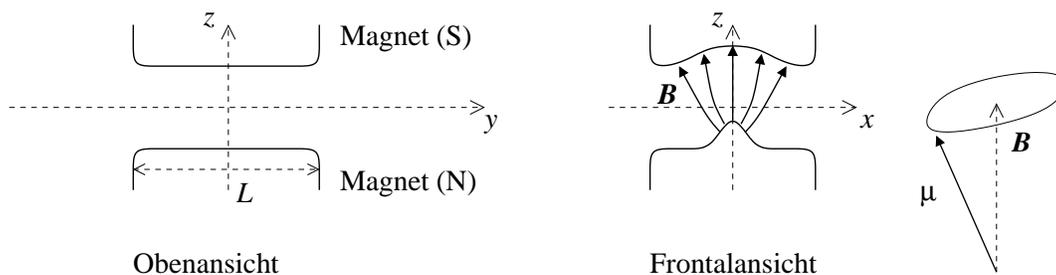


## 13 Spin

### 13.1 Stern-Gerlach-Experiment



Ein Atomstrahl durchläuft ein inhomogenes Magnetfeld. Energie eines Atoms im Magnetfeld:

$$H_B = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B},$$

mit  $\boldsymbol{\mu}$  magnetisches Moment des Atoms. Der Atomstrahl trifft auf das Magnetfeld in der Nähe von  $x = z = 0$  (siehe Figur). Hier gilt:  $\mathbf{B} = B_z \mathbf{e}_z$ . Wenn  $\boldsymbol{\mu}$  nicht in die  $z$ -Richtung zeigt, d.h. wenn  $\mu_x, \mu_y \neq 0$ , dann präzediert das magnetische Moment um die  $z$ -Achse mit Larmor-Frequenz  $\omega_0 = \gamma B = \mu B / \hbar$ . Durch diese Präzession oszillieren die zum Magnetfeld  $\mathbf{B}$  senkrechten Komponenten  $\mu_x, \mu_y$  des magnetischen Moments mit Mittelwert 0, während  $\mu_z$  konstant bleibt. (Dies erfordert, dass die Geschwindigkeit  $v$  der Atome  $\ll \omega_0 L$ .) In guter Näherung gilt daher

$$\hat{H}_B = -\mu_z B_z.$$

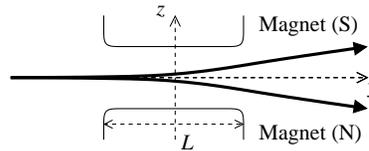
Nun ist die auf die Atome wirkende Kraft:

$$\mathbf{F} = -\nabla(-\mu_z B_z) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

Hiermit ermöglicht das Stern-Gerlach-Experiment eine Messung von  $\mu_z$ .

Da  $\mu_z$  proportional zum Drehimpuls  $l_z$  ist, kann eine Messung von  $\mu_z$  nur diskrete Ergebnisse haben. Man erwartet also, dass der Atomstrahl beim durchlaufen des Magnetfeldgradienten in eine diskrete Zahl von Strahlen aufgeteilt wird.

- Erwartung auf Grund der Schrödinger Theorie: Ein Magnetfeld spaltet die Energie-Eigenzustände mit Nebenquantenzahl  $l$  in  $(2l + 1)$  Niveaus auf, mit Abstand  $\mu_B B$  zwischen den Niveaus (Normaler Zeeman Effekt). Der Atomstrahl wird beim Durchlaufen des inhomogenen Magnetfeldes in  $(2l + 1)$  Strahlen aufgespaltet. Dies ist immer eine ungerade Zahl.
- Experimentelle Beobachtung: Häufig (bei ungerader Ladungszahl  $Z$ ) findet man eine Aufspaltung in eine gerade Zahl der Niveaus. Insbesondere findet man eine Aufspaltung in zwei Strahlen im Fall eines Atomstrahls mit H-Atomen im Grundzustand (Phipps und Taylor, Illinois, 1927; Das Ursprüngliches Experiment wurde 1922, Frankfurt, mit Ag-Atomen ausgeführt). Außerdem ist (für z.B. H) die Aufspaltung der Strahlen mit einer Energie-Aufspaltung  $2\mu_B B$  zwischen den Niveaus, nicht  $\mu_B B$ , konsistent.



Lösung: Uhlenbeck & Goudsmit (Leiden, 1925): “Das Elektron rotiert um seine eigene Achse mit dem Drehimpuls  $\hbar/2$ . Für diesen Wert des Drehimpulses gibt es nur zwei Orientierungen für den Drehimpulsvektor. Das gyromagnetische Verhältnis ist für die Eigenrotation doppelt so groß wie für die Umlaufbewegung.”

In anderen Worten:

- Das Elektron hat einen inneren Drehimpuls  $\mathbf{j}$  der Größe  $j = \frac{1}{2}$ , sodass  $j_z$  nur die Werte  $\pm \frac{\hbar}{2}$  annehmen kann.
- Das zu dem inneren Drehimpuls gehörenden magnetischen Moment  $\mu$  ist

$$\mu = \frac{e}{mc} \mathbf{j}.$$

Um Verwechslungen des inneren Drehimpulses mit dem Drehimpuls der Umlaufbewegung zu vermeiden,

- wird der innere Drehimpuls Spin genannt und mit dem Symbol  $\mathbf{s}$  angedeutet, und

- wird der Drehimpuls für die Umlaufbewegung Bahndrehimpuls genannt und mit dem Symbol  $\mathbf{l}$  angedeutet.

Das magnetische Moment eines Elektron in einem gebundenen Zustand ist dann

$$\boldsymbol{\mu} = \mu_B (\mathbf{l} + g\mathbf{s}),$$

mit  $g = 2$ ; Der gesamte Drehimpuls des Elektrons ist  $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ .

Für den Spin  $\mathbf{s}$  gibt es kein Äquivalent in der klassischen Theorie.

### 13.2 Eigenschaften des Spin- $\frac{1}{2}$ Operators $\hat{\mathbf{s}}$

Wir betrachten nun ein Teilchen mit Spin  $1/2$ , für das die drei Komponente des inneren Drehimpulses  $\mathbf{s}$  die einzigen relevante Freiheitsgraden sind. So ein System wird kurz als “ein Spin  $1/2$ ” angedeutet.

- Der Operator  $\hat{s}_z$  bildet einen kompletten Satz hermitescher Operatoren, da  $\hat{s}_x$  und  $\hat{s}_y$  nicht mit  $\hat{s}_z$  vertauschbar sind und es auch keine nicht-triviale Kombinationen dieser Operatoren gibt, die mit  $\hat{s}_z$  vertauschbar sind. Deshalb bilden die Eigenzustände des Operators  $\hat{s}_z$  eine Basis für die Drehimpuls-Zustände.
- Aus der allgemeinen Theorie für Drehimpulsoperatoren  $\mathbf{j}$  angewendet auf den Fall  $j = 1/2$  folgt: Die zwei Eigenwerte von  $\hat{s}_z$  sind  $m\hbar$  mit  $m = \pm 1/2$ . Die zugehörigen Eigenzustände sind nicht entartet (weil der Operator  $\hat{s}_z$  einen kompletten Satz hermitescher Operatoren darstellt), und sie werden mit

$$|m = 1/2\rangle \equiv |\uparrow\rangle \quad \text{“Spin up”}, \tag{1}$$

$$|m = -1/2\rangle \equiv |\downarrow\rangle \quad \text{“Spin down”} \tag{2}$$

bezeichnet.

- Deshalb gilt  $\hat{s}_z^2 = (m\hbar)^2 = (1/4)\hbar^2$ , unabhängig von  $m$ . Ebenso:  $\hat{s}_x^2 = \hat{s}_y^2 = (1/4)\hbar^2$  und  $\hat{\mathbf{s}}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = (3/4)\hbar^2$ . Letzteres ist mit dem Ergebnis  $\hat{\mathbf{s}}^2 = 1/2(1/2 + 1)\hbar^2$  der allgemeinen Theorie in übereinstimmung.
- Aus der allgemeinen Theorie für Drehimpulsoperatoren  $\mathbf{j}$  angewendet auf den Fall  $j = 1/2$  folgt:  $[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar\hat{s}_z$ , zyklisch.

- $\hat{s}_\pm = \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y$  und umgekehrt:

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}(\hat{s}_+ + \hat{s}_-), \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2i}(\hat{s}_+ - \hat{s}_-).$$

Aus der allgemeinen Theorie folgt, dass

$$\begin{aligned} \hat{s}_+|\uparrow\rangle &= 0, & \hat{s}_+|\downarrow\rangle &= \hbar|\uparrow\rangle, \\ \hat{s}_-|\uparrow\rangle &= \hbar|\downarrow\rangle, & \hat{s}_-|\downarrow\rangle &= 0. \end{aligned}$$

- Ein allgemeiner Zustand eines Spin 1/2 wird durch die Koeffizienten  $a_\uparrow$ ,  $a_\downarrow$  der  $\hat{s}_z$ -Eigenzustände festgelegt,

$$|\psi\rangle = a_\uparrow|\uparrow\rangle + a_\downarrow|\downarrow\rangle.$$

Alternativ, kann ein solcher Zustand durch den Vektor

$$\begin{pmatrix} a_\uparrow \\ a_\downarrow \end{pmatrix}$$

dargestellt werden. Solche Vektoren werden ‘‘Spinoren’’ genannt. Die Wirkung der Operatoren  $\hat{s}_x$ ,  $\hat{s}_y$ ,  $\hat{s}_z$  kann dann als Matrix-Multiplikation mit den Spinoren dargestellt werden. Aus  $\hat{s}_+|\uparrow\rangle = 0$  und  $\hat{s}_+|\downarrow\rangle = \hbar|\uparrow\rangle$  folgt dann, dass  $\hat{s}_+(a_\uparrow|\uparrow\rangle + a_\downarrow|\downarrow\rangle) = \hbar a_\downarrow|\uparrow\rangle$ , oder, in Matrix-Notation:

$$\begin{aligned} \hat{s}_+ \begin{pmatrix} a_\uparrow \\ a_\downarrow \end{pmatrix} &= \hbar \begin{pmatrix} a_\downarrow \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_\uparrow \\ a_\downarrow \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \hat{s}_+ \text{ ‘‘=’’ } &\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Ebenso:

$$\hat{s}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{s}_z = \hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

### 13.3 Pauli-Spinmatrizen

Führen wir die Pauli-Spinmatrizen ein durch

$$s_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \quad s_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \quad s_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z,$$

so ergibt sich

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die drei Pauli-Matrizen werden häufig auch in einem drei-dimensionalen Vektor  $\boldsymbol{\sigma}$  kombiniert,

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}.$$

(Bemerkung:  $\boldsymbol{\sigma}$  ist ein drei-dimensionaler Vektor, dessen Elemente  $2 \times 2$  Matrizes sind!)

Eigenschaften der Pauli-Matrizen:

- $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$ ,
- $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$  und zyklisch,
- $\{\sigma_x, \sigma_y\} = \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0$  und zyklisch (“Antikommutator”),
- $\text{tr } \sigma_x = 0$  und zyklisch,
- $\det \sigma_x = -1$  und zyklisch,
- Für beliebige Vektoren  $\mathbf{a}$  und  $\mathbf{b}$ :  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \hat{1}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$ .

## 13.4 Räumliche Freiheitsgrade und Spin

Pauli-Schrödinger-Theorie des Elektrons:

- Die Operatoren  $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$  für den inneren Drehimpuls des Elektrons sind mit allen Operatoren für die räumlichen Freiheitsgrade ( $\mathbf{r}, \mathbf{p}$  und deren Ableitungen wie  $\mathbf{l}, V(r)$  usw.) vertauschbar;
- Die Operatoren  $\hat{s}_z, \mathbf{r}$  bilden einen maximalen Satz vertauschbarer Operatoren.  
 $\Rightarrow$  Die Zustände  $|\mathbf{r}, \uparrow\rangle$  und  $|\mathbf{r}, \downarrow\rangle$  bilden eine ( $\delta$ -Funktion normierte) Basis für den Hilbertraum.  
 $|\mathbf{r}, \uparrow\rangle$  ist Eigenzustand zu  $\hat{\mathbf{r}}$  mit Eigenwert  $\mathbf{r}$  und zu  $\hat{s}_z$  mit Eigenwert  $\frac{1}{2}\hbar$ .  $|\mathbf{r}, \downarrow\rangle$  ist  $\hat{\mathbf{r}}$ -Eigenzustand zum Eigenwert  $\mathbf{r}$  und  $\hat{s}_z$ -Eigenzustand zum Eigenwert  $-\frac{1}{2}\hbar$ .

Ein allgemeiner Zustand  $|\psi\rangle$  wird dann durch

$$|\psi\rangle = \int d\mathbf{r} (\psi_\uparrow(\mathbf{r})|\mathbf{r}, \uparrow\rangle + \psi_\downarrow(\mathbf{r})|\mathbf{r}, \downarrow\rangle)$$

gegeben, wobei

$$\psi_\uparrow(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \uparrow | \psi \rangle, \quad \psi_\downarrow(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \downarrow | \psi \rangle.$$

Die beiden Funktionen  $\psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$  bilden eine "Spinor-Zustandsfunktion"

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Normierung:

$$\int d\mathbf{r} (|\psi_{\uparrow}(\mathbf{r})|^2 + |\psi_{\downarrow}(\mathbf{r})|^2) = 1.$$

In der Spinor-Notation wird die Wirkung der Spin-Operatoren  $\hat{s}_x$ ,  $\hat{s}_y$  und  $\hat{s}_z$  durch die Pauli-Matrizen gegeben. Die weiteren Operatoren werden auch als  $2 \times 2$  Matrizen dargestellt.

Beispiele:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} &\rightarrow \hat{\mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \hat{H} &\rightarrow \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) + \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\mathbf{1}} \cdot \mathbf{B} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \end{aligned}$$