4.4 Spin

Zu Beginn der Behandlung von Drehungen:

Transformation

$$|\psi'\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\vec{n}\cdot\hat{\vec{J}}}|\psi\rangle$$

für "skalare" (vgl. S.45) Funktionen $\psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\psi\rangle \in \mathbf{C}$ wurde $\hat{\vec{J}}$ durch den Bahndrehimpulsoperator $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ realisiert.

wir hatten gesehen (vgl. S.46), dass die Drehimpulsalgebra auch durch die $SO(3)$-Matrizen Σ_j realisiert werden kann, $[\hbar\Sigma_j, \hbar\Sigma_k] = i\hbar\epsilon_{jkm}\hbar\Sigma_n$

$\longrightarrow$ **Verallgemeinerung:**

Seien $\hat{S}_j (j \in \{1,2,3\})$ konstante $(2s+1)\times(2s+1)$-Matrizen mit der Eigenschaft $[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar\epsilon_{jkm}\hat{S}_m$.
Dann genügen die Operatoren $\hat{J}_k \equiv \hat{L}_k + \hat{S}_k$ der Drehimpulsalgebra (weil die gemischten Terme verschwinden).

Der Zustand $|\psi\rangle$ hat insgesamt $(2s+1)$ Freiheitsgrade,

$$\langle\vec{r}, *|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle\vec{r}, s|\psi\rangle \\ \langle\vec{r}, s-1|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle\vec{r}, -s|\psi\rangle \end{pmatrix} \in \mathbf{C}^{2s+1},$$

und wir sprechen von einem <u>Teichen mit Spin s</u>

- die "alte" (skalare) Wellenfunktion: Spezialfall $s = 0$
- die 3×3-Matrizen $\hbar\Sigma_j$: Spezialfall $s = 1$
- jetzt: $s = \frac{1}{2}$

Generatoren für $s = \frac{1}{2}$
Können Generatoren für beliebige Spinquantenzahl s mit Hilfe der allgemeinen Ergebnisse auf S.48 konstruieren (hatten dort normierte EZ $|j,m\rangle$ von $\hat{\vec{J}}^2$, $\hat{J}_3$ erhalten: $\hat{J}_\pm|j,m\rangle = C_\pm(j,m)|j,m-1\rangle$ mit $C_\pm(j,m) = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}$)

- $$\langle\frac{1}{2},s_3'|\hat{S}_3|\frac{1}{2}.s_3\rangle = \hbar s_3\delta_{s_3's_3}$$

$$\Rightarrow \hat{S}_3 = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- $$\langle\frac{1}{2}.s_3'|\hat{S}_1|\frac{1}{2},s_3\rangle = \frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{(\frac{1}{2}-s_3)(\frac{3}{2}+s_3)}\delta_{(s_3+1)s_3'} + \sqrt{(\frac{1}{2}+s_3)(\frac{3}{2}-s_3)}\delta_{(s_3-1)s_3'}\right]$$

$$\Rightarrow \hat{S}_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- $$\langle\frac{1}{2},s_3'|\hat{S}_2|\frac{1}{2},s_3\rangle = \frac{i\hbar}{2}\left[\sqrt{(\frac{1}{2}+s_3)(\frac{3}{2}-s_3)}\delta_{(s_3-1)s_3'} - \sqrt{(\frac{1}{2}-s_3)(\frac{3}{2}+s_3)}\delta_{(s_3+1),s_3'}\right]$$

$$\Rightarrow \hat{S}_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ def Pauli-Matrizen σ_j, mit $\hat{S}_j \equiv \frac{\hbar}{2}\sigma_j$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\longrightarrow$ es gilt $\sigma_j^\dagger = \sigma_j\,,\ \mathrm{Sp}(\sigma_j) = 0\,,\ \sigma_j\sigma_k = \delta_{jk}1_{2+2} + i\epsilon_{jkm}\sigma_m$
$\longrightarrow$ also tatsächlich $[\hat{S}_j,\hat{S}_k] = \frac{\hbar^2}{4}[\sigma_j,\sigma_k] = \frac{\hbar^2}{4}2i\epsilon_{jkm}\sigma_m = i\hbar\epsilon_{jkm}\hat{S}_m$

$\longrightarrow$ eine makroskopische Drehung im Spin-VR ist also

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}a\vec{n}\cdot\hat{\vec{S}}\right) = \exp\left(-\frac{i\alpha}{2}\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\right) = 1_{2\times2}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

Erwartungswerte

mit der vektorartigen Spinor-WF $\langle\vec{r},*|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle\vec{r},\frac{1}{2}|\psi\rangle \\ \langle\vec{r},-\frac{1}{2}|\psi\rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$ können wir jetzt Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeiten berechnen:

Skalarprodukt: $\langle\phi|\psi\rangle = \int d^3\vec{r}\ \Sigma_{s_3=+1/2}^{-1/2}\langle\phi|\vec{r},s_3\rangle\langle\vec{r},s_3|\psi\rangle$
$= \int d^3\vec{r}\ [\phi_+^*(\vec{r})\psi_+(\vec{r}) + \phi_-^*(\vec{r})\psi_-(\vec{r})]$

konjugierter Spinor: $\langle\phi|\vec{r},*\rangle = (\phi_+^*(\vec{r}),\phi_-^*(\vec{r}))$

Norm: $\langle\psi|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3r \left[|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2\right]$
Wahrscheinlichkeitsdichte am Ort $\vec{r}$: $\hat{S}_3$-Zustand $\pm\frac{1}{2}$: $|\psi_\pm(\vec{r})|^2$
Erwartungswert:

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{S}_j|\psi\rangle &= \int \mathrm{d}^3r \sum_{s_3'=1/2}^{-1/2} \sum_{s_3=1/2}^{-1/2} \langle\psi|\vec{r}, s_3'\rangle\langle s_3'|\hat{S}_j|s_3\rangle\langle\vec{r}, s_3|\psi\rangle \\
&= \int \mathrm{d}^3r \, (\psi_+^*(\vec{r}), \psi_-^*(\vec{r})) \cdot \begin{pmatrix} \hat{S}_j \text{ als} \\ \text{Matrix} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Hamilton-Operator
$\hat{H}$ muss auch als Matrix betrachtet werden.
Seine Form bestimmt, welche Op's gleichzeitige EZ mit $\hat{H}$ haben.

Bsp.: $\hat{H} = \{\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(|\vec{r}|)\}1_{(2s+1)\times(2s+1)}$ ist $\hat{\vec{S}}$-**un**abhängig
$\Rightarrow$ $[\hat{\vec{S}}^2, \hat{H}] = [\hat{S}_3, \hat{H}] = 0 = [\hat{\vec{L}}^2, \hat{H}] = [\hat{L}_3, \hat{H}]$
$\rightarrow$ können also s_3 und l_3 gleichzeitig bestimmen.

Bsp.: $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(|\vec{r}|) + \kappa\,\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}$
jetzt gilt: • $[\hat{L}_i, \hat{H}] = \kappa[\hat{L}_i, \hat{L}_j\hat{S}_j] = \kappa\, i\hbar\epsilon_{ijm}\hat{L}_m\hat{S}_j \neq 0$
• $[\hat{S}_i, \hat{H}] = \kappa[\hat{S}_i, \hat{L}_j\hat{S}_j] = \kappa\,\hat{L}_j\, i\hbar\epsilon_{ijm}\hat{S}_m \neq 0$
aber der Gesamtdrehimpuls ist immer noch erhalten:

$$\begin{aligned}
\bullet\ [\hat{J}_i, \hat{H}] &= [\hat{L}_i + \hat{S}_i, \hat{H}] = i\hbar\kappa\left(\epsilon_{ijm}\hat{L}_m\hat{S}_j + \epsilon_{ijm}\hat{L}_j\hat{S}_m\right) \\
&= i\hbar\kappa\epsilon_{ijm}\left(\hat{L}_m\hat{S}_j - \hat{L}_m\hat{S}_j\right) = 0
\end{aligned}$$