

8.2 Matrixdarstellung der Drehimpulsoperatoren

Die gesuchten Matrixelemente der Operatoren sind (vgl. Übungsaufgabe)

$$\langle jm' | \hat{J}^2 | jm \rangle = \hbar^2 j(j+1) \delta_{m'm}, \quad (8.11)$$

$$\langle jm' | \hat{J}_z | jm \rangle = \hbar m \delta_{m'm}.$$

Außerdem gilt

$$\langle jm' | \hat{J}_{\pm} | jm \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \delta_{m', m \pm 1}. \quad (8.12)$$

Zum Beweis von (8.12), normieren wir zunächst die EF $\hat{J}_{\pm} | jm \rangle$

$$\hat{J}_+ | jm \rangle = C_+ | j, m+1 \rangle, \quad \hat{J}_- | jm \rangle = C_- | j, m-1 \rangle.$$

Für C_+ erhalten wir

$$\langle jm | \hat{J}_- \hat{J}_+ | jm \rangle \stackrel{\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z}{=} \langle \hat{J}_+ jm | \hat{J}_+ jm \rangle = C_+^2 \underbrace{\langle j, m+1 | j, m+1 \rangle}_{\text{seien normiert}} = C_+^2, \text{ also}$$

$$C_+^2 = \langle jm | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z | jm \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m^2 - m] \text{ und damit}$$

$$C_+ = \hbar \sqrt{j(j+1) - m^2 - m} = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)}.$$

$$\text{Für } C_- \text{ finden wir analog ausgehend von } \langle jm | \hat{J}_+ \hat{J}_- | jm \rangle \quad C_- = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)}.$$

Also ist

$$\underline{\hat{J}_{\pm} | jm \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} | j, m \pm 1 \rangle.}$$

Daraus folgt wie behauptet (8.12). Wie oben in (iv) verwendet ergibt sich (nur) für

$$m = m_{\max} = j \rightarrow \hat{J}_+ |jm\rangle = 0, \text{ denn } \hat{J}_+ |jj\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - j(j+1)} |j, j+1\rangle = 0,$$

und auch (nur) für

$$m = m_{\min} = -j \rightarrow \hat{J}_- |jm\rangle = 0, \text{ da } \hat{J}_- |j, -j\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) + j(-j-1)} |j, j-1\rangle = 0.$$

Aus $\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)$ und $\hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$ ergeben sich schließlich die Matrixelemente für die x- und die y- Komponente des Drehimpulsoperators.

Übungsaufgabe: Normieren Sie die Zustände $\hat{J}_\pm |jm\rangle$ und geben Sie die Matrixdarstellung der Operatoren $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_+$ und \hat{J}_- zur Basis $|jm\rangle$ an.

■ Wichtiges Beispiel: $j = \frac{1}{2} \rightarrow$ Pauli'sche Spin-Matrizen

Dann ist $2j+1 = 2$ und die Drehimpulsoperatoren sind 2×2 Matrizen. Die möglichen

m - Werte (ganzzahlige Schritte!) sind $m = \pm \frac{1}{2}$.

\hat{J}^2 und \hat{J}_z sind in der Basis $\left\{ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$ diagonal, aus (8.11) ergibt sich für $j = \frac{1}{2}$

$$\hat{J}^2 = \hbar^2 j(j+1) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{und} \quad \hat{J}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die EW von \hat{J}_z sind $\pm \frac{\hbar}{2}$.

Explizit ist $\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| \hat{J}_z \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2}$ und $\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| \hat{J}_z \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{\hbar}{2}$.

Desweiteren finden wir

$$\hat{J}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

denn von den vier möglichen Matrixelementen

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{J}_+ \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{J}_+ \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \hat{J}_+ \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \hat{J}_+ \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

ist wegen $\delta_{m', m+1}$ nur

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{J}_+ \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{m', m+1} \underset{j=\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2}}{=} \hbar \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) + \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}+1\right)} \underbrace{\delta_{m', m+1}}_{m'=\frac{1}{2}, m+1=-\frac{1}{2}+1=\frac{1}{2}} = \hbar$$

verschieden von Null. Analog finden wir

$$\hat{J}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

und damit

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ sowie } \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

\hat{J}_x , \hat{J}_y und \hat{J}_z hängen im Fall $j = \frac{1}{2}$ mit den **Pauli'schen Spinmatrizen** zusammen:

$$\underline{\text{Def.}}: \underline{s} = \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}, \quad \sigma_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (8.13)$$

vgl. Kap 8.5, Spin.

8.3 Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses \underline{L}

Der formale Übergang in die Ortsdarstellung erfolgt durch skalare Multiplikation der EWGen (8.2) mit dem Bra-Ortseigenzustand $\langle \underline{r} | : \langle \underline{r} | l m \rangle := \psi_{lm}(\underline{r})$. Die EW sind darstellungsunabhängig, d.h.

$$\hat{L}^2 \psi_{lm}(\underline{r}) = \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm}(\underline{r}), \quad \hat{L}_z \psi_{lm}(\underline{r}) = \hbar m \psi_{lm}(\underline{r})$$

Die Ortsdarstellung der Operatoren \hat{L}^2 und \hat{L}_z verschaffen wir uns am einfachsten über die Korrespondenzregel

$$\hat{L}^2 = (-i\hbar)^2 (\underline{r} \times \underline{\nabla})^2, \quad \hat{L}_z = -i\hbar (\underline{r} \times \underline{\nabla})_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Nützlich, insbesondere im Hinblick auf die Behandlung der Bewegung im Zentralfeld (Kapitel 9), ist vor allem die Ortsdarstellung von \hat{L} in Kugelkoordinaten r, ϑ, φ entsprechend $x = r \sin \vartheta \cos \varphi$, $y = r \sin \vartheta \sin \varphi$, $z = r \cos \vartheta$ (also mit z-Achse als „Drehachse“). Unter Verwendung von (MMP)

$$\underline{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \\ \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \text{ und } \underline{e}_r = \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}, \quad \underline{e}_\vartheta = \begin{pmatrix} \cos \vartheta \cos \varphi \\ \cos \vartheta \sin \varphi \\ -\sin \vartheta \end{pmatrix}, \quad \underline{e}_\varphi = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$

folgt nach einfacher Rechnung (prüfen!)

$$\hat{L}_z = -i\hbar r (\underline{e}_r \times \underline{\nabla}) = -i\hbar r \left(\underline{e}_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \underline{e}_\vartheta \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = -i\hbar \left\{ \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \begin{pmatrix} \text{ctg} \vartheta \cos \varphi \\ \text{ctg} \vartheta \sin \varphi \\ -1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\} \quad (8.14)$$

Daran anknüpfend finden wir (prüfen!)

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \dots = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \text{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (8.15)$$

und schließlich (prüfen)

$$\hat{\underline{L}}^2 = \hat{\underline{L}}_+ \hat{\underline{L}}_- + \hat{\underline{L}}_z^2 - \hbar \hat{\underline{L}}_z = \dots = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \vartheta} \left[\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (8.16)$$

Wie zu erwarten hängt $\hat{\underline{L}}$ bei Verwendung von Kugelkoordinaten nur von den beiden Winkeln ϑ und φ ab. Insbesondere gelten die beiden sehr nützlichen Relationen für die z-Komponente des Drehimpulsoperators und den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$\hat{\underline{L}}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \text{und} \quad \hat{\underline{V}}^2 = \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\underline{L}}^2}{r^2 \hbar^2}. \quad (8.17)$$

Aus der darstellungsunabhängigen EWG $\hat{\underline{L}}_z |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle$ wird in Kugelkoordinaten

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad \text{mit der Lösung (Separationsansatz)} \quad \underline{Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = e^{im\varphi} \Theta(\vartheta)}.$$

Da nur eindeutige Wellenfunktionen/Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten physikalisch sinnvoll sind, müssen wir

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi + 2\pi).$$

fordern. Daraus ergibt sich $e^{im2\pi} = 1$, d.h., m und auch l (wegen $-l \leq m \leq l$) müssen ganzzahlig sein.

FAZIT: (i) Bahndrehimpulse ($\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{r}} \times \hat{\underline{p}}$) werden durch ganzzahlige Quantenzahlen l und m

$$\underline{l = 0, 1, 2, 3, \dots}, \quad \underline{m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l} \quad (8.18)$$

charakterisiert.

(ii) Die Operatoren $\hat{\underline{L}}^2$ und $\hat{\underline{L}}_z$ sind in der Ortsdarstellung Differentialoperatoren.

Bemerkungen: 1) Beachte den Zusammenhang zwischen Drehoperator und Bahndrehimpulskomponente $\underline{n} \cdot \underline{L}$:

$$D_{\underline{n}}(\varphi) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\underline{n} \cdot \hat{L})\varphi\right).$$

2) Alternativ folgt $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ auch sofort durch direkten Übergang zu Kugelkoordinaten:

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} = \underbrace{r \sin \vartheta (-\sin \varphi)}_y \frac{\partial}{\partial x} + \underbrace{r \sin \vartheta \cos \varphi}_x \frac{\partial}{\partial y} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}; \text{ analog ergeben sich die}$$

Gleichungen (8.16) und (8.17).

• **Eigenfunktionen der Bahndrehimpulsoperatoren in Ortsdarstellung**

Den ϑ -Anteil der Wellenfunktion $Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = e^{im\varphi} \Theta_{lm}(\vartheta)$ hängt von beiden Quantenzahlen l und m ab. Wir bestimmen ihn rekursiv mit Hilfe der Leiteroperatoren (wie im Fall des

harmonischen Oszillators): $\hat{L}_+ |l, m\rangle = 0 \xrightarrow{\text{Ortsdarstellung}} \left(+ \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{im\varphi} \Theta_{l, m+1}(\vartheta) = 0,$

bzw. $\left(\frac{d}{d\vartheta} - i \operatorname{ctg} \vartheta \right) \Theta_{l, m-1}(\vartheta) = 0$ mit der Lösung $\Theta_{l, m-1}(\vartheta) = C_1 \sin^{l-m} \vartheta$ ($C_1 = \text{const}$). (8.19)

Durch Anwendung von \hat{L}_- auf $\Theta_{l, m}(\vartheta)$ berechnen wir $\Theta_{l, m-1}(\vartheta)$ usw. Im Ergebnis erhalten wir für die EF $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{e^{im\varphi}}{\sin^m \vartheta} \left(\frac{d}{d \cos \vartheta} \right)^{l-m} \sin^{2l} \vartheta, \begin{cases} l = 0, 1, 2, 3, \dots \\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \end{cases} \dots \quad (8.20)$$

Eine häufig verwendete, äquivalente Darstellung der \rightarrow Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (8.21)$$

basiert auf den zugeordneten Legendre-Polynomen

$$P_l^m(x) := \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l.$$

Die Kugelflächenfunktionen sind entsprechend

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (8.22)$$

normiert; $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ ist das Raumwinkelelement.

8.4 Spin

Aus der Elektrodynamik wissen wir, dass ein Kreisstrom (eine rotierende Ladungsverteilung) ein magnetisches Moment erzeugt.

Kreist eine Ladung q mit $v = |\underline{v}| = \text{const}$ auf einer Kreisbahn vom Radius r , dann ergibt sich

mit $\text{Strom} = \text{Ladung}/\text{Zeit}$ ein magnetisches Moment $\underline{\mu} = I \cdot A = \frac{qv}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{q}{2} v r$. Unter

Verwendung von $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$, also $L = m r v$ haben wir insgesamt

$$\underline{\mu} = \frac{q}{2m} \underline{L} \quad (8.23)$$

Der Quotient $\frac{q}{2m}$ heißt gyromagnetisches Verhältnis.

Die Energie des magnetischen Moments/Dipols im äußeren \underline{B} -Feld ist $V = -\underline{\mu} \cdot \underline{B}$.

■ Beispiel: Wasserstoff-Atom (H-Atom)

Für ein Elektron ($m = m_e$, $q = e$) tritt in der Hamilton-Funktion H_0 des H-Atoms im Fall eines

Magnetfelds mit $\underline{B} \parallel \underline{e}_z$ der Zusatzterm $V = -\frac{e}{2m_e} B L_z$ auf.

Nach dem Korrespondenzprinzip wird aus dem Hamiltonoperator \hat{H}_0 des freien

Wasserstoffatoms der Operator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \hat{H}_0 - \frac{e}{2m_e} B L_z$. Wir werden im folgenden

Kapitel 9 zeigen, dass \hat{H}_0 , \hat{L}^2 und \hat{L}_z kommutieren. Folglich sind auch \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z

vertauschbar, d.h., \hat{H} und \hat{H}_0 haben gemeinsame Eigenfunktionen, $\hat{H}|nlm\rangle = E_0^{(B \neq 0)}|nlm\rangle$.

Also ändert der Zusatzterm \hat{V} die EF nicht, verschiebt aber die Eigenwerte von \hat{H}_0 (die Energieniveaus) entsprechend

$$E_n^{(B \neq 0)} = E_n^{(B=0)} - \mu_B m B \quad \text{mit} \quad \underline{\mu}_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 0,579 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{T}} \rightarrow \text{Bohr'sches Magneton} \quad (8.24)$$

FAZIT: Jedes Energieniveau des H-Atoms spaltet im Magnetfeld in $2l + 1$ äquidistante Unterniveaus auf. Das äußere Magnetfeld hebt die Entartung bzgl. m auf. Wegen dieser Aufhebung der Entartung/Aufspaltung der Energieniveaus im \underline{B} -Feld wird m **Magnetquantenzahl** genannt.

Experimentell bestätigt sich die Vorhersage (8.24) in Form des (normalen) **Zeeman-Effekts**.

Interessanterweise wird aber zusätzlich eine magnetfeldbedingte Aufspaltung der Energieniveaus/Spektrallinien in eine gerade Anzahl von Unterniveaus beobachtet. Beispielsweise spaltet der Grundzustand $|100\rangle$ ($1s$ – Zustand) des H-Atoms trotz $l = 0$ in zwei Unterniveaus auf. Um diesen Befund zu erklären, vermutete Wolfgang Pauli 1924, dass es neben dem Bahndrehimpuls in der QM halbzahlige "Drehimpulse", den sogenannten Spin gibt. Diese Hypothese passt zu unseren Ergebnissen über verallgemeinerte Drehimpulsoperatoren \hat{J} aus Kap. 8.2 und wird durch weitere Experimente gestützt, z.B.:

(i): Stern-Gerlach Versuch: Ag-Atome durchlaufen inhomogenes \underline{B} -Feld.

Obwohl der $5s$ Zustand ("Leuchtelektron") mit $l = 0$ die Eigenschaften dominiert, wird eine Aufspaltung in zwei Strahlen beobachtet.

(ii): Ferromagnetismus

Einstein-de Haas-Experiment: Drehmoment auf ferromagnetische Probe bei Umkehr der Richtung des Magnetfeldes

(iii): Spin-Bahn-Wechselwirkung \rightarrow Feinstruktur der Spektren

(iv): Wechselwirkung mit dem Kernspin \rightarrow Hyperfeinstruktur der Spektren

(v): Spin-Statistik-Theorem, Quantenstatistik \rightarrow Bose- und Fermi-Gase

Dirac verdanken wir die Einsicht, dass der Spin ein relativistischer Effekt ist: In einer relativistisch invarianten Bewegungsgleichung des Elektrons \rightarrow **Dirac-Gleichung** (vgl. ThPh V, QM II) besitzt das Elektron e^- neben seiner Masse m_e und seiner Ladung $-e$ eine weitere intrinsische Eigenschaft "mit Drehimpulscharakter", den Spin $1/2$.

Offensichtlich müssen wir den in Kapitel 5.5 eingeführten 5 Postulaten der Quantenmechanik ein weiteres hinzufügen:

6. Postulat: In der QM können Teilchen einen intrinsischen Drehimpuls, den Spin besitzen.

Der Spin wird durch einen Vektoroperator $\underline{\hat{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)^T$ beschrieben. $\underline{\hat{S}}$ genügt der Drehimpulsalgebra $[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{S}_k$ (8.25)

Der Spin-Operator $\underline{\hat{S}}$ wirkt nicht im Ortsraum, sondern im Spinzustandsraum:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{Ort}} \otimes \mathcal{H}_{\text{Spin}} \quad \text{d.h.} \quad |\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} |\psi_s\rangle \\ \vdots \\ |\psi_{-s}\rangle \end{pmatrix}$$

\mathcal{H} -Raum der Teilchenzustände Ortszustandsraum Spinzustandsraum
 aufgespannt von $2s+1$ gemeinsamen EZ von $\underline{\hat{S}}^2$ und \hat{S}_z

- Beispiel: Elektron, $s = 1/2$

Der Spin $1/2$ ist eine intrinsische, d.h. untrennbar mit dem Elektron verbundene, unveränderliche Eigenschaft. Das bedeutet, es existiert kein Elektron ohne Spin $1/2$, genauso wie es kein Elektron ohne Ladung $-e$ und kein Elektron ohne Ruhemasse m_e gibt.

Der Wert $s = 1/2$ liegt fest; experimentell kann lediglich die Richtung des Spins geändert werden ($s_z = \pm \hbar/2$, spin-up oder spin-down).

Die halbklassische Veranschaulichung spricht von einem "Spinvektor" der Länge $\sqrt{3}/2 \hbar$ mit zwei möglichen Projektionen $\pm \hbar/2$ für die beiden möglichen Orientierungen "spin up", \uparrow , und "spin down", \downarrow , gegenüber dem äußeren \underline{B} -Feld. Die Neigung dieses "Spinvektors" gegen die z-Achse beträgt 55° ($\vartheta = \arccos(1/\sqrt{3}) = 55^\circ$). Während $s = \sqrt{3}/2 \hbar$ eine unveränderliche Eigenschaft des Elektrons ist (vergleichbar seiner Masse und seiner Ladung), besitzt s_z eine echte Dynamik, da der Spin zwischen \uparrow und \downarrow flippen kann (Flip-Dynamik).

Die Zustände

$$\left|s, \frac{1}{2}\right\rangle =: |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \left|s, -\frac{1}{2}\right\rangle =: |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

sind Eigenzustände von σ_z zu den Eigenwerten ± 1 . Die Produktwellenfunktion in der Ortsdarstellung lassen sich in der Form

$$\psi(\underline{r}, t) = \phi_{\uparrow}(\underline{r}, t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \phi_{\downarrow}(\underline{r}, t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

schreiben.

8.5 Spin $\frac{1}{2}$. Pauli-Gleichung

Der dimensionslose Proportionalitätsfaktor γ zwischen Drehimpuls \underline{J} und magnetischem Moment $\underline{\mu}$ wird gewöhnlich als Produkt aus Bohr'schem Magneton und g-Faktor geschrieben

$$\underline{\mu} = \gamma \underline{J} = g \mu_B \underline{J}$$

Der g- oder Lande-Faktor im gyromagnetischen Verhältnis $\gamma = g \mu_B$ ist für jede Teilchenart eine charakteristische Konstante, die experimentell ermittelt werden kann. Für das Bahndrehmoment des Elektrons ist $g = 1$ in Übereinstimmung mit (8.23) ("Kreisstrom")

$$\underline{\mu}_L = \frac{q}{2m} \underline{L} = \frac{e}{2m_e} \underline{L} = \frac{\mu_B}{\hbar} \underline{L}, \quad \mu_B = \frac{e \hbar}{2m_e}.$$

Dagegen wird für das Spinmoment des freien Elektrons ein etwa doppelt so großer g-Wert gemessen, d.h., in guter Näherung ist $g \approx 2$ ($g \cong 2.00232$)

$$\hat{\underline{\mu}}_S = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\underline{S}} = \mu_B \underline{\sigma}. \quad (8.22)$$

Beachte: Die Komponenten des Vektors $\underline{\sigma}$ sind die Spinmatrizen $\underline{\sigma} = \sigma_x \underline{e}_x + \sigma_y \underline{e}_y + \sigma_z \underline{e}_z$.

Die Abweichungen $g - 2$ sind von der Größenordnung der Sommerfeld'schen Feinstrukturkonstante $\alpha = e^2 / \hbar c \sim 1/137$. Sie kommen durch die Wechselwirkung des Elektrons mit seinem eigenen Strahlungsfeld zustande. Diese Wechselwirkung wird im Rahmen der Quantenelektrodynamik (QED) behandelt, die Bestandteil von QM II im Masterstudiengang ist.

Bei Nukleonen treten auch nicht ganzzahlige Werte für den g-Faktor auf. Aus dem Wert von g lässt sich schließen, ob für das atomare magnetische Moment vorwiegend Bahn- oder Spinnmomente verantwortlich sind.

Demnach besitzt das Elektron in einem äußeren Magnetfeld eine zusätzliche Energie

$$\hat{V} = -\mu_B \underline{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{B}} .$$

Pauli führte zur Beschreibung des qm Zustand des Elektrons eine zweizeilige Wellenfunktion (Spinzustandsraum ist für $s = 1/2$ zweidimensional) ein

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\underline{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\underline{r}, t) \end{pmatrix} \quad \rightarrow \text{Pauli-Spinor} . \quad (8.27)$$

Der Pauli-Spinor beschreibt das nichtrelativistische Elektron im Rahmen der QM vollständig. Beachte: Der Pauli-Spinor ist kein Vektor sondern ein Objekt im Spin-Zustandsraum. Bei Drehungen um 2π finden wir im Gegensatz zum Vektor

$$|\psi\rangle \rightarrow -|\psi\rangle ,$$

denn $e^{im\phi}$ ist $e^{i\frac{1}{2}\phi}$ und $e^{i\frac{1}{2}2\pi} = e^{i\pi} = \cos \pi + i \sin \pi = -1$.

Befindet sich nun ein Elektron ($m_e, -e, s = 1/2$) im elektromagnetischen Feld

(Vektorpotenzial $\underline{A}(\underline{r}, t)$, skalares Potenzial $\phi(\underline{r}, t)$), dann haben wir ausgehend von der Hamilton-Funktion des Elektrons (Kap. 2.2 und 2.8, Mechanik)

$$H(\underline{p}, \underline{r}, t) = \frac{1}{2m_e} (\underline{p} + e\underline{A})^2 - e\phi - \mu_B \underline{\sigma} \cdot \underline{\nabla} \times \underline{A}$$

über das Korrespondenzprinzip den Hamilton-Operator \hat{H} und die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H} = \overbrace{\frac{1}{2m_e} (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}})^2 - e\hat{\phi}}^{\text{Ortsraumoperator} \rightarrow \text{diagonal im Spinraum, d.h. multipliziert mit } \frac{1}{2}} - \overbrace{\mu_B \underline{\sigma} \nabla \times \hat{\mathbf{A}}}^{\text{nichtdiagonal im Spinraum, koppelt } \psi_\uparrow \text{ und } \psi_\downarrow}, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \rightarrow \text{Pauli (1927)}. \quad (8.28)$$

Die Gleichung (8.28) heißt Pauli-Gleichung. Sie entspricht (wie die Schrödinger-Gleichung) der nichtrelativistischen Energie-Impuls-Beziehung $E = p^2 / 2m_e$. Die korrekte relativistische Beschreibung des Elektrons auf der Basis der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung ... erfolgt durch die Dirac-Gleichung; das ist eine Differentialgleichung erster Ordnung für eine vierkomponentige Wellenfunktion (4-Spinor).

Zur Interpretation von $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\underline{\mathbf{r}}, t) \\ \psi_\downarrow(\underline{\mathbf{r}}, t) \end{pmatrix}$:

- $|\psi_\uparrow(\underline{\mathbf{r}}, t)|^2 d^3r$: Wahrscheinlichkeit, dass sich ein e^- mit "spin up" zu t am bei $\underline{\mathbf{r}}$ befindet,
- $(|\psi_\uparrow(\underline{\mathbf{r}}, t)|^2 + |\psi_\downarrow(\underline{\mathbf{r}}, t)|^2) d^3r$: Wahrscheinlichkeit, dass sich ein e^- zur Zeit t am Ort $\underline{\mathbf{r}}$ aufhält,
- $\int d^3r |\psi_\downarrow(\underline{\mathbf{r}}, t)|^2$: Wahrscheinlichkeit für "spin down" zur Zeit t , usw.

■ Beispiel: Spinpräzession im homogenen Magnet-Feld

Wir betrachten ein homogenes Magnetfeld in z-Richtung. Die Pauli-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\underline{\mathbf{r}}, t) \\ \psi_\downarrow(\underline{\mathbf{r}}, t) \end{pmatrix} = \hat{H} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\underline{\mathbf{r}}, t) \\ \psi_\downarrow(\underline{\mathbf{r}}, t) \end{pmatrix}, \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_B \mathbf{B} \hat{\sigma}_z = \hat{H}_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \mu_B \mathbf{B} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Sei \hat{H}_0 zeitunabhängig und $\hat{H}_0 \phi(\underline{\mathbf{r}}) = E \phi(\underline{\mathbf{r}})$. Der Separationsansatz

$$\begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\underline{\mathbf{r}}, t) \\ \psi_\downarrow(\underline{\mathbf{r}}, t) \end{pmatrix} = \phi(\underline{\mathbf{r}}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \begin{pmatrix} \mathbf{a}(t) \\ \mathbf{b}(t) \end{pmatrix}$$

führt auf

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \text{also} \quad \begin{aligned} i\hbar \frac{da}{dt} &= \mu_B B a \\ i\hbar \frac{db}{dt} &= -\mu_B B b \end{aligned} \quad \text{d.h.} \quad \begin{aligned} a(t) &= a(0) e^{-i\omega_L t} \\ b(t) &= b(0) e^{-i\omega_L t} \end{aligned} .$$

Folglich führt das Elektron eine Präzessionsbewegung um die Feldrichtung mit der Frequenz

$$\omega_L := \frac{\mu_B B}{\hbar} = \frac{eB}{2m_e} \quad \rightarrow \text{Larmor-Frequenz} \quad (8.29)$$

aus.