5.4 Spin [Münster 15.1 – 15.3, Fließbach VI 37]

- wie wir gesehen haben besitzt der Bahndrehimpuls $\hat{\vec{L}}$, der auf den (skalaren) Wellenfunktionen $\Psi(\vec{r}) \in \mathbb{C}$ Drehungen im $\mathbb{R}^3$ erzeugt, immer Eigenwerte $\hbar^2 l(l+1)$ von $\hat{\vec{L}}^2$ mit ganzzahligen $l \in \mathbb{N}$. Damit durchläuft m die ungerade Anzahl $2l+1$ von Werten $-l, \dots, l$.
- andererseits können allgem. Operatoren $\hat{\vec{J}}$, die die Drehimpulsalgebra erfüllen, auch halbzahlige Werte $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$ usw. annehmen. Bei halbzahligen j durchläuft m eine gerade Anzahl von Werten $2j+1$.

* In mehreren Experimenten wie bei der Messung von Energieniveaus z.B. des H-Atoms, oder der Aufspaltung eines Atomstrahls in einem äußeren Magnetfeld (Stern-Gerlach 1921) wurde eine Aufspaltung in z.B. eine gerade Anzahl von Niveaus beobachtet.

$\Rightarrow$ Dieses muss einer andere innere Eigenschaft als dem $\hat{\vec{L}}$ von Atomen entsprechen, dem Spin. Wie stellen wir diesen dar?

bisher: Drehungen auf $|\Psi\rangle \to |\Psi'\rangle = \exp[-\frac{i}{\hbar}\alpha\vec{n}\cdot\hat{\vec{L}}]|\Psi\rangle$,
wobei $\Psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\Psi\rangle \in \mathbb{C}$ eine skalare Funktion im Ortsraum.

- wir sind bereits matrixwertigen Darstellungen der Drehimpulsalgebra begegnet: $\hbar\Sigma_j$ (3x3)

$\Rightarrow$ wir verallgemeinern unsere Wellenfunktionen zu einem Vektor, wobei jede Komponente dem neuen Freiheitsgrad Spin entspricht:

$$\langle\vec{r}, \underline{s}|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle\vec{r}; s|\Psi\rangle \\ \langle\vec{r}; s-1|\Psi\rangle \\ \vdots \\ \langle\vec{r}; -s+1|\Psi\rangle \\ \langle\vec{r}; -s|\Psi\rangle \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2s+1}$$

wobei $\hat{S}_j$, $j = 1,2,3$ konstante $(2s+1)\times(2s+1)$ Matrizen sind, mit $\boxed{[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{S}_l}$

(z.B. für $s=1$ $\hat{S}_j = \hbar\Sigma_j$) $\boxed{|\Psi'\rangle = \exp[-\frac{i}{\hbar}\alpha\vec{n}\cdot\vec{S}]|\Psi\rangle}$

↑ Dies ist die Wellenfunktion eines Teilchens mit Spin s, d.h. unsere bisherigen Wellenfunktionen waren alle mit Spin $s=0$.

Auf dieses $|\psi\rangle$, sowie auf $\overset{\text{ONB-darst.}}{\langle \vec{r}, s | \psi\rangle}$ mit $s>0$ wirkt weiterhin $\hat{\vec{L}}$ und erzeugt Drehungen!

★ <u>Beispiel Spin $\frac{1}{2}$:</u>

- wir suchen eine <u>2x2 Matrix-darstellung von $\hat{S}_{j=1,2,3}$</u>. Diese wirkt auf $\begin{pmatrix} \langle \vec{r}, +\frac{1}{2}|\psi\rangle \\ \langle \vec{r}, -\frac{1}{2}|\psi\rangle \end{pmatrix}$, wobei die $\left\{\begin{matrix}\text{obere} \\ \text{untere}\end{matrix}\right.$ Komponente $\left.\begin{matrix}\text{Spin up} \\ \text{Spin down}\end{matrix}\right\}$ heißen,

und in einer ONB durch $\underline{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle}$ (oder $|\psi_\uparrow\rangle$ oder $|+\rangle$)

und $\underline{\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle}$ (oder $|\psi_\downarrow\rangle$ oder $|-\rangle$) bez. werden.

★ auf Seite 88 haben wir bereits die <u>Matrixelemente für bel. $\hat{\vec{J}}$</u> bestimmt, hier $j = \frac{1}{2}$, $m = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$) in den Eigenwerten von $\hat{\vec{S}}^2$ und $\hat{S}_3$:

- $\underline{\langle \frac{1}{2}, m' | \hat{S}_3 | \frac{1}{2}, m\rangle = \hbar m \, \delta_{m,m'}}$ $\Rightarrow$ $\boxed{\hat{S}_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}}$ auf obiger Basis

weil $\hat{S}_3\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $\hat{S}_3\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$.

- $\underline{\langle \frac{1}{2}, m' | \hat{S}_1 | \frac{1}{2}, m\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(\sqrt{(\frac{1}{2}-m)(\frac{1}{2}+m+1)}\,\delta_{m',m+1} + \sqrt{(\frac{1}{2}+m)(\frac{1}{2}-m+1)}\,\delta_{m',m-1}\right)}$

d.h. bei 2 möglichen Werten für $m, m' = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ bildet diese Matrix $\hat{S}_1$

$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \to \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \to \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ ab: $\boxed{\hat{S}_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix}}$

(wobei $\sqrt{\ } = 1$ oder 0

- $\underline{\langle \frac{1}{2}, m' | \hat{S}_2 | \frac{1}{2}, m\rangle = \frac{i\hbar}{2}\left(\sqrt{(\frac{1}{2}+m)(\frac{1}{2}-m+1)}\,\delta_{m',m+1} - \sqrt{(\frac{1}{2}-m)(\frac{1}{2}+m+1)}\,\delta_{m',m-1}\right)}$

wie $\hat{S}_1$, mit anderem Vorfaktor und Vorzeichen: $\boxed{\hat{S}_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0\end{pmatrix}}$

Wir definieren die <u>Pauli-Matrizen σ_j</u> durch $\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j$, d.h.

$\sigma_1 = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$ und es gilt: $\sigma_j^\dagger = \sigma_j$, $\mathrm{Sp}[\sigma_j] = 0$ (Ü)

sowie $\boxed{[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\,\varepsilon_{jkl}\,\sigma_l}$ VR der Pauli-Matrizen

Ferner gilt $\boxed{\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} \mathbb{1}_2 + i \epsilon_{jkm} \sigma_m}$ (Ü

also z.B. $\sigma_1 \sigma_2 = i \sigma_3$ (gut zum Merken der Vorzeichen)

$\Rightarrow$ eine endliche Transformation ist gegeben durch

$$\boxed{\hat{U} = \exp[-\tfrac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{S}}] = \exp[-\tfrac{i\alpha}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma}] = \mathbb{1}_2 \cos(\tfrac{\alpha}{2}) - i \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin(\tfrac{\alpha}{2})} \quad (\text{Ü})$$

Diese 2x2 Matrix ist unitär, $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$, hat $\det \hat{U} = 1 \Rightarrow$ Diese Matrizen erzeugen die Gruppe $SU(2)$.

- mit den $\hbar \frac{\sigma_j}{2} = \hat{S}_j$ haben wir schon eine Darstellung auf Spin $s = \frac{1}{2}$ Zuständen.

Spin $\frac{1}{2}$ Erwartungswerte : hier 2-Dimensionaler Hilb. Raum (s. Ü B.1)

2er Vektor als Wellenfunktion $\langle \vec{r}, \frac{1}{2} | \psi \rangle = \begin{pmatrix} \langle \vec{r}, +\frac{1}{2} | \psi \rangle \\ \langle \vec{r}, -\frac{1}{2} | \psi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$ Spinor-Wellenfkt

- Skalarprodukt:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int d^3\vec{r} \sum_{m=+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \langle \phi | \vec{r}, m \rangle \langle \vec{r}, m | \psi \rangle = \int d^3\vec{r} \left[\phi_+^*(\vec{r}) \psi_+(\vec{r}) + \phi_-^*(\vec{r}) \psi_-(\vec{r}) \right]$$

wobei $\langle \phi | \vec{r}, \frac{1}{2} \rangle = \left(\phi_+^*(\vec{r}), \phi_-^*(\vec{r}) \right)$ der konjugierte Spinor ist.

$\Rightarrow$ • Norm: $\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3\vec{r} \left(|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2 \right)$

und damit die Wahrscheinlichkeitsdichten

am Ort $\vec{r}$, im $\hat{S}_3$-Zustand $+\frac{1}{2}$: $|\psi_+(\vec{r})|^2$ bzw im $-\frac{1}{2}$ Zustand $|\psi_-(\vec{r})|^2$.

- Erwartungswerte

$\vec{r}$ weggelassen, eigentlich $|\vec{r}, m\rangle = |\vec{r}; \frac{1}{2}; m\rangle$

$$\langle \psi | \hat{S}_j | \psi \rangle = \int d^3\vec{r} \sum_{m=+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \sum_{m'=+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \langle \psi | \vec{r}, m' \rangle \langle m' | \hat{S}_j | m \rangle \langle \vec{r}, m | \psi \rangle$$

$$= \int d^3\vec{r} \left(\psi_+^*(\vec{r}), \psi_-^*(\vec{r}) \right) \begin{pmatrix} \text{Matrixdarst.} \\ \text{von } \hat{S}_j \text{, s.o.} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}.$$

Hamiltonoperator und Spin

- nachdem wir unseren Hilbertraum von skalaren Wellenfunktionen $\psi(\vec{r}) \in \mathbb{C}$ auf einen $2s+1$ dimensionalen Vektor

$$\begin{pmatrix} \psi_s(\vec{r}) \\ \psi_{s-1}(\vec{r}) \\ \vdots \\ \psi_{-s}(\vec{r}) \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2s+1}$$

erweitert haben für ein System mit Spin s, muß auch der Hamiltonop. als $(2s+1)\times(2s+1)$ dim. Matrix betrachtet werden. Seine genaue Form gibt an, welche Operatoren eine gemeinsame Basis von Eigenzuständen besitzen:

Beispiel 1: $\boxed{\hat{H}_1 = \left\{ \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\vec{r}}|) \right\} \mathbb{1}_{2s+1}}$. Da $\hat{H}$ nicht explizit von $\hat{\vec{S}}$ abhängt, vertauscht $\hat{H}$ mit $[\hat{S}_j, \hat{H}] = \hat{0}$, d.h. aufgrund seiner Form gilt $[\hat{\vec{S}}^2, \hat{H}] = \hat{0} = [\hat{S}_3, \hat{H}]$ und auch $[\hat{\vec{L}}^2, \hat{H}] = \hat{0} = [\hat{L}_3, \hat{H}]$.

$\Rightarrow \exists$ gemeinsame Basis von Eigenzuständen zu $\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_3, \hat{\vec{S}}^2$ und $\hat{S}_3$.

Insbesondere sind die Energieeigenzustände zu $\hat{S}_3$ $+\frac{\hbar}{2}$ und $-\frac{\hbar}{2}$ entartet, d.h. spin up und down haben dieselbe Energie.

* wie wir gesehen haben, erfüllen jeweils die $\hat{L}_j$ und $\hat{S}_j$ eine Drehimpulsalgebra. Da Bahndrehimpuls $\hat{\vec{L}}$ und Spin $\hat{\vec{S}}$ unabhängig sind, gilt $[\hat{L}_j, \hat{S}_i] = \hat{0}$. Damit erfüllt auch

$$\boxed{\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}}$$

, der Gesamtdrehimpuls, eine Drehimpulsalgebra $([\hat{J}_k, \hat{J}_l] = i\hbar\,\varepsilon_{klm} \hat{J}_m)$

Ob allerdings $\hat{J}_i$ bzw $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_3$ mit $\hat{H}$ vertauschen, hängt von $\hat{H}$ ab. Im Beispiel 1 oben ist dies der Fall, und wir könnten auch die Eigenbasis zu $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_3$ wählen. Zur Addition von Drehimpulsen im Allgemeinen kommen wir gleich im nächsten Kapitel.

Beispiel 2: Spin-Bahn Kopplung:

$$\boxed{\hat{H}_2 = \underbrace{\left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\vec{r}}|)\right)}_{\hat{H}_1} \mathbb{1}_{2s+1} + k\,\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}}\quad,\ k \in \mathbb{R}$$

mit Vektor $\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \vec{p}$ und Vektor $\hat{\vec{S}}$ von $(2s+1)\times(2s+1)$ Matrizen

z.B. $\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\sigma_1\\ \sigma_2\\ \sigma_3\end{pmatrix}$ für Spin $\frac{1}{2}$.

* Welche Operatoren vertauschen noch mit $\hat{H}$, d.h. haben gemeinsame Basis?

- $\boxed{[\hat{L}_\ell, \hat{H}]} \underset{\text{Bsp 1}}{=} k[\hat{L}_\ell, \hat{L}_j \hat{S}_j] \underset{\hat{L},\hat{S}\text{ unabh.}}{=} k[\hat{L}_\ell, \hat{L}_j]\hat{S}_j = k i\hbar \varepsilon_{\ell j k} \hat{L}_k \hat{S}_j \neq \hat{0}$

- $\boxed{[\hat{S}_\ell, \hat{H}]} = k[\hat{S}_\ell, \hat{L}_j \hat{S}_j] = k[\hat{S}_\ell, \hat{S}_j]\hat{L}_j = k i\hbar \varepsilon_{\ell j k}\hat{S}_k \hat{L}_j \neq \hat{0}$

$\Rightarrow$ $\hat{H}$ und $\hat{L}_3$ sowie $\hat{S}_3$ vertauschen nicht mehr mit $\hat{H}_2$. Allerdings vertauschen wegen $[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_i] = \hat{0} = [\hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_i]$ die Quadrate weiter mit $\hat{H}_2$: $\boxed{[\hat{\vec{L}}^2, \hat{H}_2] = \hat{0} = [\hat{\vec{S}}^2, \hat{H}_2]}$ d.h. $\hat{H}_2, \hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{S}}^2$ haben weiterhin eine gleichzeitige Eigen-Basis.

* Gibt es weitere solche Operatoren? Ja, der Gesamtdrehimpuls $\hat{\vec{J}}$ ist immer noch erhalten, da

$$[\hat{J}_\ell, \hat{H}] = [\hat{L}_\ell + \hat{S}_\ell, \hat{H}] = k i\hbar\left(\varepsilon_{\ell j k} \hat{L}_k \hat{S}_j + \underbrace{\varepsilon_{\ell j k} \hat{S}_k \hat{L}_j}_{= -\varepsilon_{\ell k j} \hat{S}_j \hat{L}_k}\right) = \hat{0}$$

und $[\hat{L}_k, \hat{S}_j] = \hat{0} \Rightarrow$ $\Rightarrow [\hat{\vec{J}}^2, \hat{H}] = [\hat{J}_\ell \hat{J}_\ell, \hat{H}] = \hat{0}$ ebenso

d.h. $\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_3$ haben eine gemeinsame Basis mit $\hat{H}$, und $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{\vec{S}}^2$

da $[\hat{L}_3 + \hat{S}_3, \hat{\vec{L}}^2] = \hat{0} = [\hat{L}_3 + \hat{S}_3, \hat{\vec{S}}^2]$, und $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{\vec{L}}^2] = \hat{0} = [\hat{\vec{J}}^2, \hat{\vec{S}}^2]$.

Neben Energie sind also $\underline{\ell, s, j \text{ und } j_3}$ eine gute Quantenzahl, die Eigenzustände von $\hat{H}$ charakterisieren.