Summary: Spin

- Spin Operator $\hat{\underline{S}}$
- Pauli Spin Operator $\hat{\underline{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\underline{\sigma}}$
- Angular momentum relations

$$[\hat{S}_k, \hat{S}_l] = i\hbar \sum_{l=1} \varepsilon_{klm} \hat{S}_m$$

- Spin eigenstates $|s, m_s\rangle$
- Eigenvalue eqs.: $\hat{\underline{S}}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s, m_s\rangle$

$\hat{S}_3 |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle$

- 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 $\hat{\underline{\mu}} = g\frac{e}{2m_0}\hat{\underline{S}}$

$$\hat{V} = -\hat{\underline{\mu}}\cdot\underline{B} = \hbar\omega_e \hat{\sigma}_3, \quad \text{Larmor freq. } \omega_e = \frac{|e|B}{2m_0}$$

- Spin-Orbit Hilbertspace $\mathcal{H}_B \otimes \mathcal{X}_S \ni |\underline{r}, m_s\rangle$
- 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: $E = E_{n,l} + \mu_B B(m + 2m_s)$, $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_0}$

$\rightarrow$ 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

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

Quantenzahlen

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 $|a_1, \dots, a_N\rangle$

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

im Ortsraum

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

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

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

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

Antwort: Nein

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

• Dazu definiere: Permutationsoperator $\hat{P}_{ij}$ mittels

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

• 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. $\mathbb{1} = \hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}^{\dagger} = \hat{P}_{ij}^2$

$$\boxed{\hat{P}_{ij}^2 = \mathbb{1}}$$ → 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 $|a,b\rangle_s := \frac{1}{2}(1+\hat{P}_{12})|a,b\rangle = \frac{1}{2}(|a,b\rangle + |b,a\rangle)$

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

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

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

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

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

→ 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, $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$

- Pauli-Prinzip für Fermionen

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 ...

- (Anti-)symmetrische N-Teilchenzustände

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

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

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

$\hat{P}_g$ stellt die g-te Permutation von $(1,2,\dots,N)$ dar

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

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

Bsp.: $N=3$

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

$\rightarrow$ Symmetrisierungsoperator $\hat{S}$

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

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