar|\alpha\rangle$$

$$\hat{S}_-|\alpha\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar|\beta\rangle \qquad \hat{S}_-|\beta\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

$\longrightarrow$ $\hat{S}_+$ erhöht m_s, $\hat{S}_-$ erniedrigt m_s um 1, wenn möglich!

häufig: $\underline{\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)}$