3. Elektronspin als Drehimpuls

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

$\rightarrow$ W. Pauli (1925) postuliert Spin als „Eigendrehimpuls":

$$\vec{\underline{S}} = (\underline{S}_x, \underline{S}_y, \underline{S}_z) \quad \text{analog zu} \quad \vec{\underline{L}} = (\underline{L}_x, \underline{L}_y, \underline{L}_z)$$

Ansatz f. $\underline{H} = -\vec{B} \cdot \vec{\mu} = -\vec{B} \cdot \frac{q}{2m} \vec{L} \longrightarrow -\vec{B} \cdot \frac{q}{2m} \left(\vec{L} + g \vec{S} \right)$

g: Proportionalitätskonstante, zu bestimmen

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

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

- versuche bisherige Ortseigenschaften zu retten, d.h. $\Psi(\vec{r}, t)$ soll eingebunden sein

$$\Psi(\vec{r}) \underset{\text{Übergang}}{\longrightarrow} \overline{\Psi}(\vec{r}, \vec{s}) \quad \text{aufgebaut aus} \quad \underbrace{\overline{\Psi}_{sm_s}(\vec{s})}_{\text{neue Spinfkt.}} \; \underbrace{\varphi_n(\vec{r})}_{\text{bisherige Ortsfunktion}} \qquad \text{analog: } Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)\, \varphi_n(r)$$

$l \leftrightarrow s$

$m_l \leftrightarrow m_s$

a) Ansatz f. Spinor $\overline{\Psi}(\vec{s})$, $\vec{s}$-Operator

Stern-Gerlach: 2 Zustände, d.h. statt $Y_{l=\text{fest}\, m_l}$: $m_l: -l, -l+1 \cdots 0, 1 \cdots, l-1, l$

für Spin $\Psi_{s=\text{fest}\, m_s}$: $m_s: -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$

Spinor $\quad \vec{\psi}(\vec{r}, \vec{s}, t) \underset{m_s = \pm\frac{1}{2}}{=} \begin{pmatrix} \psi_+ (\vec{r}, t) \\ \psi_- (\vec{r}, t) \end{pmatrix} = \psi_+ (\vec{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_- (\vec{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

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

Spin: $\quad \underline{\vec{S}} = (\underline{S}_x, \underline{S}_y, \underline{S}_z) \quad$ " $\underline{S}_i$ "

mit Forderung: $\quad [\underline{S}_i, \underline{S}_j] \overset{!}{=} i\hbar\, \underline{S}_k\, \varepsilon_{ijk}$ und $[\underline{\vec{S}}^2, \underline{S}_z] \overset{!}{=} 0$

gesucht ist eine Darstellung der $\underline{S}_i$

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

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

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

wissen: $\quad m_\pm = \pm s \quad \rightsquigarrow \quad s = \frac{1}{2}$

$m_\pm = \pm\frac{1}{2}$ und $s = \frac{1}{2}$ sind aus Beobachtg. und Analogie z. $\vec{L}$ festgelegt

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

b) Bestimmung der Spinkomponenten

- aus Eigenwertproblem (2d) $\rightarrow$ einfachster Ansatz f. $\underline{S}_i$ sind 2×2 Matrizen
  $\underline{S}_i$ soll Dimension v. Drehimpuls haben, also $\hbar$
- Hintereinanderausführung von $S_i \hat{=}$ 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) $\underline{s}_z \vec{\chi}_\pm = \pm\frac{\hbar}{2}\vec{\chi}_\pm$, einsetzen zum Test:

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

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

$$\left(\underline{s}_x^2 + \underline{s}_y^2 + \underline{s}_z^2\right)\vec{\chi}_\pm = \frac{3}{4}\hbar^2\vec{\chi}_\pm$$

zunächst $\underline{s}_z^2 \vec{\chi}_\pm = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\vec{\chi}_\pm$

$$= \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\vec{\chi}_+$$

aus Symmetriegründen $\underline{s}_x^2\vec{\chi}_\pm = \underline{s}_y^2\vec{\chi}_\pm = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\vec{\chi}_\pm$

alle aufsummieren ✓

Spinmatrizen $\underline{s}_x, \underline{s}_y$: $\underline{s}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$ $\underline{s}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{pmatrix}$

Einträge sind zu bestimmen, dazu (i) Antikommutatorrelation
(ii) Kommutatorrelation

i) Antikommutator

Def: $[\underline{s}_x, \underline{s}_y]_+ = \underline{s}_x\underline{s}_y + \underline{s}_y\underline{s}_x = \Big|\ [\underline{s}_x, \underline{s}_z] = -i\hbar s_y\ \Big|$

$$= \frac{i}{\hbar}\, \underline{S}_x \left(\underline{S}_x \underline{S}_z - \underline{S}_z \underline{S}_x \right) + \frac{i}{\hbar} \left(\underline{S}_x \underline{S}_z - \underline{S}_z \underline{S}_x \right) \underline{S}_x$$

$$= \frac{i}{\hbar} \left(\underline{S}_x^2 \underline{S}_z - \underbrace{\underline{S}_x \underline{S}_z \underline{S}_x} + \underbrace{\underline{S}_x \underline{S}_z \underline{S}_x} - \underline{S}_z \underline{S}_x^2 \right)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{4} \underline{1}\, S_z - S_z \frac{\hbar^2}{4} \underline{1} \right) = 0$$

$\rightarrow$ Antikommutator vertauscht

allg. gilt: ÜA $\left[\underline{S}_i, \underline{S}_j \right]_+ = i \frac{\hbar^2}{2} \delta_{ij}$

verwenden um a, b, c, d zu bestimmen:

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

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

$\rightarrow$ $a = 0 = d$

dasselbe mit $\underline{S}_y$ statt S_x $\longrightarrow$ $\alpha = 0 = \delta$

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

ii) Kommutator $[S_x, S_y]$

$$\left(\underline{S}_x \underline{S}_y - \underline{S}_y \underline{S}_x \right) \stackrel{!}{=} i\hbar\, \underline{S}_z$$

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

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

$\quad c\beta - \gamma b = -2i \quad (2) \qquad$ (Diagonale ablesen)

iii) Normierung von $\underline{S}_i^2$

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

$bc = 1$ (3), analog $\underline{S}_y^2 \to \beta\gamma = 1$ (4) $\qquad$ (Diagonale ablesen)

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

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

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

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

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

neue Observable Spin festgelegt

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

4. Pauligleichung f. 2d Spinoren

a) Kopplung v. Elektronen an externe Magnetfelder

$$\underline{H}_{pauli} = \underline{H}_s - \underline{\vec{\mu}}_B \cdot \vec{B} - \underline{\vec{\mu}}_s \cdot \vec{B}$$

(Schrödinger) B-Bahndrehimpuls S-Spindrehimpuls

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

g-Bestimmung: Diracgleichung liefert $g_{el} = 2$

QED liefert $g_{el} = 2{,}001\ldots$

Proton: $g_{prot} = 5{,}6$

b) Pauligleichung als Matrixgleichung:

Einschränkung:

$\vec{B} = B_z e_z \qquad q = -e$

$\underline{H}$ muß so konstruiert werden, daß $\vec{\Psi} = \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix}$, Bohrsche Magneton $\mu_{Bohr} = \frac{e}{2m} B_z$

$$\underline{H}_{pauli} = \underbrace{\begin{pmatrix} H_s & 0 \\ 0 & H_s \end{pmatrix}}_{\text{gilt dieselbe Gleichung f. } \Psi_\pm} + \underbrace{\begin{pmatrix} \mu_{Bohr} \underline{L}_z & 0 \\ 0 & \mu_{Bohr} \underline{L}_z \end{pmatrix}} + \begin{pmatrix} \mu_{Bohr}\, g \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\mu_{Bohr}\, g \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}$$

$$\underline{H}_{pauli} = \begin{pmatrix} H_s + \mu_{Bohr} \left(\underline{L}_z + \frac{\hbar}{2} g \right) & 0 \\ 0 & H_s + \mu_{Bohr} \left(\underline{L}_z - \frac{\hbar}{2} g \right) \end{pmatrix}$$

bisher: $\Psi_\pm$ nicht verkoppelt: $\underline{H}_{Pauli}\ \vec{\Psi}$?

stationär

$$\underline{H}^{\pm}_{Pauli}\ \Psi_\pm = \left(\underline{H}_S + \mu_{Bohr}\left(\underline{L}_z \pm \frac{\hbar}{2} g\right)\right)\Psi_\pm \begin{cases} = E_\pm \Psi_\pm \\ = i\hbar\, \partial_t \Psi_\pm \end{cases}$$

zeitabhängig

Eigenwertproblem verwenden.

$$\underline{H}_S\ \varphi_{nlm} = \varepsilon_{nl}\ \varphi_{nlm}$$

$$\underline{L}_z\ \varphi_{nlm} = \hbar m_l\ \varphi_{nlm}$$

$$\underline{\sigma}_z\ \vec{\chi}_\pm = \pm\ \vec{\chi}_\pm$$

um stationäre Schrödinger gl. f. Ψ_+ und Ψ_- zu lösen mittels: $\Psi_\pm = \varphi^{\pm}_{nlm}$

$$E_\pm = \varepsilon_{nl} + \mu_{Bohr}\ \hbar\left(m_l \pm \frac{g}{2}\right)$$

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

in Stern-Gerlach: $\langle f_z \rangle \sim \langle \overline{\mu}_S \rangle_\pm \sim \pm \mu_{Bohr} \frac{g}{2}$ Symmetrie in z gebrochen