

VI.7. Spin (Eigendrehimpuls)

Experimenteller Hinweis auf die Existenz des Spins der Elektronen

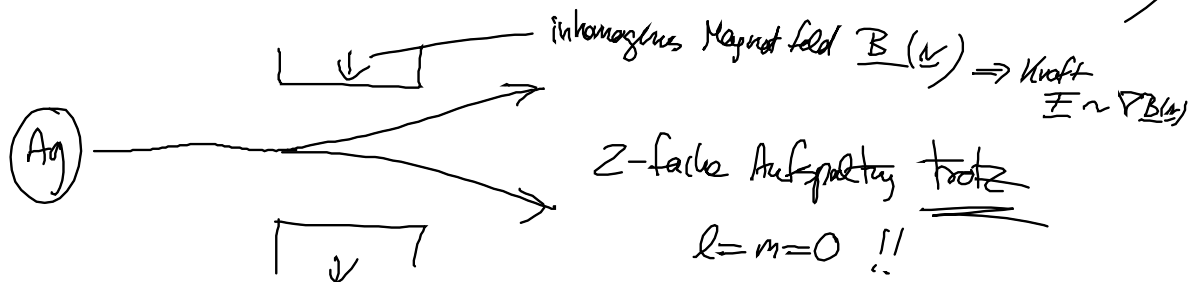
Stem-Gelach-Experiment (~ 1926)

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

\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)



Widerspruch kann aufgelöst werden, wenn man annimmt, dass die Elektronen außer dem Bahndrehimpuls (l) noch einen sogenannten Spin (Eigendrehimpuls) besitzen!

VI.7.1. Spinoperatoren, Pauli-Matrizen

Spinoperatoren \hat{S}

\hat{S} ist gewöhnlicher Drehimpuls in folgendem Sinne:

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

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

und $[\hat{S}_z^2, \hat{S}_z] = 0$
 $\leftarrow \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$

ii) Eigenwertgleichungen

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

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

Als mögliche Werte für die Quantenzahl S ergibt sich

(hier keine Begründung!!)

erst in der relativist. QM bzw. Quantenfeldtheorie

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

$$m_S = -S, \dots, S$$

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

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

• Teilchen mit ganzzahligen Spin heißen „Bosonen“

z.B. π -Mesonen: $S=0$
Photonen: $S=1$

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

Elektronen!!

$$S = \frac{1}{2} \Rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2}$$

(daher Aufspaltung in
2 Strahlen bei Stern-Zerfall!)

\Rightarrow Zweidimensionaler „Spin-Hilbertraum“
 \mathcal{H}_S

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

und folgende Notation für die Eigenzustände:

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

$$|S=\frac{1}{2}, m_s=-\frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle \quad \text{„Spin down“}$$

Dann gilt (als Konsequenz der allgemeinen Eigenschaft von \hat{S}^2):

$$\frac{\hbar^2}{4} \hat{S}^2 |\uparrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4} 3 |\uparrow\rangle$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\begin{aligned} \hat{S}^2 |\uparrow\rangle &= 3 |\uparrow\rangle \\ \hat{S}^2 |\downarrow\rangle &= 3 |\downarrow\rangle \end{aligned}}$$

analog

$$\frac{\hbar}{2} \hat{S}_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\begin{aligned} \hat{S}_z |\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle \\ \hat{S}_z |\downarrow\rangle &= -|\downarrow\rangle \end{aligned}}$$

analog

→ Eigenwert ± 1

Vertauschungsregeln:

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

Bemerkung:

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

also:

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

$$|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \mathbb{1} \quad \text{Vollständigkeit}$$

Frage:

Wir wissen bereits, wie \hat{S}^2 und \hat{S}_z auf die Eigenzustände wirken. Wie wirken \hat{S}_x und \hat{S}_y ?

Führe dazu ein:

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

(nicht hermitisch!)

analog zu den Ladderoperatoren
kein Bahndrehimpuls

Es soll gelten:

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

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

α, β Konstanten,
die noch zu bestimmen
sind

setze Def. von
 \hat{G}_{\pm} ein

$$(*) \begin{aligned} \hat{G}_x |\uparrow\rangle &= -i \hat{G}_y |\uparrow\rangle \\ \hat{G}_x |\downarrow\rangle &= i \hat{G}_y |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Berechnung von α, β

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

$$(*) \hat{G}_+ |\downarrow\rangle = \hat{G}_+ \hat{G}_+ |\downarrow\rangle$$

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

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

$$\hat{G}_+ = \hat{G}_-$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \downarrow | (\hat{G}_x - i\hat{G}_y)(\hat{G}_x + i\hat{G}_y) | \downarrow \rangle \\
&= \langle \downarrow | \underbrace{\hat{G}_x^2 + \hat{G}_y^2}_{2\hat{G}_z} + i \underbrace{[\hat{G}_x, \hat{G}_y]}_{2i\hat{G}_z} | \downarrow \rangle \\
&= \langle \downarrow | \hat{G}_x^2 - \hat{G}_y^2 - 2\hat{G}_z | \downarrow \rangle
\end{aligned}$$

benutze
Eigenwertgleichung
von \hat{G}_x, \hat{G}_z

$$= (3 - 1 + 2) \underbrace{\langle \downarrow | \downarrow \rangle}_1 = 4$$

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

Folgerung für β :

$$\begin{aligned}
\langle \uparrow | \hat{G}_+ | \downarrow \rangle &= \alpha \langle \uparrow | \uparrow \rangle = \alpha \\
&= \langle \hat{G}_+^{\uparrow} | \downarrow \rangle = \langle \hat{G}_-^{\uparrow} | \downarrow \rangle = \beta^* \underbrace{\langle \downarrow | \downarrow \rangle}_1 = \beta^* \\
&\quad \uparrow \\
&\quad \hat{G}_- | \uparrow \rangle = \beta | \downarrow \rangle
\end{aligned}$$

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

Wähle o.B.d.A. $\alpha = \beta = 2$

Folgerung:

$$\hat{G}_x |\downarrow\rangle = 2 |\uparrow\rangle$$

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

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

$$\Leftrightarrow \hat{G}_x |\downarrow\rangle + \hat{G}_x |\downarrow\rangle = 2 \hat{G}_x |\downarrow\rangle$$

$$\begin{aligned} \oplus \hat{G}_x |\uparrow\rangle &= -i\hat{G}_y |\uparrow\rangle \\ \hat{G}_x |\downarrow\rangle &= i\hat{G}_y |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

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

analog findet man:

$$\hat{G}_x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$$

und für \hat{G}_y :

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

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

Man erkennt \hat{G}_x, \hat{G}_y wirken als
"Spin-Flip-Operatoren".

Darstellung der Spin-Operatoren durch Matrizen

$$\left(\hat{G}_i \right)_{\substack{\text{als} \\ \text{Matrixelemente} \\ i=x,y,z \\ \alpha,\beta=1,2}} = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \hat{G}_i | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | \hat{G}_i | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | \hat{G}_i | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | \hat{G}_i | \downarrow \rangle \end{pmatrix}$$

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

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

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

„Pauli'sche
Spinmatrizen“

VI.7.2. Spin und magnetisches Moment

Wir wissen:

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

$$\begin{aligned} \underline{\hat{m}} &= -\frac{e_0}{2m_e} \underline{\hat{L}} \\ &= -\frac{\mu_B}{\hbar} \underline{\hat{L}} \end{aligned}$$

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

$$\mu_B = \frac{\hbar e_0}{2m_e} \text{ Bohrsches Magneton}$$

„hergeleitet“ mit Hilfe des Korrespondenzprinzips aus der
Klass. Physik!

Spin: ist kein klassisches Konzept!!

⇒ Definition des entsprechenden magnet. Moments??

(Es ist klar, dass es ein magnet. Moment geben muss,
da Wechselwirkung mit einem Magnetfeld (Strom-Leiterschleife))

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

Für Elektronen gilt:

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

experimentell beobachtet man $g=2$

„Lande-Faktor“
Herleitung aus relativist. QM
Dirac-Theorie

$$g = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots \right)$$

Feynman-Hellmann-Konstante

Gesamtes magnetisches Moment des Elektrons

$$\hat{\underline{m}} = \hat{\underline{m}}_L + \hat{\underline{m}}_S$$

$$= -\frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{\underline{L}} + 2\hat{\underline{S}}) = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{\underline{L}} + \hat{\underline{S}} + \hat{\underline{S}})$$

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

$$\hat{H}_{\text{feld}} = -\hat{\underline{m}} \cdot \underline{B} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{\underline{L}} + \hat{\underline{S}}) \cdot \underline{B}$$

Voller Hamiltonian:

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{p}^2}_{\text{kin}} + \underbrace{V(r)}_{\text{pot.}} + \hat{H}_{\text{feld}}$$

z.B.
Coulombpotential

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

Konzentriere wieder auf den Fall
ohne Spin-Bahn-Wechselw.:

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{p}^2}_{2m} + V(r) + \frac{\mu_B}{\hbar} (\underline{\hat{L}} + \hbar \underline{\hat{S}}) \cdot \underline{B}$$

es gilt:

$$[\hat{p}, \underline{\hat{S}}] = 0, \quad [\underline{\hat{L}}, \underline{\hat{S}}] = 0$$

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

$$\Rightarrow [\hat{H}, \underline{\hat{S}}] = 0$$

\Rightarrow Die Eigenzustände von \hat{H} mit Spin (die durch
Spin-Bahn-Wechselwirkung) können als Produktzustände
geschrieben werden:

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

Produkt aus Hilbertraum

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

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

VII. Näherungsverfahren

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
↑
zeitunabhängig

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

Voraussetzungen: - Eigenwertproblem zu \hat{H}_0 exakt lösbar
- Störung klein !!

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