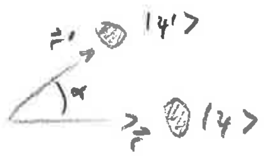
4.4 Spin

zu Beginn der Behandlung von Drehungen:



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

(vgl. S. 45) für "skalare" Fkt'n $\psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\psi\rangle \in \mathbb{C}$
wurde $\hat{\vec{J}}$ durch den Bahndrehimpulsop. $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}$ realisiert.

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

→ Verallgemeinerung:

Seien $\hat{S}_j$ ($j\in\{1,2,3\}$) konstante $(2s+1)\times(2s+1)$-Matrizen
mit der Eigenschaft $[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkm}\hat{S}_m$.
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,

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

und wir sprechen von einem Teilchen mit Spin s

- die "alte" (skalare) Wellenfkt: 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:

$$\left(\begin{array}{l} \leftarrow \text{normierte EZ } |jm\rangle \text{ von } \hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_3 \\ \hat{J}_\pm|jm\rangle = c_\pm(jm)\,|j,m\pm1\rangle \\ c_\pm(jm) = \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)} \end{array}\right)$$

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

$$\Rightarrow \hat{S}_3 = \begin{array}{c|cc} s_3' \downarrow \; s_3 \rightarrow & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{\hbar}{2} & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{array} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

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

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

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

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

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

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

$\rightarrow$ es gilt: $\sigma_j^{+} = \sigma_j$, $\mathrm{Sp}(\sigma_j) = 0$

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} \mathbb{1}_{2\times 2} + i \varepsilon_{jkm} \sigma_m \quad \left(\left(\Rightarrow \begin{cases} [\sigma_1, \sigma_2] = 2i\sigma_3 \text{ etc} \\ \sigma_j^2 = \mathbb{1}_{2\times 2} \\ \{\sigma_j, \sigma_k\} = 2\delta_{jk} \end{cases} \right)\right)$$

$\rightarrow$ also tatsächlich $[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = \frac{\hbar^2}{4}[\sigma_j, \sigma_k] = \frac{\hbar^2}{4} 2i\, \varepsilon_{jkm} \sigma_m = i\hbar\, \varepsilon_{jkm} \hat{S}_m$

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

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha \vec{n}\cdot\hat{\vec{S}}\right) = \exp\left(-\frac{i\alpha}{2}\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\right) \overset{\text{((selber ?!))}}{=} \mathbb{1}_{2\times 2}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i\,\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\,\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

((diese Matrix ist unitär und hat det = 1, gehört also zur SU(2)))

((Drehung um $\alpha = 2\pi$: $-\mathbb{1}_{2\times 2}$! Drehung um 4π: $\mathbb{1}_{2\times 2}$))

Erwartungswerte

mit der vektorartigen Spinor-WF $\langle \vec{r}, \pm | \psi \rangle = \begin{pmatrix} \langle \vec{r}, \frac{1}{2} | \psi \rangle \\ \langle \vec{r}, -\frac{1}{2} | \psi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$

können wir jetzt Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeiten berechnen:

<u>Skalarprodukt</u> $\langle \phi | \psi \rangle = \int d^3\vec{r} \sum_{s_3 = +\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}} \langle \phi | \vec{r}, s_3 \rangle \langle \vec{r}, s_3 | \psi \rangle$

$$= \int d^3\vec{r}\, \left[\phi_+^*(\vec{r})\psi_+(\vec{r}) + \phi_-^*(\vec{r})\psi_-(\vec{r})\right]$$

<u>konjugierter Spinor</u> $\langle \phi | \vec{r}, \pm \rangle = \left(\phi_+^*(\vec{r}), \phi_-^*(\vec{r}) \right)$

<u>Norm</u> $\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3\vec{r} \left[|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2 \right]$

<u>Wahrscheinlichkeitsdichte</u> am Ort $\vec{r}$: $\hat{S}_3$-Zustand $+\frac{1}{2}$: $|\psi_+(\vec{r})|^2$

$-\frac{1}{2}$: $|\psi_-(\vec{r})|^2$

<u>Erwartungswert</u>
$$\langle \psi | \hat{S}_j | \psi \rangle = \int d^3\vec{r} \sum_{s_3'=\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}} \sum_{s_3=\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}} \langle \psi | \vec{r}, s_3' \rangle \langle s_3' | \hat{S}_j | s_3 \rangle \langle \vec{r}, s_3 | \psi \rangle$$
$$= \int d^3\vec{r} \left(\psi_+^*(\vec{r}), \psi_-^*(\vec{r}) \right) \cdot \left(\begin{matrix} \hat{S}_j \text{ als} \\ \text{Matrix} \end{matrix} \right) \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

<u>Hamilton-Operator</u>

$\hat{H}$ muss auch als Matrix betrachtet werden.

Seine Form bestimmt, welche Op's gleichzeitige EZ mit $\hat{H}$ haben.

<u>Bsp</u>: $\hat{H} = \left\{ \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\vec{r}}|) \right\} \mathbb{1}_{(2s+1)\times(2s+1)}$ ((meistens nicht explizit geschrieben))

ist $\hat{\vec{S}}$-unabhängig

$\Rightarrow [\hat{\vec{S}}^2, \hat{H}] = [\hat{S}_3, \hat{H}] = 0 = [\hat{\vec{L}}^2, \hat{H}] = [\hat{L}_3, \hat{H}]$

$\rightarrow$ können also s_3 und l_3 gleichzeitig bestimmen.

<u>Bsp</u>: $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\vec{r}}|) + \kappa \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$

jetzt gilt
- $[\hat{L}_i, \hat{H}] = \kappa [\hat{L}_i, \hat{L}_j \hat{S}_j] = \kappa\, i\hbar \varepsilon_{ijm} \hat{L}_m \hat{S}_j \neq 0$
- $[\hat{S}_i, \hat{H}] = \kappa [\hat{S}_i, \hat{L}_j \hat{S}_j] = \kappa \hat{L}_j\, i\hbar \varepsilon_{ijm} \hat{S}_m \neq 0$

aber der <u>Gesamtdrehimpuls</u> ist immer noch erhalten:

$$\bullet\ [\hat{J}_i, \hat{H}] = [\hat{L}_i + \hat{S}_i, \hat{H}]$$
$$= i\hbar\kappa \left(\varepsilon_{ijm} \hat{L}_m \hat{S}_j + \varepsilon_{ijm} \hat{L}_j \hat{S}_m \right) \quad \text{umbenennen } j m \to m j$$
$$= i\hbar\kappa\, \varepsilon_{ijm} \left(\hat{L}_m \hat{S}_j - \hat{L}_m \hat{S}_j \right) = 0$$