VI.7. Spin (Eigendrehimpuls)

Experimenteller Hinweis auf die Existenz des Elektronenspins $\longrightarrow$ Stern-Gerlach-Versuch mit Silberatomen (Ag)

2-fache Aufspaltung <u>trotz</u> $l=0$!

Widerspruch kann dadurch aufgelöst werden, indem man annimmt, daß die Teilchen neben dem <u>Bahndrehimpuls</u> noch einen <u>Spin</u> besitzen.

$\longrightarrow$ Beschreibung durch Spinoperator $\hat{\underline{S}}$

VI.7.1 Spinoperatoren, Paulimatrizen

$\hat{\underline{S}}$ ist gewöhnlicher Drehimpulsoperator im folgenden Sinn:

(i)
$$\left.\begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hbar \hat{S}_z \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= i\hbar \hat{S}_x \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] &= i\hbar \hat{S}_y \end{aligned}\right\} \quad \hat{\underline{S}} \times \hat{\underline{S}} = i\hbar \hat{\underline{S}}$$

Es gelten also genau dieselben Vertauschungsrelationen wie beim Bahndrehimpuls $\hat{\underline{L}}$

iii/ Eigenwertgleichungen:

$$\hat{\underline{S}}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle$$

$$\hat{S}_z |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle$$

analog

$\hat{\underline{L}}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$

$\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$

mögliche Werte von s:

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

$$m_s = -s, \dots, s$$

s kann also im $\underbrace{\text{Gegensatz}}_{\text{zu der Quantenzahl } l \text{ vom Bahndrehimpuls}}$ $(\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p})$ sowohl ganz- als auch halbzahlige Werte annehmen!

Bemerk: Im Unterschied zum Bahndrehimpuls (bzw. der zugehörigen Quantenzahl l) ist Quantenzahl s des Spins unveränderlich — d.h. s ist eine Teilcheneigenschaft

explizit:

- Teilchen mit halbzahligem Spin heißen „Fermionen" z.B. Elektronen, Protonen, Neutronen $s = 1/2$

$$s = \frac{1}{2} \rightarrow m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

- Teilchen mit ganzzahligem Spin heißen „Bosonen"

(z.B.
π-Meson : $s=0$
Photon : $s=1$
Magnon : $s=1$
⋮)

Diese Klassifizierung ~~der~~ geht zurück auf das sog. Spin-Statistik-Theorem (→ Quantenelektrodynamik)

Bosonen und Fermionen haben sehr unterschiedliche <u>Vielteilcheneigenschaft</u> !

Bosonen: Bose-Einstein-Kondensation
(makroskopische Besetzung des Grundzustands)

Fermionen : Pauli-Prinzip → ~~Die~~ Mehrfachbesetzung eines

eines Zustands ist verboten

→ Fermi-Dirac-Verteilung

→ spezifische Wärme von Festkörpern

→ Quantenstatistik (Teilgebiet der Statistischen Physik)

<u>VI</u>.7.2. Spezialfall $s=\frac{1}{2}$ (Elektron)

→ $m_s = \pm\frac{1}{2}$ ⟹ zweidimensionaler Spin-Hilbertraum $\mathcal{H}_s$

Man führt (für $s=\frac{1}{2}$) statt $\hat{\underline{S}}$ häufig folgenden Operator ein:

$$\hat{\underline{S}} =: \frac{\hbar}{2}\hat{\underline{\sigma}}$$

und folgende Notation für die Eigenzustände.

$$|s=\tfrac{1}{2}, m_s=\tfrac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle$$
„spin-up"

$$|s=\tfrac{1}{2}, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle$$
„spin-down"

Dann gilt:

$$\hat{\underline{S}}^2|s,m_s\rangle = \hbar s(s+1)|s,m_s\rangle \longrightarrow \frac{\hbar^2}{4}\hat{\underline{\sigma}}^2|\uparrow\rangle = \hbar^2\frac{3}{4}|\uparrow\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{\underline{\sigma}}^2|\uparrow\rangle = 3|\uparrow\rangle$$

analog: $\hat{\underline{\sigma}}^2|\downarrow\rangle = 3|\downarrow\rangle$

$$\hat{S}_z|s,m_s\rangle = \hbar m_s|s,m_s\rangle \longrightarrow \hat{\sigma}_z|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle,\ \hat{\sigma}_z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$$

Für die Vertauschungsrelationen findet man:

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\hat{\sigma}_k$$

mit i,j,k zykl. Indizes

Die Eigenzustände $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ bilden eine Basis des zweidimensionalen Spin-Hilbertraums $\mathcal{H}_{S=\frac{1}{2}}$

$$\left.\begin{array}{l} \langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1 \\ \langle\uparrow|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|\uparrow\rangle = 0 \end{array}\right\} \text{Orthonormierung}$$

$$|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \hat{1} \Big\} \text{ Vollständigkeitsrelation}$$

Frage nun: Wie wirken $\hat{\sigma}_x$ und $\hat{\sigma}_y$ auf die Eigenzustände $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$?

Führe dazu ein:

$$\hat{\sigma}_\pm = \hat{\sigma}_x \pm i\hat{\sigma}_y$$

nicht hermitesch

(analog zu den Leiteroperatoren des Bahndrehimpulses)

es muß gelten.

$$\hat{\sigma}_+ |\uparrow\rangle = 0 \quad ; \quad \hat{\sigma}_- |\downarrow\rangle = 0$$

„Aufsteiger" „Absteiger"

Kombiniere das mit der Def. von $\hat{\sigma}_\pm$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{array}{l} \hat{\sigma}_x |\uparrow\rangle = -i\hat{\sigma}_y |\uparrow\rangle \\ \hat{\sigma}_x |\downarrow\rangle = i\hat{\sigma}_y |\downarrow\rangle \end{array}} \quad \text{HÜ}$$

andererseits muß gelten:
(damit die $\hat{\sigma}_\pm$ wirklich Leiteroperatoren sind)

$$\hat{\sigma}_+ |\downarrow\rangle = \alpha |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_- |\uparrow\rangle = \beta |\downarrow\rangle$$

Berechnung der Vorfaktoren α und β:

$$\underbrace{\langle \alpha\uparrow | \alpha\uparrow\rangle}_{\alpha^*\alpha \underbrace{\langle\uparrow|\uparrow\rangle}_{1}} = \langle \hat{\sigma}_+ \downarrow | \hat{\sigma}_+ \downarrow\rangle$$

$$= \langle\downarrow| \hat{\sigma}_+^+ \hat{\sigma}_+ |\downarrow\rangle$$

benutze $\hat{\sigma}_+^+ = \hat{\sigma}_-$

$$= \langle\downarrow|(\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y)(\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y)|\downarrow\rangle$$

$$= \langle\downarrow|\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + i[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y]|\downarrow\rangle$$

$$= \langle\downarrow|\hat{\underline{\sigma}}^2 - \hat{\sigma}_z^2 - 2\hat{\sigma}_z|\downarrow\rangle$$

$$= (3 - 1 + 2)\underbrace{\langle\downarrow|\downarrow\rangle}_{1} = \underline{\underline{4}}$$

$$\rightarrow |\alpha| = 2$$

Folgerung für β:

$$\underbrace{\langle\uparrow|\hat{\sigma}_+|\downarrow\rangle}_{\langle\hat{\sigma}_+^+\uparrow|\downarrow\rangle = \langle\hat{\sigma}_-\uparrow|\downarrow\rangle = \langle\beta\downarrow|\downarrow\rangle = \beta^*} = \langle\uparrow|\alpha|\uparrow\rangle = \alpha$$

$$\Rightarrow \beta^* = \alpha$$

wähle ~~oder~~ $\alpha = \beta = 2$ (Konvention)

Zurück zur Ausgangsfrage: Wie wirken $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ auf $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$?

$$\underbrace{\hat{\sigma}_+}\,|\downarrow\rangle = 2|\uparrow\rangle$$

$$(\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y)|\downarrow\rangle = 2\,|\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle + \underbrace{i\hat{\sigma}_y|\downarrow\rangle}_{\substack{\hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle \\ \text{wg. } (*)}} = 2|\uparrow\rangle$$

$$\Rightarrow\; 2\hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle = 2\,|\uparrow\rangle \quad\Longrightarrow\quad \hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

analog findet man:

$$\hat{\sigma}_x|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_y|\uparrow\rangle = i|\downarrow\rangle \;;\; \hat{\sigma}_y|\downarrow\rangle = -i|\uparrow\rangle$$

Daher nennt man $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ manchmal „Spin-Flip“-Operatoren!

Darstellung der Spinoperatoren $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ durch Matrizen

$$(\hat{\sigma}_i)_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \langle\uparrow|\hat{\sigma}_i|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\hat{\sigma}_i|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|\hat{\sigma}_i|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\hat{\sigma}_i|\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

$i = x, y, z$

Ergebnis:

$$\left.\begin{aligned} \hat{\sigma}_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{\sigma}_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{\sigma}_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}\right\} \text{„Pauli"sche Spinmatrizen}$$

Man kann sich leicht davon überzeugen, daß für die Matrizen die üblichen Vertauschungsrelationen gelten

VI.7.2. Spin und magnetisches Moment

Frage: Wie verhält sich der Spin in einem äußeren Magnetfeld?

Vom Bahndrehimpuls wissen wir:

$$\underline{\hat{m}} = -\frac{e_0}{2m_e}\underline{\hat{L}} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\underline{\hat{L}}$$

mit $\mu_B = \frac{\hbar e_0}{2m_e}$ Bohr'sche Magneton!

entsprechender Beitrag im Hamiltonian:

$$\hat{H}^{\text{Feld}} = -\underline{\hat{m}}\cdot\underline{B} = +\frac{\mu_B}{\hbar}\underline{\hat{L}}\cdot\underline{B}$$

Frage: Wie sieht entsprechender Beitrag für den Spin aus?

Problem: Spin ist kein klassisches Konzept

$\rightarrow$ Definition des entsprechenden magnet. Moments?

Ansatz: $\underline{\hat{m}}_S = \mu_S \underline{\hat{S}}$

magnetisches Moment zum Spin

Für Elektronen: $\mu_S = -g\frac{\mu_B}{\hbar}$

g „Landé-Faktor"

(relativist. Dirac-Theorie) Quantenelektrodynamik theoretisch: $g = 2{,}0023\ldots$ . ...

Experimentell findet man $\underline{\underline{g=2}}$

→ Gesamtes magnetisches Moment des Elektrons:

$$\hat{\underline{m}}_{tot} = \underbrace{\hat{\underline{m}}}_{\text{Bahndrehimpuls}} + \underbrace{\hat{\underline{m}}_S}_{\text{Spin}}$$

$$= -\frac{\mu_B}{\hbar}\left(\hat{\underline{L}} + 2\hat{\underline{S}}\right) = -\frac{\mu_B}{\hbar}\left(\hat{\underline{L}} + \hbar\hat{\underline{\sigma}}\right)$$

→ Für Elektronen im äußeren Magnetfeld ergibt sich dann insgesamt folgende Zusatzterm:

$$\hat{H}_{Feld} = -\hat{\underline{m}}_{tot} \cdot \underline{B}$$

$$= \frac{\mu_B}{\hbar}\left(\hat{\underline{L}} + \hbar\hat{\underline{\sigma}}\right) \cdot \underline{B}$$

Voller Hamiltonian:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m_e} + \underbrace{V(r)}_{\text{Coulomb-potential}} + \hat{H}_{Feld}$$

In der Realität hat man zusätzl. Beitrag durch die sog. Spin-Bahn-Wechselwirkung
(Spin spürt Magnetfeld des Bahndrehimpulses und umgekehrt!)

$$\text{Zusatzterm} \sim \underbrace{\hat{\underline{L}} \cdot \hat{\underline{\sigma}}}_{\text{Spin-Bahn-Kopplung}}$$

In Anwesenheit eines solchen Terms ändert sich alles; z.B. ist der Drehimpuls $\hat{\underline{L}}$ keine Erhaltungsgröße mehr!

$\Rightarrow$ Der jetzt erhaltene Drehimpuls ist

$$\underline{\hat{J}} = \underline{\hat{L}} + \underline{\hat{S}}$$

Bei Vernachlässigung der Spin-Bahn-WW können die EZ mit Spin als sog. Produktzustände geschrieben werden

$$\underbrace{|n,l,m\rangle}_{\text{EZ von } H} \underbrace{|m_s\rangle}_{\text{EZ des Spins}} \in \underbrace{\mathcal{H}_{\text{Bahn}} \times \mathcal{H}_{\text{Spin}}}_{\text{Produkt der Hilberträume}}$$