Summary: Spin

- Spin Operator $\underline{\hat{S}}$
- Pauli spin operator $\underline{\hat{S}} = \frac{\hbar}{2}\underline{\hat{\sigma}}$
- Angular momentum relations
$$[\hat{S}_k, \hat{S}_l] = i\hbar \sum_{l=1} \varepsilon_{kl\ell} \hat{S}_\ell$$
- Spin eigenstates $|s, m_s\rangle$
- Eigenvalue eqs.: $\underline{\hat{S}}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s, m_s\rangle$
$\hat{S}_3|s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle$
- Spin quantum numbers are half-integer: $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$
- Spin couples to magnetic field via magnetic moment $\underline{\hat{\mu}} = g\frac{e}{2m_0}\underline{\hat{S}}$
$$\hat{V} = -\underline{\hat{\mu}} \cdot \underline{B} = \hbar \omega_e \hat{\sigma}_3, \quad \text{Larmor freq. } \omega_e = \frac{|e|B}{2m_0}$$
- Spin-Orbit Hilbertspace $\mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S \ni |\underline{r}, m_s\rangle$
- Pauli eq $\equiv$ Schrödinger eq. for Spin $1/2$
$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} |\psi_+(t)\rangle \\ |\psi_-(t)\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_0 + \hbar\omega_e & 0 \\ 0 & \hat{H}_0 - \hbar\omega_e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_+(t)\rangle \\ |\psi_-(t)\rangle \end{pmatrix}$$
- Zeeman Effect with Spin: $E = E_{n,\ell} + \mu_B B(m + 2m_s)$, $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_0}$
$\rightarrow$ reduction of degeneracy

4.5 Identische Teilchen: Spin & Statistik

- Betrachte System bestehend aus identischen Teilchen, d.h. die Teilchen besitzen die gleichen physikalischen Eigenschaften wie Masse, Ladung, Spin, ...

- Bsp.: N Elektronen in einem äußeren Potential $V(\underline{r})$

Hamilton-Operator $\hat{H}$ setzt sich zusammen aus den Hamilton-Operatoren $\hat{h}_i$ (des i-ten Elektrons, $i \in \{1, 2, \dots, N\}$) plus dem Hamilton-Operator der Coulomb-WW zwischen den Elektronen i und j

$$\hookrightarrow \hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i + \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i \neq j}}_{\text{Summe über } i \,\&\, j} \hat{W}(|\hat{\underline{r}}_i - \hat{\underline{r}}_j|), \quad \hat{h}_i = \frac{\hat{\underline{p}}_i^2}{2m_0} + V(\hat{\underline{r}}_i)$$

$\hat{\underline{r}}_i$ & $\hat{\underline{p}}_i$ sind die Orts- & Impulsoperatoren des i-ten Elektrons

- Hilbert-Raum $\mathcal{H}_N$ des N-Teilchensystems ist dann das direkte Produkt der N Ein-Teilchen-Hilbert-Räume $\mathcal{H}_1$

$$\mathcal{H}_N = \underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1}_{N \text{ mal}}$$

- ist $|a\rangle \in \mathcal{H}_1$ ein Zustand, der ein Elektron vollständig beschreibt (z. B. $|a\rangle = |\underline{p}\rangle$ freies Elektron), dann ist

Quantenzahlen

$$|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle = |a_1\rangle_1 \otimes |a_2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |a_N\rangle_N \in \mathcal{H}_N$$

ein Zustand, welcher das N-Teilchensystem beschreibt — Nr. des Teilchens

$\longrightarrow$ Elektron 1 im Zustand $|a_1\rangle_1 \in \mathcal{H}_1$
Elektron 2 im Zustand $|a_2\rangle_2 \in \mathcal{H}_1$
$\vdots$
Elektron N im Zustand $|a_N\rangle_N \in \mathcal{H}_1$

- Schrödinger-Gl.: $i\hbar \partial_t |a_1, \dots, a_N\rangle = \hat{H} |a_1, \dots, a_N\rangle$
  - $\hat{h}_i$ wirkt nur auf i-tes Teilchen in $|a_1, \dots, a_N\rangle$

- $\hat{W}(|\hat{\underline{r}}_i - \hat{\underline{r}}_j|)$ wirkt auf i-tes & j-tes Teilchen

im Ortsraum

$$\Psi(q_1, \dots, q_N, t) = \langle \underline{r}_1, m_{s_1}; \dots; \underline{r}_N, m_{s_N} | a_1, \dots, a_N \rangle$$

$$q_i = (\underline{r}_i, m_{s_i})$$

$$\rightarrow i\hbar \partial_t \Psi(q_1, \dots, q_N, t) = H \Psi(q_1, \dots, q_N, t)$$

- <u>Frage</u>: Macht es Sinn von <u>ununterscheidbaren</u> Teilchen zu sprechen und im N-Teilchenzustand jedem Teilchen einen bestimmten Zustand zuzuordnen?

<u>Antwort</u>: Nein

→ Führe daher N-Teilchenzustände ein, bei welchen diese Zuordnung nicht möglich ist.

- Dazu definiere: <u>Permutationsoperator</u> $\hat{P}_{ij}$ mittels

$$\hat{P}_{ij} |a_1, \dots, a_i, \dots, a_j, \dots, a_N\rangle = |a_1, \dots, \underset{\substack{\uparrow \\ i\text{-te Stelle}}}{a_j}, \dots, \underset{\substack{\uparrow \\ j\text{-te Stelle}}}{a_i}, \dots, a_N\rangle$$

- Aufgrund der Ununterscheidbarkeit müssen alle Observablen $\hat{O}$ & insbesondere der Hamilton-Operator $\hat{H}$ mit P_{ij} kommutieren:

$$[\hat{O}, \hat{P}_{ij}] = 0 = [\hat{H}, \hat{P}_{ij}]$$

$\Rightarrow P_{ij}$ ist eine Erhaltungsgröße & hat mit $\hat{H}$ gemeinsame Eigenzustände

• Bemerkung: $\hat{P}_{ij}$ ist hermitesch & unitär. $\mathbb{1} = \hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}^{+} = \hat{P}_{ij}^{2}$

$\boxed{\hat{P}_{ij}^{2} = \mathbb{1}}$ → zweimaliges Vertauschen zweier Teilchen liefert den ursprünglichen Zustand

⇒ Eigenwerte von $\hat{P}_{ij}$: $\lambda_{ij} = \pm 1$

d.h.: $\hat{P}_{ij}|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$

• Da $\hat{P}_{ij}$ eine Erhaltungsgröße ist, ist auch der Eigenwert ein „ewiges" Charakteristikum des Zustands!

• Betrachte speziell einfachstes N-Teilchensystem: $N=2$

2-Teilchenzustand $|a,b\rangle = |a\rangle_1 |b\rangle_2$

→ Dann ist $|a,b\rangle_s := \frac{1}{2}\left(1+\hat{P}_{12}\right)|a,b\rangle = \frac{1}{2}\left(|a,b\rangle + |b,a\rangle\right)$

ein Eigenzustand von $\hat{P}_{12}$ zum Eigenwert $+1$

$$\hat{P}_{12}|a,b\rangle_s = \frac{1}{2}\left(\hat{P}_{12}|a,b\rangle + \hat{P}_{12}|b,a\rangle\right)$$
$$= \frac{1}{2}\left(|b,a\rangle + |a,b\rangle\right) = +|a,b\rangle_s$$

und $|a,b\rangle_a := \frac{1}{2}\left(1-\hat{P}_{12}\right)|a,b\rangle = \frac{1}{2}\left(|a,b\rangle - |b,a\rangle\right)$

ein Eigenzustand von $\hat{P}_{12}$ zum Eigenwert -1.

• $|a,b\rangle_s$ bezeichnet man <u>symmetrischen</u> Zustand

$|a,b\rangle_a$ —— " —— <u>antisymmetrischen</u> – " –

• <u>Für N-Teilchensysteme</u>

Die $\hat{P}_{ij}$ kommutieren mit $\hat{H}$, aber i.A. <u>nicht</u> untereinander:

Bsp: $\hat{P}_{12}\,\hat{P}_{23}\,|a,b,c\rangle = \hat{P}_{12}\,|a,c,b\rangle = |c,a,b\rangle$
$$\neq$$
$\hat{P}_{23}\,\hat{P}_{12}\,|a,b,c\rangle = \hat{P}_{23}\,|b,a,c\rangle = |b,c,a\rangle$

→ Möglichkeit von komplizierten Symmetrieeigenschaften, nicht nur (anti-) symmetrischen Zustände.

↳ Jedoch: In der Natur sind nur Zustände realisiert, die bei Vertauschung zweier beliebiger ununterscheidbarer Teilchen symmetrisch oder antisymmetrisch sind.

→ $\mathcal{H}_N$ reduziert sich auf einen symmetrischen $(\mathcal{H}_N^+)$ und einen antisymmetrischen $(\mathcal{H}_N^-)$ Hilbert-Raum erlaubter Zustände.

• (Anti-) symmetrie ist ein Charakteristikum der Teilchensorte:

→ **Bosonen** sind Teilchen mit symmetrischen Zuständen

Bsp.: Higgs-Boson, Photon, Gluon, π-Meson, ^{23}Na, H_2
Phonon

„Bose-Einstein-Statistik"

→ **Fermion** sind Teilchen mit antisymmetrischen Zuständen

Bsp.: Elektron, Neutrino, Proton, Quark

„Fermi-Dirac-Statistik"

• Spin-Statistik-Theorem nach Pauli:

→ Bosonen haben ganzzahligen Spin, $S = 0, 1, 2, \ldots$

→ Fermionen haben halb-zahligen Spin, $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$

- <u>Pauli-Prinzip für Fermionen</u>

Die Wellenfunktion ist (total) antisymmetrisch

$\Rightarrow$ 2 Fermionen können sich nicht im gleichen Ein-Teilchenzustand befinden, „Pauli-Verbot". Denn:

$$|a,a\rangle_a = \frac{1}{2}\left(|a,a\rangle - |a,a\rangle\right) = 0$$

- Pauli-Prinzip ist Grundlage für den Aufbau des Periodensystems der Elemente, den Aufbau von Atomkernen, Bindung von Molekülen, Magnetismus ...

- <u>(Anti-) symmetrische N-Teilchenzustände</u>

$\rightarrow$ Antisymmetrisierungsoperator $\hat{A}$

oben: 2 Teilchen $\hat{A} = \frac{1}{2}(1 - \hat{P}_{12})$

Verallgemeinerung auf N Teilchen $\hat{A} := \frac{1}{N!}\sum_{\rho}(-1)^P \hat{P}_\rho$

$\hat{P}_\rho$ stellt die ρ-te Permutation von $(1,2,\ldots,N)$ dar

Es gibt $N!$ Permutationen. P ist die Zahl der Vertauschungen von je 2 Teilchen, d.h. $(-1)^P = \pm 1$ für $\begin{smallmatrix}\text{gerade}\\ \text{ungerade}\end{smallmatrix}$ Permutationen.

Damit: $|a_1,\ldots,a_N\rangle_a := \hat{A}\,|a_1,\ldots,a_N\rangle$

<u>Bsp.:</u> $N=3$

$$|a,b,c\rangle_a = \frac{1}{6}\Big[|a,b,c\rangle - |b,a,c\rangle + |b,c,a\rangle - |a,c,b\rangle + |c,a,b\rangle - |c,b,a\rangle\Big]$$

$\rightarrow$ <u>Symmetrisierungsoperator $\hat{S}$</u>

$$\hat{S} := \frac{1}{N!} \sum_{\wp} \hat{P}_{\wp}$$, analog wie bei $\hat{A}$ ohne (-1)

damit $|a_1, \ldots, a_N\rangle_S := \hat{S}\,|a_1, \ldots, a_N\rangle$