Beispiel für ein Mehrteilchenproblem: zwei Elektronenspins

Philipp Zedler

8. Mai 2006

1 Einführung in Drehimpulsalgebra

Der Drehimpuls ist ein Vektor.

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix}$$

Er ist definiert durch die Vertauschungsrelationen seiner Komponenten.

$$[J_i, J_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} J_k$$

Ein Drehimpulszustand wird durch $|jm\rangle$ beschrieben, wobei

$$J^2|jm\rangle = j|jm\rangle \qquad J_z|jm\rangle = m|jm\rangle$$

Mehr Aufschluss gewinnt man wie beim harmonischen Oszillator durch Leiteroperatoren.

$$J_+ = J_x + iJ_y$$
$$J_- = J_x - iJ_y$$

Aufgabe. Zeige, dass folgende Vertauschungsrelationen gelten.

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm$$

$$[J^2, J_\pm] = 0$$

Aufgabe. Zeige, dass gilt

$$J_\pm|j, m\rangle \sim |j, m \pm 1\rangle$$

Rezept: Berechne $J_z(J_+|jm\rangle)$ unter Ausnutzung der Vertauschungsrelationen. Nutze außerdem aus, dass $J_z|jm\rangle = m|jm\rangle$.

Aufgabe. Zeige, dass es zu gegebenem j ein maximales und minimales m gibt mit der notwendigen Bedingung $m^2 \leq j$.
Rezept: Berechne das Diagonalelement $\langle jm|J^2 - J_z|jm\rangle$. Nutze aus, dass J_i^2 positiv definit ist, so dass das Diagonalelement positiv sein muss.

Aufgabe. Zeige, dass für das maximale und minimale m gilt

$$j = m_{max}(m_{max} + 1)$$

$$j = m_{min}(m_{min} - 1)$$

Rezept: Für m_{max} muss gelten $J_+|jm_{max}\rangle = 0$, also auch $J_-J_+|jm_{max}\rangle = 0$. Zeige zunächst, dass

$$J_-J_+ = J^2 - J_z^2 - J_z. \tag{1}$$

Ersetze dann die Operatoren durch ihre Eigenwerte. Für m_{min} gilt entsprechend

$$J_+J_- = J^2 - J_z^2 + J_z. \tag{2}$$

Aufgabe. Zeige, dass die Koeffizienten $C_\pm(j,m)$ aus der Gleichung

$$J_\pm|j,m\rangle = C_\pm(j,m)|j,m \pm 1\rangle$$

gilt

$$C_\pm(j,m) = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}$$

Rezept: Starte mit $J_+|jm\rangle = C_+(j,m)|j,m+1\rangle$. Bilde die adjungierte Gleichung hierzu und multipliziere sie von rechts an die Ausgangsgleichung. Zeige hierfür, dass $J_+^\dagger = J_-$. Du erhälst einen Ausdruck für $|C_+(j,m)|^2$. Nutze nun Gleichung 1 und ersetze die Operatoren durch ihre Eigenwerte.

Unseren Überlegungen sagen, dass j positive halbzahlige Werte annimmt und dass für m Werte zwischen $-j$ und $+j$ mit ganzzahligen Abständen erlaubt sind.
$\Rightarrow$ Der Drehimpuls ist quantisiert!

2 Ein Elektronenspin

Notation: lasse den Gesamtspin weg, denn der ist hier immer $\frac{1}{2}$.

$$|s\rangle := |s\frac{1}{2}\rangle$$

Benutze die hoch-runter-Schreibweise:

$$|\uparrow\rangle := |\frac{1}{2}\rangle \qquad |\downarrow\rangle := |-\frac{1}{2}\rangle$$

Die Wirkung der Spinoperatoren:

$$S_z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle$$

$$S_z|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle$$

$$S^2|s\rangle = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)|s\rangle$$

$$S_+|\uparrow\rangle = 0 \qquad S_+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$S_-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \qquad S_-|\downarrow\rangle = 0$$

Ihre Vertauschungsrelationen:

$$[S_i, S_j] = i\sum_k \epsilon_{ijk} S_k$$

$$[S_z, S_\pm] = \pm S_\pm$$

$$[S^2, S_\pm] = 0$$

Wir gehen jetzt zur Matritzenschreibweise über. Den Spins werden zweidimensionale Basisvektoren zugeordnet

$$|\uparrow\rangle \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |\downarrow\rangle \to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Die Spinmatritzen müssen genauso wirken, wie die entsprechenden Operatoren. **Aufgabe.** Zeige, dass die Spinmatritzen in der Basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ folgende Form haben.

$$S_x \to \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_y \to \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_z \to \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad S^2 \to \tfrac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Rezept: Die Zuordnung einer Matrix zur Basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ zum Operator Ω geschieht nach folgendem Muster:

$$\Omega \to \begin{pmatrix} \langle\uparrow|\Omega|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\Omega|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|\Omega|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\Omega|\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

Für die Operatoren S_z und S^2 erhält man das Ergebnis direkt. Die Operatoren S_x und S_y müssen durch S_+ und S_- ausgedrückt werden.

---

3 Zwei Elektronenspins

Operatoren:

$$\mathbf{S}_1 = \begin{pmatrix} S_{1x} \\ S_{1y} \\ S_{1z} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{S}_2 = \begin{pmatrix} S_{2x} \\ S_{2y} \\ S_{2z} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 = \begin{pmatrix} S_{1x} + S_{2x} \\ S_{1y} + S_{2y} \\ S_{1z} + S_{2z} \end{pmatrix}$$

$$S_z = S_{1z} + S_{2z}$$

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

Das letzte Ergebnis ist ein Hinweis darauf, dass das Quadrat des Gesamtspins nich mit den Quadraten der einzelnen Spins vertauscht.
Aufgabe. Zeige, dass sich die Zwei-Spin-Operatoren folgendermaßen als Matritzen schreiben lassen.

$$S_z \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad S^2 \rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Aufgabe. Zeige, dass eine mögliche Eigenbasis aus folgenden Vektoren besteht.

$$|\uparrow\uparrow\rangle$$

$$|\downarrow\downarrow\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Was sind ihre Eigenwerte bezüglich S^2?
Rezept: Berechne zuerst die Eigenwerte der S^2-Matrix (dabei muss die Determinante nach einer Zeile oder Spalte entwickelt werden!). Die Eigenvektoren findest du durch Lösen der Eigenwertgleichung als lineares Gleichungssystem. Damit aus den Eigenvektoren Basisvektoren werden, musst du sie noch normieren. Die Eigenwerte bezüglich S_z findest du durch Verwendung der Eigenwertgleichungen des Ein-Spin-Systems.

Aufgabe. Welche der neuen Basiszustände sind symmetrisch, welche antisymmetrisch? Wie lassen sich die anderen Zustände symmetrisieren, bzw. antisymmetrisieren?