VI.7. Spin (Eigendrehimpuls)

Experimenteller Hinweis auf die Existenz des Spins der Elektrons

Stern-Gerlach-Experiment (~ 1926)

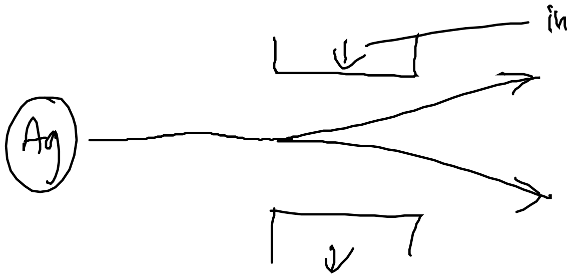
mit Silberatomen (Ag), dominierender Zustand: 5s-Elektronen
(innere Schalen sind "aufgefüllt")

$\Downarrow$

Bahndrehimpuls $l=0$

$\Rightarrow m=0$

$\Rightarrow$ in einem Magnetfeld würde man keine Aufspaltung erwarten, da $m=0$!! (Erinnerung Zeeman-Effekt: Aufhebung der m-Entartung)



inhomogenes Magnetfeld $\underline{B}(\underline{r})$ $\Rightarrow$ Kraft $\underline{F} \sim \nabla \underline{B}(\underline{r})$

2-fache Aufspaltung trotz $l=m=0$!!

Widerspruch kann aufgelöst werden, wenn man annimmt, dass die Elektronen außer dem Bahndrehimpuls ($\underline{L}$) noch einen sogenannten Spin (Eigendrehimpuls) besitzen!

VI.7.1. Spinoperatoren, Pauli-Matrizen

Spinoperator $\hat{\underline{S}}$

$\hat{\underline{S}}$ ist gewöhnlicher Drehimpuls im folgenden Sinne:

i) Es gelten die (für Drehimpulse) üblichen Vertauschungsregeln.

$$\left.\begin{aligned}[\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hbar \hat{S}_z \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= i\hbar \hat{S}_x \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] &= i\hbar \hat{S}_y\end{aligned}\right\} \Rightarrow \quad \hat{\underline{S}} \times \hat{\underline{S}} = i\hbar \hat{\underline{S}}$$

$$\text{und } [\underbrace{\hat{\underline{S}}^2}_{\hat{S}_x^2+\hat{S}_y^2+\hat{S}_z^2}, \hat{S}_z] = 0$$

ii) Eigenwertgleichungen

$$\hat{\underline{S}}^2 |S, m_S\rangle = \hbar^2 S(S+1) |S, m_S\rangle$$

$$\hat{S}_z |S, m_S\rangle = \hbar m_S |S, m_S\rangle$$

Als mögliche Werte für die Quantenzahl S ergibt sich
(hier keine Begründung!!)
erst in der relativist. QM bzw. Quantenelektrodynamik

$$\Rightarrow S = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$$

$$m_S = -S, \ldots, S$$

in ganzzahligen Schritten!

Anders als beim Bahndrehimpuls l: dort nur ganzzahlige Werte möglich!!

Beachte:

Im Unterschied zum Bahndrehimpuls ist S unveränderlich!
S ist "Teilcheneigenschaft"!

Unterscheidung:

- Teilchen mit halbzahligem Spin heißen „Fermionen" z.B. Elektronen, Protonen, Neutronen

$$S = \frac{1}{2} \quad \left(\Rightarrow m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right)$$

- Teilchen mit ganzzahligem Spin heißen „Bosonen"

z.B. π-Mesonen: $S = 0$

Photon : $S = 1$

VI.7.2. Spezialfall $S = \frac{1}{2}$

Elektronen!!

$S = \frac{1}{2} \Rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2}$ (daher Aufspaltung in $\underline{\underline{2}}$ Strahlen bei Stern-Gerlach!)

$\Rightarrow$ zweidimensionaler "Spin-Hilbertraum" $\mathcal{H}_S$

Für $S = \frac{1}{2}$ benutzt man häufig statt $\hat{\underline{S}}$ den Operator $\hat{\underline{\sigma}}$ mit

$$\hat{\underline{S}} =: \frac{\hbar}{2} \hat{\underline{\sigma}}$$

und folgende Notation für die Eigenzustände:

$$|S = \tfrac{1}{2}, m_s = \tfrac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle \quad \text{„Spin up"}$$

$$|S = \tfrac{1}{2}, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle \quad \text{"Spin down"}$$

Dann gilt (als Konsequenz der allgemeinen Eigenschaft von $\hat{\vec{S}}$):

$$\underbrace{\frac{\hbar^2}{4}\hat{\vec{\sigma}}^2}_{\hat{\vec{S}}^2} |\uparrow\rangle = \underbrace{\hbar^2 \tfrac{3}{4}}_{\hbar^2 s(s+1)} |\uparrow\rangle \iff \boxed{\begin{aligned} \hat{\vec{\sigma}}^2 |\uparrow\rangle &= 3 |\uparrow\rangle \\ \text{analog} \quad \hat{\vec{\sigma}}^2 |\downarrow\rangle &= 3 |\downarrow\rangle \end{aligned}}$$

$$\underbrace{\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z}_{\hat{S}_z} |\uparrow\rangle = \underbrace{\frac{\hbar}{2}}_{\hbar m_s} |\uparrow\rangle \iff \boxed{\begin{aligned} \hat{\sigma}_z |\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle \\ \text{analog} \quad \hat{\sigma}_z |\downarrow\rangle &= -|\downarrow\rangle \end{aligned}}$$

$\Rightarrow$ Eigenwerte ± 1

Vertauschungsregeln:

$$[\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] = 2i\hat{\sigma}_l \quad \text{(zyklisch)}$$

Bemerkung:

Die $s=\frac{1}{2}$ - Eigenzustände $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ bilden eine Basis von $\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}}$!

also:

$$\left.\begin{aligned} \langle\uparrow|\uparrow\rangle &= \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1 \\ \langle\uparrow|\downarrow\rangle &= \langle\downarrow|\uparrow\rangle = 0 \end{aligned}\right\} \text{Orthonormierung}$$

$$|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \hat{1} \qquad \text{Vollständigkeit}$$

Frage:
Wir wissen bereits, wie $\hat{\vec{\sigma}}^2$ und $\hat{\sigma}_z$ auf die Eigenzustände wirken. Wie wirken $\hat{\sigma}_x$ und $\hat{\sigma}_y$?

Führe dazu ein:

$$\hat{\sigma}_\pm := \hat{\sigma}_x \pm i\,\hat{\sigma}_y$$

analog zu den Leiteroperatoren beim Bahndrehimpuls

(nicht hermitesch!)

Es soll gelten:

$$(**)\quad \hat{\sigma}_+|\downarrow\rangle = \alpha\,|\uparrow\rangle\,, \quad \hat{\sigma}_+|\uparrow\rangle = 0$$

$$\hat{\sigma}_-|\uparrow\rangle = \beta\,|\downarrow\rangle\,, \quad \hat{\sigma}_-|\downarrow\rangle = 0$$

α,β Konstanten, die noch zu bestimmen sind

setze Def. von $\hat{\sigma}_\pm$ ein

$$(*)\quad \hat{\sigma}_x|\uparrow\rangle = -i\,\hat{\sigma}_y|\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle = i\,\hat{\sigma}_y|\downarrow\rangle$$

Berechnung von α,β

$$\langle\alpha\uparrow|\alpha\uparrow\rangle = \alpha^*\alpha\,\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \alpha^*\alpha$$

$$\overset{(**)}{=} \langle\hat{\sigma}_+\downarrow|\hat{\sigma}_+\downarrow\rangle$$

$$= \langle\downarrow|\hat{\sigma}_+^+\hat{\sigma}_+|\downarrow\rangle \qquad \hat{\sigma}_+^+ = \hat{\sigma}_-$$

$$= \langle\downarrow|\hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+|\downarrow\rangle$$

$$= \langle\downarrow|(\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y)(\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y)|\downarrow\rangle$$

$$= \langle\downarrow|\underbrace{\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2} + i\underbrace{[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y]}_{2i\hat{\sigma}_z}|\downarrow\rangle$$

$$= \langle\downarrow|\underline{\hat{\sigma}}^2 - \hat{\sigma}_z^2 - 2\hat{\sigma}_z|\downarrow\rangle$$

Benutze Eigenwertgleichungen von $\underline{\hat{\sigma}}^2, \hat{\sigma}_z$

$$= (3 - 1 + 2)\underbrace{\langle\downarrow|\downarrow\rangle}_{1} = \underline{\underline{4}}$$

also $\alpha^*\alpha = 4 \Rightarrow |\alpha| = 2$

Folgerung für β:

$$\langle\uparrow|\hat{\sigma}_+|\downarrow\rangle = \alpha\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \alpha$$

$$= \langle\hat{\sigma}_+^+\uparrow|\downarrow\rangle = \langle\hat{\sigma}_-\uparrow|\downarrow\rangle = \beta^*\underbrace{\langle\downarrow|\downarrow\rangle}_{1} = \beta^*.$$

$\hat{\sigma}_-|\uparrow\rangle = \beta|\downarrow\rangle$

$$\Rightarrow \beta^* = \alpha$$

Wähle o.B.d.A. $\alpha = \beta = 2$

Folgerung:

(*) $\hat{\sigma}_x|\uparrow\rangle = -i\hat{\sigma}_y|\uparrow\rangle$

$\hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle = i\hat{\sigma}_y|\downarrow\rangle$

$$\hat{\sigma}_+|\downarrow\rangle = 2|\uparrow\rangle$$

$$\Leftrightarrow (\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y)|\downarrow\rangle = 2|\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle + i\hat{\sigma}_y|\downarrow\rangle = 2|\uparrow\rangle$$

$$\overset{(*)}{\Longleftrightarrow} \hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle + \hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle = 2\hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

analog findet man: $\hat{\sigma}_x|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$

und für $\hat{\sigma}_y$:

$$\hat{\sigma}_y|\uparrow\rangle = i|\downarrow\rangle$$
$$\hat{\sigma}_y|\downarrow\rangle = -i|\uparrow\rangle$$

Man erkennt: $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ wirken als „Spin-Flip-Operatoren".

Darstellung der Spin-Operatoren durch Matrizen

$$(\hat{\sigma}_i)_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \langle\uparrow|\hat{\sigma}_i|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\hat{\sigma}_i|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|\hat{\sigma}_i|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\hat{\sigma}_i|\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

$i = x, y, z$

Matrixelemente $\alpha, \beta = 1, 2$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

„Pauli'sche Spinmatrizen"

VI.7.2. Spin und magnetisches Moment

Wir wissen:

Der Bahndrehimpuls $\hat{\underline{L}}$ ist mit einem magnetischen Moment verknüpft:

$$\hat{\underline{m}}_L = -\frac{e_0}{2m_e}\hat{\underline{L}} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\hat{\underline{L}}$$

für Elektronen mit Ladung $q = -e_0$ (Elementarladung) und Masse m_e,

$\mu_B = \frac{\hbar e_0}{2m_e}$ Bohr'sches Magneton

"hergeleitet" mit Hilfe des Korrespondenzprinzips aus der klass. Physik!

Spin: ist kein klassisches Konzept!!

$\Rightarrow$ Definition des entsprechenden magnet. Moments ??

(Es ist klar, dass es ein magnet. Moment geben muß, da Wechselwirkung mit einem Magnetfeld (Stern-Gerlach))

Ansatz: $\underline{\hat{m}}_S = \mu_S \underline{\hat{S}}$ (analog Bahndrehimpuls)

Für Elektronen gilt:

$$\mu_S = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \quad \text{mit} \quad g = 2.002319\ldots$$

„Landé-Faktor"

Herleitung aus relativist. QM
Dirac-Theorie

$$g = 2\left(1 + \underbrace{\frac{\alpha}{2\pi}}_{\text{Feinstruktur-Konstante}} + \ldots\right)$$

experimentell beobachtet man
$g = 2$

Gesamtes magnetisches Moment des Elektrons

$$\underline{\hat{m}} = \underline{\hat{m}}_L + \underline{\hat{m}}_S$$
$$= -\frac{\mu_B}{\hbar}\left(\underline{\hat{L}} + 2\underline{\hat{S}}\right) = -\frac{\mu_B}{\hbar}\left(\underline{\hat{L}} + \hbar\underline{\hat{\sigma}}\right)$$

$\Rightarrow$ Für Elektronen in einem äußeren Magnetfeld $\underline{B}$ gibt es folgenden Zusatzterm im Hamilton-Operator

$$\hat{H}_{Feld} = -\underline{\hat{m}} \cdot \underline{B} = \frac{\mu_B}{\hbar}\left(\underline{\hat{L}} + \hbar\underline{\hat{\sigma}}\right) \cdot \underline{B}$$

Voller Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \underbrace{V(r)}_{\text{z.B. Coulombpotential}} + \hat{H}_{Feld}$$

Beachte: Dieser Ansatz vernachlässigt die sogenannte Spin-Bahn-Wechselwirkung, diese führt zu einem Zusatzterm der Form $\sim \underline{\hat{L}} \cdot \underline{\hat{\sigma}}$!

relativist. QM

Konzentriere wieder auf den Fall
<u>ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung</u>:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} + V(\underline{r}) + \frac{\mu_B}{\hbar}\left(\underline{\hat{L}} + \hbar\underline{\hat{\sigma}}\right)\cdot \underline{B}$$

es gilt: $[\hat{\underline{p}}, \hat{\underline{\sigma}}] = 0 \quad , \quad [\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{\sigma}}] = 0$

und $[\hat{\underline{L}}, \hat{\underline{\sigma}}] = 0$

$$\Longrightarrow [\hat{H}, \hat{\underline{\sigma}}] = 0$$

$\Longrightarrow$ Die Eigenzustände von $\hat{H}$ mit Spin (aber ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung) können als <u>Produktzustände</u> geschrieben werden!

$$|n, l, m, m_s\rangle = \underbrace{|n, l, m\rangle}_{\text{Eigenzustand des Bahndrehimpulses}} \underbrace{|m_s\rangle}_{\text{Eigenzustand des Spins}} \in \overbrace{\mathcal{H}_{\text{Bahn}} \otimes \mathcal{H}_{\text{Spin}}}^{\text{Produkt aus Hilberträumen}}$$

ohne äußeres $\underline{B}$-Feld ist jeder Bahndrehimpuls-Eigenzustand 2-fach entartet ($m_s = \pm\frac{1}{2}$)

Im äußeren $\underline{B}$-Feld Aufhebung dieser Entartung ($\rightarrow$ Stern-Gerlach)

$\overline{\text{VII}}$. Näherungsverfahren

$\overline{\text{VII}}$.1. Zeitunabhängige Störungstheorie (Schrödinger)

$\Rightarrow$ für Probleme, bei denen sich der Hamiltonoperator $\hat{H}$ additiv in einen ungestörten Anteil ($\hat{H}_0$) und eine Störung ($\hat{H}_1$) zerlegen läßt

zeitunabhängige

also $\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1}$

Voraussetzungen: – Eigenwertproblem zu $\hat{H}_0$ exakt lösbar

– Störung klein !!

Beispiel: schwaches äußeres elektr. oder magnet. Feld...