VI Weiterer Freiheitsgrad: Spin als Eigendrehimpuls

1. Stern-Gerlach-Experiment und Postulierung d. Spins

- nicht alle Experimente sind mit Freiheitsgrad $\vec{r}, t$ in $\psi(\vec{r}, t)$ zu erklären:
  - Atome im Magnetfeld – komplizierter als bisher berechnet (optische Spektren)
  - Stern-Gerlach-Versuch (Kräfte auf Teilchenstrahlen in inhomogenem Magnetfeld)

$\Longrightarrow$ nötig weiteren Freiheitsgrad einzuführen: Spin (sich drehen = to spin)

$\hat{=}$ weiterer Drehimpuls als Eigenschaft („innerer Drehimpuls")

→ neben Orts- und Impulsoperator weiteren Operator $\underline{\vec{S}}$ (Spin)

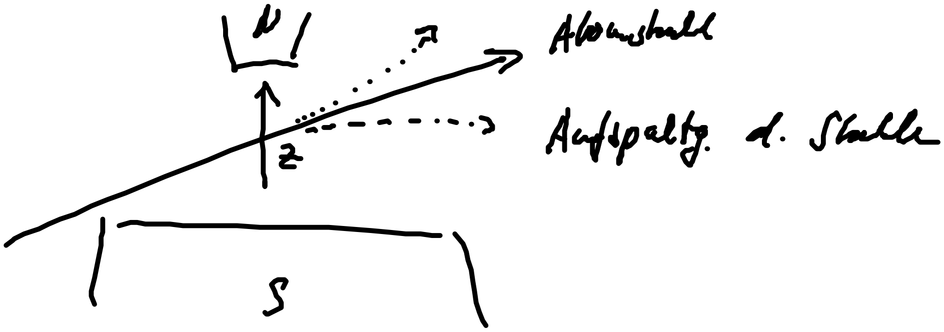
- Stern-Gerlach-Experiment als Ausgangspunkt

  Strahl v. Atomen (H) im räumlich inhomogenen Magnetfeld

$$i\hbar\dot{\psi} = \left(\underline{H}_{Atom} - \vec{\mu}\cdot\vec{B}(\vec{r})\right)\psi$$

Abhängigkeit vom Ort

$\vec{B} = B(z)\,\vec{e}_z$ als dominante Komponente



klassisch: $\dot{\vec{p}} = -\vec{\nabla}_r \, H(\vec{r},\vec{p})$ $\qquad B_z = B_0' z$

$$= \partial_z \mu_z B_z(z) = \mu_z B_0'$$

konstant

Achtg $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ ist hier nicht erfüllt,
d.h. Theorie unvollständig,
aber ist dominanter Term!

Ehrenfesttheorem:

$$\langle \dot{p} \rangle = \int d^3r \; \Psi^*(\vec{r},t) \; B_0' \, \underline{\mu}_z \; \Psi(\vec{r},t)$$

Erwartungswert d. Impulsänderung

Operator

$$\underline{\mu}_z \sim \underline{l}_z = \frac{\hbar}{i} \partial_\varphi$$

$$= \int d^3r \, \Psi^* \, B_0' \frac{q}{2m} \underline{l}_z \, \Psi(\vec{r}, t)$$

↑

Eigenfunktion d.

H-Atoms entwickeln:

$$\varphi_{nlm} = R_{nl}(r) \, Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$\underline{\underline{\langle \dot{p} \rangle}} \sim \int d^3r \, \Psi^* \underbrace{\underline{l}_z \, \Psi}_{\hbar m_l} \sim \underline{\underline{\hbar m_l}}$$

Kraftwirkung auf Strahl ist proportional zu $\hbar m_l$:

im Prinzip sollte Exp. Aufspaltung in $2l+1$ Strahlen sehen.

$l = 0 \rightarrow$ 1 Strahl $\Longrightarrow$ $\underline{\underline{\text{Exp: 2 Strahlen}}}$ // $(l=0, m_l = 0)$

$l = 1 \rightarrow$ 3 Strahlen

→ offensichtlich verfügt das El über einen weiteren Freiheitsgrad

der an das Magnetfeld koppelt:

jeder exp. zugänglichen Größe muß Operator zugeordnet

werden, hier $\underline{\vec{S}} \;\hat{=}\;$ Spin

da Kopplg. an $\vec{B}$ → sollte Drehimpulseigenschaften haben

Kopplg a Spin liegt nahe: $B_0' \frac{q}{2m} \underline{S}_z \psi_s$ ← Index von Eigenwert, die nicht in $\vec{r}, t$ vorkommt

statt $\underline{\ell}_z$

$$\underline{S}_z \psi_s = \hbar m_s \psi_s \quad (\text{vorher } \underline{\ell}_z Y_{em} = \hbar m_e Y_{em})$$

magnet. Spinquantenzahl

m_s kann nur 2 Werte annehmen

+ weiß, daß Abstand zwischen m_e's 1 ist

→ auch f. m_s fordern

$\Rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2}$ als Ansatz

komplette Analogie schluß zu Bahndrehimpuls ($\underline{L}$)

$$\boxed{\begin{aligned} \underline{S}_z \psi_s &= \hbar m_s \psi_s \\ \underline{S}^2 \psi_s &= \hbar s(s+1) \psi_s \\ &+ \text{analoge Vertauschgsrelation} \end{aligned}}$$

$m_s = \pm \frac{1}{2}$

$s = \frac{1}{2}$

als gilt neue Wellenfunktion untersuchen

$$\Psi \rightarrow \overleftarrow{\Psi} = \Psi_s(\vec{s})\,\Psi(\vec{r},t)$$

2. Beschreibung d. Spins: Spinoren und Spinoperator

a) Ansatz f. Spinor und $\vec{S}$-Operator

Elektron hat offensichtlich <u>2 Zustände</u> neben dem Ortsfreiheitsgrad

$\swarrow$ f. $m_s = \pm\frac{1}{2}$

Ansatz über 2d. Vektor:

$$\overline{\Psi}(\vec{r},\vec{s},t) = \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r},t) \\ \Psi_-(\vec{r},t) \end{pmatrix} \hat{=} \text{ vollständiger Beschreibg. bei } m_s = \pm\frac{1}{2}$$

$\nearrow$ Spinor

eines Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen ($s = \frac{1}{2}$)

$$= \Psi_+(\vec{r},t)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \Psi_-(\vec{r},t)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

vollständig in 2d

<u>Basis</u>: $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} + \hat{=} \uparrow \\ - \hat{=} \downarrow \end{pmatrix}$

$\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

man möchte aber in Analogie zu Ort $\underline{\vec{r}}$ (3d)

auch die 3d Observable "Spin" $\underline{\vec{S}}$ haben

<u>Spinvektor</u>: $\underline{\vec{S}} = (\underline{S}_x, \underline{S}_y, \underline{S}_z)$

<u>Vertauschungsrelation</u> postulieren:

$$[S_i, S_j] = \varepsilon_{ijk} \, i\hbar \, S_k$$

(in Analogie zu Bahndrehimpuls L_i)

nur mit Hilfe der Vertauschungsrelationen kann man Eigenwertprobleme lösen für $\underline{S}_z$, $\underline{\vec{S}}^2$:

$$\underline{\vec{S}}^2 \chi_\pm = \hbar^2 s(s+1) \chi_\pm = \hbar^2 \frac{3}{4} \chi_\pm$$

$$\underline{S}_z \chi_\pm = \hbar \, m_\pm \chi_\pm$$

$m_\pm = \pm \frac{1}{2}$

b/ Bestimmg. d. Komponent d. Spinvektors

$$\underline{S}_z \chi_\pm = \hbar m_\pm \chi_\pm$$

2×2 Matrix ↖ repräsentiert die z-Komponente d. Spinvektors

2d Vektor

mögl. Wahl ist:

$$\underline{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

z.B:

$$\underline{S}_z \chi_+ = \hbar m_+ \chi_+$$

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \hat{=} \hbar m_+ \chi_+$$

völlig analog für χ_-

$$\underline{S}_z \chi_- = \hbar m_- \chi_-$$

zur weiteren Bestimmg v. $\underline{S}_x$, $\underline{S}_y$ müssen Vertauschungsrelation und auch die EW-Problem verwendet werden:

analog von

$$\underline{S}_z^2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$\hat{=}\ \underline{1}$ (Einheitsmatrix)

wissen über $\underline{S}_x^2 + \underline{S}_y^2 + \underline{S}_z^2 = \underline{S}^2$

und: $\underline{S}^2 \chi_{\underline{+}} = \frac{3}{4}\hbar^2 \chi_{\underline{+}}$

<u>wählen:</u> $\underline{S}_x^2 = \underline{S}_y^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

in Analogie zu $\underline{S}_z^2$

1. Punkt erreicht: beide Eigenwertprobleme sind erfüllt.

Vertauschungsrelationen sind noch nicht verwendet, gebraucht um $\underline{S}_x, \underline{S}_y$ zu bestimmen

$$\underline{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad \underline{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$$

Zahlen $a, b, c, d, \alpha, \beta, \gamma, \delta$ sind zu bestimmen.

<u>dazu verschied. Schritte:</u>

(i) Antikommutator verwenden

$$\underbrace{\underline{S}_x \underline{S}_y + \underline{S}_y \underline{S}_x} = [\underline{S}_x, \underline{S}_y]_+ \quad \text{Def.}$$

hierfür verwenden von $[\underline{S}_x, \underline{S}_z] = i\hbar \underline{\underline{S}}_y$ (postuliert)

$$\frac{1}{i\hbar}\left[\underline{S}_x (\underline{S}_x \underline{S}_z - \underline{S}_z \underline{S}_x) + (\underline{S}_x \underline{S}_z - \underline{S}_z \underline{S}_x)\underline{S}_x\right] =$$

$$\frac{1}{i\hbar}\Big[\underbrace{S_x^2 S_z - \underbrace{S_x S_z S_x + S_x S_z S_x}_{0} - S_z S_x^2}_{0}\Big] = 0$$

$$\rightarrow [\underline{S}_x, \underline{S}_y]_+ = 0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Antikommutatoren zwischen den Spinkomponenten verschwinden!

verwenden um erste Koeffizienten zu bestimmen:

$$[\underline{S}_x, \underline{S}_z]_+ = 0$$

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \overset{!}{=} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{0}} = \frac{\hbar^2}{4}(a + a) \rightarrow \underline{\underline{a = 0}}$$

$\boxed{\downarrow \text{ insgesamt} \quad a = 0 = d \,, \quad \alpha = 0 = \delta}$

b, c, γ, β aus Kommutatoren $\left(\underline{S}_x \underline{S}_y - \underline{S}_y \underline{S}_x\right) = i\hbar \underline{S}_z$

und Normierung: $\underline{S}_x^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Lösungen: $b = 1$, $c = 1$, $\beta = -i$, $\gamma = i$

insgesamt folgt f. Spinmatrizen

$$\vec{S} = \left(\frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}_x \,, \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}_y \,, \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}_z \right)$$

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

Pauli Spinmatrizen

Wolfgang Pauli: 1925 Theorie d. Spins

1945 Nobelpreis Pauliverbot

Wellenfunktion verallgemeinert $\rightarrow$ Spinor $\overline{\Psi}$

damit der Spinoperator $\vec{S}$ auf $\overline{\Psi}$ wirken kann

3. Pauligleichung

Analoge Behandlung von $\vec{l}$ und $\vec{s}$ führt auf

$$\underline{H}_{Pauli} = \underline{H}_{Atom} \underbrace{- \vec{\underline{\mu}}_l \cdot \vec{B}}_{\text{Bahndrehimpuls}} \underbrace{- \vec{\underline{\mu}}_s \cdot \vec{B}}_{\text{Spindrehimpuls}}$$

$$\vec{\underline{\mu}}_l = \frac{q}{2m} \vec{r} \times \vec{p}$$

$$\vec{\mu}_l = \frac{q}{2m} \underline{\vec{l}} \qquad \vec{\mu}_s = \frac{q}{2m} g \, \underline{\vec{s}}$$

Korrekturfaktor

g-Bestimmung: $\qquad g = 2$

a) aus Diracgleichung bekommt man Pauli-H als Grenzfall und damit ist g bestimmt

b) Theorie der Quantenelektrodynamik mit Korrektur zu $g = 2$; $g = 2,\underline{001 \ldots}$

bisher Elektron, $\underline{g_{Proton} = 5,6}$

$$\boxed{\underline{H}_{Pauli} \vec{\Psi} = i\hbar \dot{\vec{\Psi}}}$$

4. H.-Atom in Magnetfeld mit Spin

$$\underline{H} = \underline{H}_{Atom} - (\vec{\mu}_e + \vec{\mu}_s)\vec{B}$$

diskutiere Energieniveaus vereinfachen für $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$

(homogenes Feld)

$$\underline{H} = \underline{H}_{At} \underline{\underline{1}} + \mu_B \underline{l}_z \underline{\underline{1}} + \mu_B g \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}_z$$

$$\mu_B = \frac{e}{2m} B_z$$

$(q = -e)$

$$\underline{\underline{H}} = \begin{pmatrix} \underline{H}_{Atom} + \mu_B \underline{l}_z & 0 \\ 0 & \underline{H}_{At} + \mu_B \underline{l}_z \end{pmatrix}$$

$$+ \frac{\hbar}{2} \mu_B g \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\underline{H} = \begin{pmatrix} \underline{H}_{Atom} + \mu_B \left(\underline{l}_z + \frac{\hbar}{2} g \right) & 0 \\ 0 & \underline{H}_{Atom} + \mu_B \left(\underline{l}_z - \frac{\hbar}{2} g \right) \end{pmatrix}$$