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)

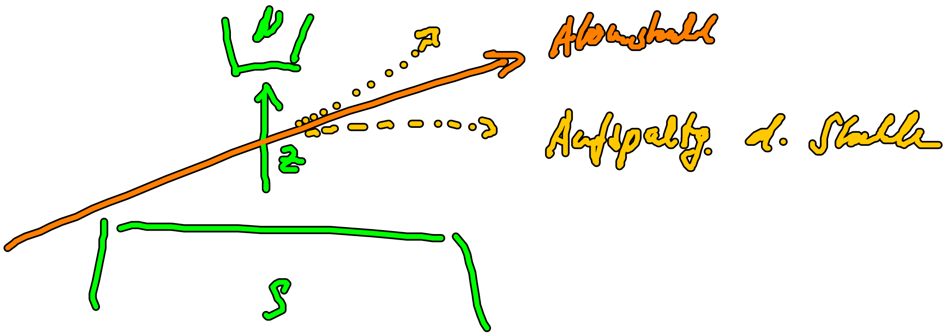
- Stern-Gerlach-Experiment als Ausgangspunkt

  Strahl v. Atomen (H) in räumlich inhomogenem 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: $\dot{\vec{p}} = -\vec{\nabla}_r \, H(\vec{r},\vec{p})$ $\qquad B_z = B_0' z$

$$= \partial_z \mu_z B_z(z) = \mu_z \underbrace{B_0'}_{\text{Konstante}}$$

Achtung: $\vec{\nabla}\cdot\vec{B} = 0$ ist hier nicht erfüllt,

d.h. Theorie unvollständig,

aber ist dominanter Term!

Ehrenfesttheorem:

$$\underbrace{\langle \dot{p} \rangle}_{\text{Erwartungswert d. Impulsänderung}} = \int d^3r \; \psi^*(\vec{r},t)\; B_0' \cdot \underbrace{\hat{\mu}_z}_{\text{Operator}} \; \psi(\vec{r},t)$$

$$\hat{\mu}_z \sim \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\partial_\varphi$$

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

Eigenfunktion d. H-Atoms entwickeln:

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

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

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

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

$l = 0 \longrightarrow$ 1 Strahl $\Longrightarrow$ Exp: 2 Strahlen!! $(l=0, m_l=0)$

$l = 1 \longrightarrow$ 3 Strahlen

$\longrightarrow$ offensichtlich verfügt das El über einen weiteren Freiheitsgrad der an das Magnetfeld koppelt:

jede exp. zugängliche Größe muß Operator zugeordnet werden, hier $\underline{\vec S} \mathrel{\hat{=}}$ Spin

da Kopplg. an B $\rightarrow$ sollte Drehimpulseigenschaften haben

Kopplg an Spin liegt nahe: $B_0' \frac{q}{2m} \underline{S}_z \psi_S$

statt $\underline{l}_z$

Index von Eigenfkt. ψ die und nicht ir $\vec{r}, t$ vorkommt

$$\underline{S}_z \psi_S = \hbar m_s \psi_S \quad (\text{vorher } \underline{l}_z Y_{lm} = \hbar m_l Y_{lm})$$

magnet. Spinquantenzahl

m_s kann nur 2 Werte annehmen

+ wissen, daß Abstand zwischen m_l's 1 ist

→ auch f. m_s fordern

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

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

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

+ analoge Vertauschungsrelation

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

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

als gilt nun Wellenfunktion untersuchen

$$\Psi \rightarrow \bar{\Psi} = \Psi_S(\vec{S})\, \Psi(\vec{r},t)$$

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

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

Ansatz über 2d. Vektor:

$$\bar{\Psi}(\vec{r},\vec{S},t) = \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r},t) \\ \Psi_-(\vec{r},t) \end{pmatrix} \;\hat{=}\; \text{vollständiger Beschreibung bei } m_s = \pm\frac{1}{2}$$

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

Basis: $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\qquad \begin{pmatrix} + \hat{=} \uparrow \\ - \hat{=} \downarrow \end{pmatrix}$

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

man möchte aber in Analogie zu Ort $\vec{\underline{r}}$ (3d) auch die 3d Observable „Spin" $\vec{\underline{S}}$ haben

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

Vertauschungsrelation postulieren:

$$[\underline{S}_i, \underline{S}_j] = \varepsilon_{ijk}\, i\hbar\, \underline{S}_k$$

(in Analogie zu Bahndrehimpuls $\underline{L}_i$)

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

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

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

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

b) Bestimmung d. Komponenten d. Spinvektors

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

2×2 Matrix

2d Vektor

← repräsentiert die z-Komponente d. Spinvektors

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

ausgehend 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: $\underline{S}^2 \chi_{\pm} = \frac{3}{4}\hbar^2 \chi_{\pm}$

<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 erfüllt: beide Eigenwertprobleme sind erfüllt.

Vertauschungsrelationen sind noch nicht verwendet, gestatten $\underline{S}_x, \underline{S}_y$ 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 verschiedene Schritte:</u>

(i) Antikommutator verwenden

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

links für verwenden von $[\underline{S}_x, \underline{S}_z] = i\hbar \underline{S}_y$ (permutiert)

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

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

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

Antikommutatoren zwischen den Spinkomponenten verschwinden!

verwenden um erste Koeffizienten zu bestimmen:

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

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

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

$\Downarrow$ <u>insgesamt</u> $a = 0 = d$, $\alpha = 0 = \delta$

b, c, γ, β aus Kommutator $(\underline{S}_x \underline{S}_y - \underline{S}_y \underline{S}_x) \, \hat{=} \, \underline{S}_z$

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

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

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 vollständig → Spinor $\overline{\Psi}$

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

3. Pauligleichung

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

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

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

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

Korrekturfaktor

$g \approx 2$

g-Bestimmung:

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

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

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

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

4. H.-Atom im Magnetfeld mit Spin

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

diskutiere Energieniveaus vereinfacht, gegen ist $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$

(homogenes Feld)

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

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

$(q = -e)$

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

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

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