

3. Elektron spin als Drehimpuls

- Kraft auf Teilchen mit Bahndrehimpuls Null $\langle L_z \rangle = 0$ im Magnetfeld deutet auf weiteren Drehimpuls hin

↳ W. Pauli (1925) postuliert Spin als „Eigendrehimpuls“:

$$\vec{S} = (S_x, S_y, S_z) \text{ analog zu } \vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$$

$$\text{Ausatz f. } H = -\vec{B} \cdot \vec{\mu} = -\vec{B} \cdot \frac{q}{2m} \vec{L} \rightarrow -\vec{B} \cdot \frac{q}{2m} (\vec{L} + g \vec{S})$$

g : Proportionalitätskonstante, zu bestimmen

gesucht: Struktur von \vec{S} , Eigenfunktionen \vec{S}^2, S_z (analog zu \vec{L}^2, L_z)

Idee: \vec{S} als Drehimpuls mit analoge Vertauschungsrelationen wie \vec{L} fordern

- versuche bisherige Orts eigenstate zu retten, dh. $\psi(\vec{r}, t)$ soll ungebunden sein

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{\text{Übergang}} \bar{\psi}(\vec{r}, \vec{s}) \text{ aufgebaut aus } \underbrace{\bar{\psi}_{m_s}(\vec{s})}_{\text{neue Spin fkt.}} \underbrace{\varphi_n(\vec{r})}_{\text{bisherige Orts fktion}} \quad \text{analog: } \underbrace{Y_{lm}(\theta, \varphi)}_{\text{neue Spin fkt.}} \underbrace{\varphi_n(\vec{r})}_{\text{bisherige Orts fktion}}$$

$$l \leftrightarrow s$$

$$m_l \leftrightarrow m_s$$

a) Ansatz f. Spinor $\bar{\psi}(\vec{s})$, \vec{S} -Operator

Steu - ferlad: 2 Zustände, dh. statth $Y_{l=1, m_l} : m_l = -1, 0, 1$

$$\text{für Spin } Y_{s=1/2, m_s} : m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

Spinor $\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{s}, t) = \begin{pmatrix} \chi_+(\vec{r}, t) \\ \chi_-(\vec{r}, t) \end{pmatrix} = \chi_+(\vec{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \chi_-(\vec{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
 $u_s = \pm \frac{1}{2}$

Basis $\vec{\chi}_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{\chi}_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad + \hat{=} \uparrow, - \hat{=} \downarrow$

Spin: $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z) \quad u \quad S_i$

mit Forderung: $[S_i, S_j] \stackrel{!}{=} i \hbar \epsilon_{ijk} S_k$ und $[\vec{S}^2, S_i] \stackrel{!}{=} 0$

gesucht ist eine Darstellung der S_i :

Eigenwertproblem f. \vec{S}^2, S_z

mit Forderung: $\vec{S}^2 \vec{\chi}_\pm = \hbar^2 s(s+1) \vec{\chi}_\pm$

$S_z \vec{\chi}_\pm = \hbar u_\pm \vec{\chi}_\pm$

Wisse: $u_\pm = \pm s \quad \Downarrow \quad s = \frac{1}{2}$

$u_\pm = \pm \frac{1}{2}$ und $s = \frac{1}{2}$ sind aus Beobachtung und Analogie zu \vec{L} festgelegt

gesucht sind $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$

b) Bestimmung der Spin-Komponenten

- aus Eigenwertproblem (2d) \rightarrow einfachster Ansatz f. S_i sind 2×2 Matrizen

S_i soll Dimension v. Drehimpuls haben, also \hbar

- Hintereinander ausföhrbar via $S_i \hat{=} \text{Matrixmultiplikation}$

Spinmatrix S_z wird nach Pauli mit $S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ angesetzt

der Ansatz erfüllt:

i) $S_z \vec{\chi}_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \vec{\chi}_{\pm}$, einsetzen zum Test:

$$\oplus \quad \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \checkmark \quad \ominus \quad \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \checkmark$$

ii) $S_x^2 \vec{\chi}_{\pm} = \frac{3}{4} \hbar^2 \vec{\chi}_{\pm}$, einsetzen zum Test:

$$\left(S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 \right) \vec{\chi}_{\pm} = \frac{3}{4} \hbar^2 \vec{\chi}_{\pm}$$

$$\begin{aligned} \text{zurück} \quad S_z^2 \vec{\chi}_{\pm} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \vec{\chi}_{\pm} \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \vec{\chi}_{\pm} \end{aligned}$$

aus Symmetriegründe $S_x^2 \vec{\chi}_{\pm} = S_y^2 \vec{\chi}_{\pm} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \vec{\chi}_{\pm}$

alle aufsummieren \checkmark

Spinmatrizen S_x, S_y : $S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \kappa & \beta \\ \mu & \delta \end{pmatrix}$

Einträge sind zu bestimmen, dazu (i) Anti-Kommutatorrelation
(ii) Kommutatorrelation

i) Anti-Kommutator

Def: $[S_x, S_y]_{\pm} = S_x S_y + S_y S_x = \left| [S_x, S_z] = -i\hbar S_y \right|$

$$\begin{aligned}
&= \frac{i}{\hbar} \underline{S}_x (\underline{S}_x \underline{S}_z - \underline{S}_z \underline{S}_x) + \frac{i}{\hbar} (\underline{S}_x \underline{S}_z - \underline{S}_z \underline{S}_x) \underline{S}_x \\
&= \frac{i}{\hbar} \left(\underline{S}_x^2 \underline{S}_z - \underline{S}_x \underline{S}_z \underline{S}_x + \underline{S}_x \underline{S}_z \underline{S}_x - \underline{S}_z \underline{S}_x^2 \right) \\
&= \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{4} \underline{1} \underline{S}_z - \underline{S}_z \frac{\hbar^2}{4} \underline{1} \right) = 0
\end{aligned}$$

→ Antikommutator vertauscht

$$\text{allg. gilt: } \tilde{u}_A [\underline{S}_i, \underline{S}_j]_+ = i \frac{\hbar^2}{2} \delta_{ij}$$

wir wollen nun a, b, c, d bestimmen:

$$(\underline{S}_x \underline{S}_z + \underline{S}_z \underline{S}_x) \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \cdot \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 2a & 0 \\ 0 & -2d \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow a = 0 = d$$

dasselbe mit \underline{S}_y statt $\underline{S}_x \rightarrow a = 0 = d$

$$\text{Monoton: } \underline{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & b \\ c & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \beta \\ \gamma & 0 \end{pmatrix}$$

ii) Kommutator $[\underline{S}_x, \underline{S}_y]$

$$(\underline{S}_x \underline{S}_y - \underline{S}_y \underline{S}_x) \stackrel{!}{=} i \frac{\hbar}{2} \underline{S}_z$$

$$\frac{\hbar^2}{4} \left(\begin{pmatrix} 0 & b \\ c & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \beta \\ \gamma & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \beta \\ \gamma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & b \\ c & 0 \end{pmatrix} \right) \stackrel{!}{=} i \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

führt auf $b\gamma - \beta c = 2i$ (1)

$c\beta - \gamma b = -2i$ (2) (Diagonal ableiten)

iii) Nachweis von \underline{S}_i^2

$$\underline{S}_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & b \\ c & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & b \\ c & 0 \end{pmatrix}$$

$bc = 1$, analog $\underline{S}_y^2 \rightarrow \beta\gamma = 1$ (Diagonal ableiten)

(3) (4)

iv) 4 Gleichungen f. 4 Unbekannte b, c, β, γ :

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

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

$$\underline{S}_x = \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}_x, \quad \underline{S}_y = \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}_y, \quad \underline{S}_z = \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}_z$$

Pauli Spin Matrizen: $\underline{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Wen Observable Spin folgt

$$\vec{\psi}(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}, t) \\ \psi_-(\vec{r}, t) \end{pmatrix} \quad \text{"Spinor" = Vektorfeldchen}$$

4. Pauli-gleichung f. 2d Spinores

a) Kopplung v. Elektron an externes Magnetfeld

$$\underline{H}_{\text{Pauli}} = \underline{H}_S - \vec{\mu}_B \cdot \vec{B} - \vec{\mu}_S \cdot \vec{B}$$

(Schrödinger) B-Bahndrehimpuls S-Spindrehimpuls

$$\vec{\mu}_S = \frac{q}{2m} g \vec{S} \qquad \vec{\mu}_B = \frac{q}{2m} \vec{L}$$

g-Bestimmung: Diracgleichung liefert $g_e = 2$
 QED liefert $g_e = 2,001 \dots$

Proton: $g_{\text{pro}} = 5,6$

b) Pauli-gleichung als Matrixgleichung:

Einschränkung:

$\vec{B} = B_z e_z$ $q = -e$
 \underline{H} um β so konstruiert werden, daß $\vec{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$, Bohrscher Magneton $\mu_{\text{Bohr}} = \frac{e}{2m} B_z$

$$\underline{H}_{\text{Pauli}} = \begin{pmatrix} H_S & 0 \\ 0 & H_S \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mu_{\text{Bohr}} L_z & 0 \\ 0 & \mu_{\text{Bohr}} L_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mu_{\text{Bohr}} g \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\mu_{\text{Bohr}} g \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}$$

gilt dieselbe Gleichung f. ψ_{\pm}

$$\underline{H}_{\text{Pauli}} = \begin{pmatrix} H_S + \mu_{\text{Bohr}} \left(L_z + \frac{\hbar}{2} g \right) & 0 \\ 0 & H_S + \mu_{\text{Bohr}} \left(L_z - \frac{\hbar}{2} g \right) \end{pmatrix}$$

Wicht: ψ_{\pm} nicht verschaltet: $H_{\text{pert.}} \vec{\chi} \approx$

$$\frac{H_{\pm}^{\pm}}{-p_{\text{rot.}}} \psi_{\pm} = \left(H_S + \mu_{\text{rot.}} \left(L_z + \frac{\hbar}{2} g \right) \right) \psi_{\pm}$$

station $\rightarrow = E_{\pm} \psi_{\pm}$
 zeitab- $\rightarrow = i \hbar \partial_t \psi_{\pm}$
 hängig

Eigenwertproblem verwenden.

$$H_S \psi_{\text{el.}} = \epsilon_{\text{el.}} \psi_{\text{el.}}$$

$$L_z \psi_{\text{el.}} = \hbar m_l \psi_{\text{el.}}$$

$$\nabla_z^2 \vec{\chi}_{\pm} = \pm \vec{\chi}_{\pm}$$

um stationäre Schrödgl. f. ψ_{\pm} und χ_{\pm} zu lösen mittels: $\psi_{\pm} = \psi_{\text{el.}}^{\pm}$

$$E_{\pm} = \epsilon_{\text{el.}} + \mu_{\text{rot.}} \hbar \left(m_l \pm \frac{g}{2} \right)$$

f. $m_l = 0$ (Kein Drehimpuls) \exists unterschiedliche Energien f. Spinzustand $\vec{\chi}_{\pm}$

in 1ten. jedoch: $\langle f_z \rangle \approx \langle \vec{\mu}_S \rangle_{\pm} \approx \pm \mu_{\text{rot.}} \frac{g}{2}$ Spinbew. \rightarrow gebrochen