

Kapitel 6

Der Spin der Elementarteilchen. Zeeman-Effekt. Pauligleichung

Der Spin¹ ist eine fundamentale Eigenschaft der Elementarteilchen, so wie ihre Masse oder Ladung. Die Bezeichnung ist etwas irreführend, da diese Eigenschaft nichts mit einer Rotation zu tun hat. Besser ist der Term “Eigendrehimpuls”, der unterstreicht, dass es sich um einen Drehimpuls handelt, der unabhängig von Bewegungszustand (vom Bahndrehimpuls) vorliegt und eine intrinsische Eigenschaft des Teilchens ist. Der Spin ein reiner Quanteneffekt und besitzt kein Analogon in der klassischen Mechanik. Er erklärt das Verhalten der Elementarteilchen und Atome im Magnetfeld. Außerdem ist er die Ursache für intrinsischen Magnetismus, also zum Beispiel Dia- und Paramagnetismus, aber auch Ferro- und Antiferromagnetismus. Es gibt heute umfangreiche Anwendungen, die auf dem Spin basieren (magnetische Materialien, Kernspinresonanz, Tomographie, Spinkontrolle, „Spintronics“, u.v.a.m.).

6.1 Magnetisches Moment und Drehimpuls

Magnetmoment in der klassischen Elektrodynamik: Betrachten wir eine klassische Punktladung (q, M) auf einer Kreisbahn mit dem Drehimpuls

$$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}.$$

Die elektrische Stromdichte wird zu

$$\underline{j}(\underline{r}) = q \underline{v} \delta(\underline{r} - \underline{R}),$$

wobei $\underline{R}$ die Kurve der Kreisbahn ist.

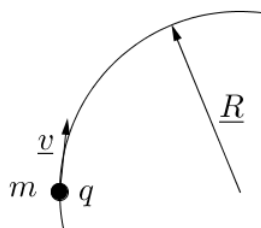


Abbildung 6.1: Teilchen mit Ladung q und Masse M auf einer Kreisbahn. Die Geschwindigkeit $\underline{v}$ produziert einen Drehimpuls $\underline{L}$ (weist in die Blattebene hinein) und damit ein Magnetmoment $\underline{m}$.

¹Englisch für Drehen, Rotation

Aus der Elektrodynamik kennen wir das magnetische Moment² einer Stromdichte:

$$\begin{aligned}\underline{m} &= \frac{1}{2} \int dV \underline{r} \times \underline{j}(\underline{r}) = \frac{q}{2} \int dV \underline{r} \times \underline{v} \delta(\underline{r} - \underline{R}) \\ &= \frac{q}{2} \underline{R} \times \underline{v} = \frac{q}{2M} \underline{L},\end{aligned}$$

wobei wir, zur Unterscheidung, hier die Masse mit M bezeichnen. Das magnetische Moment ist also proportional und parallel zum Bahndrehimpuls. Verallgemeinern wir das auf den allgemeinen Drehimpuls $\underline{J}$, so erwarten wir, dass dieser auch ein magnetisches Moment erzeugt, wobei jedoch der Proportionalitätsfaktor ein anderer sein kann. Wir definieren:

$$\underline{m} = g_J \cdot \frac{q}{2M} \underline{J}, \quad (6.1)$$

hier ist g_J der sogenannte *Lande-Faktor*. Den Faktor für den Fall des Bahndrehimpulses, $g_L = 1$, kennen wir bereits.

Magnetmoment in der Quantenmechanik: Nach dem Korrespondenzprinzip ersetzen wir in den obigen funktionellen Zusammenhängen die wichtigen Größen nun durch Operatoren. Wir wissen, dass die $\hat{L}_z$ -Komponente des Drehimpuls-Operators quantisierte Eigenwerte, $\hbar m$, besitzt, wobei gilt $-l \leq m \leq l$. Wir führen jetzt den Operator des Magnetmomentes ein:

$$\underline{m} \longrightarrow \hat{\underline{m}} = \frac{q}{2M} g_L \hat{\underline{L}}.$$

Damit ist auch $\hat{m}_z$ quantisiert und besitzt $2l + 1$ Eigenwerte. Diese Eigenwerte bezeichnen wir mit μ_m , für ein gegebenes m :

$$\mu_m = g_L \frac{q}{2M} \hbar m = g_L \mu_B^{(q,M)} \cdot m, \quad (6.2)$$

wobei wir jetzt vom Bahndrehimpuls L ausgegangen sind. Alle Konstanten haben wir in einer neuen Größe zusammengefasst – dem *Bohrsche Magneton*, das von Ladung und Masse abhängt,

$$\mu_B^{(q,M)} = \frac{q\hbar}{2M}, \quad (6.3)$$

und somit für jede Teilchensorte einen anderen Wert besitzt. Als Bezugsgröße wird üblicherweise das Bohrsche Magneton für ein Teilchen mit der Masse des Elektrons, M_e , und der (positiven) Elementarladung, e_0 benutzt³:

$$\mu_B^{(e_0, m_e)} \equiv \mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2M_e} = 9.2740100783(28) \cdot 10^{-24} \frac{J}{T}. \quad (6.4)$$

Zum Beispiel ergeben sich für das Elektron und das Proton folgende Werte:

$$\begin{aligned}\mu_{Be} &= \mu_B^{(-e_0, m_e)} = -\mu_B \\ \mu_{Bp} &= \mu_B^{(e_0, m_p)} = \frac{1}{1836} \mu_B = -\frac{1}{1836} \mu_{Be}.\end{aligned}$$

Das Magnetmoment, das zwei unterschiedliche Teilchen, die denselben Drehimpuls besitzen, produzieren, ist also i.a. unterschiedlich. Es ist proportional zur Ladung und umgekehrt proportional zur Masse. Der Proportionalitätsfaktor $\mu_B^{(q,M)}$ ist dabei derselbe für den Bahndrehimpuls

²Wir verwenden SI-Einheiten. Im CGS-System ergibt sich $m \rightarrow m/c$.

³NIST reference, 2018 CODATA recommended values

oder den Spin, die Unterschiede der verschiedenen Drehimpulse werden ausschließlich durch den unterschiedlichen Wert des Lande-Faktors (g_L bzw. g_s) erfasst.

Physikalische Bedeutung des Magnetmomentes $\underline{m}$: Aus der Elektrodynamik wissen wir, dass das Magnetmoment die Energie eines geladenen Teilchens im externen Magnetfeld charakterisiert (Dipolnäherung),

$$W_{\text{mag}}^{\text{ext}} = -\underline{m} \cdot \underline{B}. \quad (6.5)$$

Daher lässt sich μ_B interpretieren als Energie pro Magnetfeldstärke eines Teilchens der Ladung e_0 und der Masse M_e (bei Ausrichtung des Magnetmomentes parallel zum Magnetfeld).

6.2 Das Stern-Gerlach-Experiment

Das DeHaas-Experiment (durchgeführt auf Anregung Einsteins im Jahr 1915) hatte die Messung der Lande-Faktors des Elektrons zum Ziel und führte auf das Ergebnis $g = 2$. Dies war überraschend, denn es stand im Widerspruch zur klassischen Elektrodynamik, aus der $g_L = 1$ bekannt war, und war also nicht durch den Bahndrehimpuls erklärbar. Das zweite wichtige Experiment zum Spin ist der Stern-Gerlach-Versuch, der 1921 in Frankfurt durchgeführt wurde. Hierfür wurde ein inhomogenes Magnetfeld mit $\nabla B \parallel \underline{z}$ verwendet. Durch dieses hat man Silberatome auf einen Schirm geschossen, s. Abb. 6.2.

Für ein Atom mit einem Valenzelektron ergibt sich das Magnetmoment zu:

$$\begin{aligned} \underline{m}_A &= \underline{m}_e + \underline{m}_{\text{Kern}} \\ &= \underline{m}_e \left(1 + \underbrace{\frac{M_e}{M_{\text{Kern}}}}_{\ll 1} \right) \end{aligned}$$

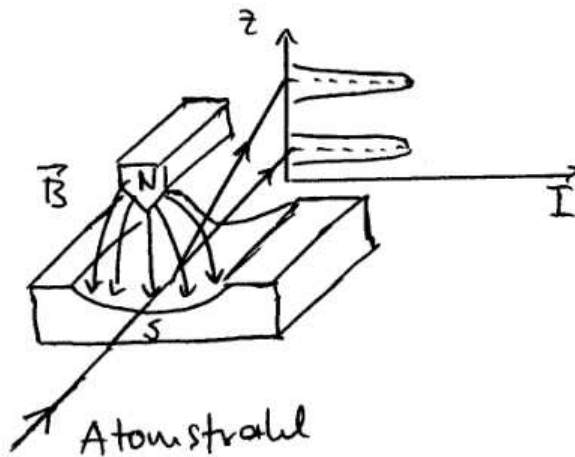


Abbildung 6.2: Schema des Stern-Gerlach-Versuches. Atome im Grundzustand spalten in einem inhomogenen Magnetfeld zweifach auf (zwei peaks in z -Richtung).

Die Intensität auf dem Schirm an der Stelle z ist proportional zur Zahl $N(z)$ der Atome an dieser Stelle. Das Experiment ergab eine zweifache Aufspaltung auf dem Schirm, wobei beide Peaks die gleiche Intensität hatten. Die Ursache hierfür ist offensichtlich, dass es eine Kraft $\underline{F}$ parallel zu $\text{grad } B$ gibt, die darüber hinaus zwei unterschiedliche Werte annimmt.

Um diese Kraft zu bestimmen, gehen wir aus von der Energie eines magnetischen Moments im äußeren Magnetfeld, Glg. (6.5):

$$W_{\text{mag}}^{\text{ext}} = -\underline{m}_e \circ \underline{B} = -m_{e,z} \cdot B_z.$$

Damit folgt die Kraft gemäß:

$$\underline{F} = -\underline{\text{grad}} W_{\text{mag}}^{\text{ext}} = m_{e,z} \underline{\text{grad}} B_z.$$

Eine von Null verschiedene Kraft, die die Teilchen räumlich separiert, erfordert also eine räumliche Änderung des Magnetfelds. Deshalb muss man hier ein inhomogenes Magnetfeld verwenden.

In der Verallgemeinerung auf die quantenmechanische Betrachtung sind die möglichen Messwerte der Kraft, und damit der Atomposition auf dem Schirm, verknüpft mit den Eigenwerten des Kraftoperators. Es gilt dann, mit Glg. (6.2),

$$\begin{aligned} F_m &= \mu_m \nabla B_z \\ &= g_L \mu_{Be} \cdot \nabla B_z \cdot m, \end{aligned}$$

mit $-l \leq m \leq l$. Wir sagen also eine $(2l+1)$ -fache Aufspaltung des Strahls voraus, für Atome mit der Drehimpulsquantenzahl l .

Aber: Das Experiment wurde mit Silberatomen im Grundzustand durchgeführt. Diese sind sphärisch symmetrisch (1s-Zustand, $l=0$) und besitzen keinen Bahndrehimpuls, so dass hier gar keine Aufspaltung zu erwarten ist. Das Experiment zeigte jedoch zweifelsfrei, dass der Atomstrahl mit $l=0$ 2-fach aufspaltet. Daraus ergeben sich folgende Schlussfolgerungen:

Schlussfolgerungen:

1. Das Resultat des Experimentes ist nicht durch das Magnetmoment des Bahndrehimpulses der Atome erklärbar.
2. Der Zustand $|nlm\rangle$ ist nicht eindeutig.
3. $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ sind keine vollständige Observable.

6.3 Der Spin der Elementarteilchen

Wir fassen hier noch einmal die Schlussfolgerungen aus dem Stern-Gerlach-Experiment zusammen. Die Multiplizität der Drehimpulszustände $|lm\rangle$ zu einem fixierten l muss größer als $2l+1$ sein. Insbesondere muss der bisherige Grundzustand des Atoms zweifach entartet sein⁴. Eine mögliche Erklärung wäre: es existiert ein zusätzlicher Drehimpuls. Dieser erhält die Quantenzahlen s, s_3 und führt zu einer zusätzlichen Multiplizität $2s+1$. Außerdem müssen zusätzliche Observable existieren, die mit $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ kommutieren.

⁴Wegen der Analogie des Grundzustandes für das Silber- und Wasserstoffatom können wir diese Schlussfolgerung direkt auf Wasserstoff und andere Atome übertragen.

Lösung: Die Lösung erfolgte 1925 durch Goudsmith/Uhlenbeck und Pauli. Sie formulierten die Hypothese des Spins: Das Elektron besitze einen Eigendrehimpuls $\frac{\hbar}{2}$, der ebenfalls zu einem magnetischem Moment führt und unabhängig vom Bahndrehimpuls existiert. Diese Hypothese ist inzwischen experimentell in exzellenter Weise bestätigt worden und ist nicht nur für Elektronen im Atom zutreffend, sondern auch für freie Elektronen und, darüber hinaus, für alle Elementarteilchen. Dies formulieren wir noch einmal allgemein:

- Die Elementarteilchen besitzen einen Eigendrehimpuls $\underline{s}$, genannt “Spin”.
- Der Spin wird durch den hermiteschen Operator $\hat{s}$ dargestellt. Dieser hat die Eigenschaften:

$$[\hat{s}_1, \hat{s}_2] = -\frac{\hbar}{i} \hat{s}_3$$

mit zyklischen Vertauschungen, sowie

$$[\hat{s}^2, \hat{s}_3] = 0$$

Dieser „Eigendrehimpuls“ ist unabhängig von $\underline{L}$ und $\underline{p}$.

Eigenwertproblem des Spins

Da der Spin ein Drehimpuls ist, kennen wir bereits die Eigenwertgleichungen aus der Analogie mit dem allgemeinen Drehimpuls $\hat{J}$, vgl. Abschnitt 5.1.2. Die gemeinsamen Eigenzustände von $\hat{s}^2$ und $\hat{s}_3$ bezeichnen wir als $|s, s_3\rangle$,

$$\hat{s}^2 |s, s_3\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, s_3\rangle, \quad (6.6)$$

$$\hat{s}_3 |s, s_3\rangle = s_3\hbar |s, s_3\rangle, \quad (6.7)$$

wobei gilt $-s \leq s_3 \leq s$, das heißt, s bezeichnet den maximalen Eigenwert von $\hat{s}_3$. Wie vom allgemeinen Drehimpuls bekannt, existieren ganz- und halbzahlige s , d.h.

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

Wir wissen heute, dass die Quantenzahl s eine fundamentale Eigenschaft der Elementarteilchen ist, genauso wie ihre Ladung oder Masse. Zum Beispiel gilt für das Elektron, Proton und Neutron

$$s = \frac{1}{2},$$

so dass die z -Komponente nur die Werte

$$s_3 = \pm \frac{1}{2}$$

annehmen kann.

Teilchen mit s halbzahlig nennt man Fermionen. Teilchen mit s ganzzahlig nennt man Bosonen.

Fermionen und Bosonen zeigen fundamental unterschiedliches Verhalten, da sich die Wellenfunktionen mehrerer Bosonen und Fermionen qualitativ unterscheiden (symmetrische bzw. antisymmetrische Funktionen bezüglich Teilchen-Vertauschung⁵), was zur Bose-Einstein- bzw. zur Fermistatistik führt. Daraus folgen dramatische Unterschiede in den physikalischen Eigenschaften von Systemen vieler Fermionen oder Bosonen: etwa das Pauliprinzip oder Supraleitung (Fermionen) oder Bose-Einstein-Kondensation und Suprafluidität. Diese Phänomene sind Gegenstand der Statistischen Physik und werden derzeit sehr intensiv erforscht.

Stern-Gerlach-Experiment. Kehren wir nun zurück zum Stern-Gerlach-Experiment, das wir durch das magnetische Moment des Spins, $\underline{m}_s$, erklären wollen. Dieses magnetische Moment ist gegeben durch den Operator:

$$\hat{m}_s = \frac{e}{2m_e} g_s \hat{s},$$

mit den Eigenwerten der z -Komponente:

$$\mu_{s_3} = \frac{e}{2m_e} g_s \hbar s_3 = \mu_B g_s s_3.$$

Hierbei ist g_s der gyromagnetische Faktor des Spins (Elektron: $g_s \approx 2$, Proton: $g_s = 5.59$, Neutron: $g_s = -3.83$). Die theoretische Begründung für g_s erfolgt durch die Quantenelektrodynamik, mit dem Resultat für das Elektron:

$$g_s \approx 2 \cdot \left[1 + \frac{\alpha}{2\pi} - \frac{2.973}{\pi^2} \alpha^2 + \dots \right],$$

und stimmt hervorragend mit dem Experiment überein. In der Formel ist

$$\alpha \approx \frac{1}{137}$$

die bereits im letzten Kapitel diskutierte Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante. Aufgrund der zwei möglichen Spinprojektionen der Elektronen, $s_3 = \pm 1/2$, gibt es genau zwei Eigenwerte des Magnetmoments, unabhängig vom Bahndrehimpuls. Daraus folgt, dass die Kraft, die auf die Atome im Grundzustand ($l = 0$) wirkt, ebenfalls genau zwei Eigenwerte besitzt, was das experimentelle Ergebnis der zweifachen Aufspaltung des Atomstrahls erklärt. Für Atome mit $l \neq 0$ ist eine $(2l + 1)(2s + 1)$ -fache Aufspaltung zu erwarten.

6.4 Zustände mit Spin. Paulimatrizen

Bisher hatten wir ein freies Teilchen vollständig charakterisiert durch Angabe seiner Koordinate oder seines Impulses. Dies ist jetzt allerdings nicht mehr ausreichend. Bei Berücksichtigung des Spins (was z.B. bei Vorliegen eines Magnetfeldes wichtig ist) wird der Satz vollständiger Observable für ein Teilchen gegeben durch die Operatoren $\hat{L}, \hat{s}^2, \hat{s}_3$. Wir erwarten, dass diese kommutieren und die gemeinsamen Eigenzustände

$$|L, s, s_3\rangle$$

⁵Der Zusammenhang zwischen Symmetrie und Spin wird in der Quantenelektrodynamik begründet. Das Verhalten von Quanten-Vielteilchensystemen ist Gegenstand der Vorlesung *Quantenstatistik und Quantenfeldtheorie*.

haben. Äquivalent dazu ist das System $\hat{p}, \hat{s}^2, \hat{s}_3$, das die bisherige Zustandsbeschreibung durch den Impulsoperator (Impulsdarstellung) ersetzt und erweitert. Es gibt natürlich noch beliebig viele weitere Systeme. Für das Wasserstoff-Atom haben wir nun nicht drei sondern fünf Observable, die gemeinsame Eigenzustände besitzen:

$$\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3, \hat{s}^2, \hat{s}_3 \rightarrow |n, l, m, s, s_3\rangle$$

Für ein gegebenes Teilchen kann s weggelassen werden, weil es sich nicht ohne Teilchenumwandlungen (Kernreaktionen etc.) ändern kann. Für die Behandlung des Spin führen wir den **erweiterten Zustandsraum** $\mathcal{H}_{BS}$ ein, wobei B der Index für den Bahn-Raum (Koordinate, Impuls etc.) und s der Index für den Spinraum ist. Einen Zustand in diesem Raum bezeichnen wir dann mit

$$|bs_3\rangle,$$

für ein fixiertes s . Wir benötigen nun eine Orthogonalitätsbedingung von Zuständen im erweiterten Zustandsraum. Da b im allgemeinen Fall kontinuierlich, aber s_3 immer diskret ist, gilt:

$$\langle bs_3 | b' s'_3 \rangle = \delta(b - b') \delta_{s_3, s'_3}. \quad (6.8)$$

Außerdem fordern wir Vollständigkeit für ein fixiertes s :

$$\hat{1} = \sum_{s_3=-s}^s \int db |bs_3\rangle \langle bs_3|. \quad (6.9)$$

Wir nehmen nun an, dass die Spin-Bahn-Wechselwirkung vernachlässigbar ist. Das verlangt insbesondere, dass die Potentiale spin-unabhängig sind⁶. In diesem Fall zerfällt der Zustandsraum $\mathcal{H}_{BS}$ in

$$\mathcal{H}_{BS} = \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_s,$$

der Hilbertraum ist also separabel in den Bahnraum $\mathcal{H}_B$ und den Spinraum $\mathcal{H}_s$. Die Zustände in $\mathcal{H}_{BS}$ werden dann zu einem Produkt von Zuständen aus je einem Raum:

$$|bs_3\rangle = |b\rangle \cdot |s_3\rangle,$$

und wir bekommen eine Teilbasis in $\mathcal{H}_s$ mit

$$\langle ss_3 | ss'_3 \rangle = \delta_{s_3, s'_3}, \quad (6.10)$$

und

$$\hat{1} = \sum_{s_3=-s}^s |ss_3\rangle \langle ss_3|. \quad (6.11)$$

⁶Die Spin-Bahn-Kopplung behandelt man durch Einführung des Gesamtdrehimpulses $\hat{J} = \hat{L} + \hat{s}$ und Untersuchung dessen Eigenwertproblems. Dies korrigiert das Spektrum der Atome nochmals und wird in Quantenmechanik II behandelt.

Teilchen mit Spin 1/2

Im Folgenden konzentrieren wir uns auf Teilchen mit $s = \frac{1}{2}$, da dies insbesondere für Elektronen relevant ist und die Beschreibung erheblich vereinfacht. Der Spinraum wird dann zu:

$$\mathcal{H}_s \rightarrow \mathcal{H}_{\frac{1}{2}},$$

und die Eigenwerte der z -Komponente des Spins sind (in Einheiten von $\hbar$)

$$s_3 = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2},$$

mit den Eigenzuständen $|\frac{1}{2}\rangle$ und $|- \frac{1}{2}\rangle$ bzw., in kompakter Schreibweise, $|+\rangle$ und $|-\rangle$. Dies sind die Basisvektoren in $\mathcal{H}_{\frac{1}{2}}$ mit den expliziten Orthonormierungsbedingungen

$$\begin{aligned}\langle +|+\rangle &= \langle -|-\rangle = 1, \\ \langle +|-\rangle &= \langle -|+\rangle = 0.\end{aligned}$$

Ein beliebiger Spinzustand $|u\rangle$ lässt sich dann nach diesen Basisvektoren entwickeln:

$$|u\rangle = \sum_{s_3 = -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |s_3\rangle \langle s_3|u\rangle = u^+ |+\rangle + u^- |-\rangle = \begin{pmatrix} u^+ \\ u^- \end{pmatrix}. \quad (6.12)$$

Hierbei ist $u^\pm = \langle \pm|u\rangle$ die “Koordinate” des Zustandes. In der letzten Zeilen haben wir die Darstellung als Spin-Vektor gewählt (“Spinor”). Wir werden dies gleich genauer ausführen. Zuvor schauen wir uns noch die Wahrscheinlichkeit an, im Zustand $|u\rangle$ den Zustand $|+\rangle$ [analog $|-\rangle$] anzutreffen, wobei wir annehmen, dass $|u\rangle$ normiert ist, d.h. $\langle u|u\rangle = 1$:

$$P_u^\pm = \frac{|\langle \pm|u\rangle|^2}{\langle u|u\rangle} = |u^\pm|^2.$$

Koordinaten(Spinor)-Schreibweise: Im Folgenden stellen wir die Zustände und Operatoren in $\mathcal{H}_{\frac{1}{2}}$ als Vektoren bzw. Matrizen dar. Die Basiszustände schreiben sich dann als

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.14)$$

Dies ist analog zur Koordinatendarstellung von Einheitsvektoren in $\mathcal{R}_2$, und man sieht es auch sofort aus Formel (6.12), wenn der Vektor u in $|+\rangle$ - oder $|-\rangle$ -Richtung weisen würde.

Ein Operator $\hat{A}$ in $\mathcal{H}_{\frac{1}{2}}$ ist dann natürlich eine 2×2 -Matrix:

$$\hat{A} \longrightarrow \langle s_3|A|s'_3\rangle = \begin{pmatrix} A_{++} & A_{+-} \\ A_{-+} & A_{--} \end{pmatrix}, \quad (6.15)$$

z.B. bezeichnet das Matrixelemente $A_{+-} = \langle +|\hat{A}|-\rangle$. Das bedeutet, wir multiplizieren von links mit dem transponierten Zustand (6.13), $(1 \ 0)$, und von rechts mit der Spalte (6.14). Analog sind die anderen Matrixelemente definiert. Das wichtigste Beispiel für $\hat{A}$ sind die Komponenten des Spin-Operators, durch die sich alle anderen Operatoren im Spinraum ausdrücken lassen.

Leiteroperatoren: Um die Darstellung der Spinoperatoren $\hat{s}_1, \hat{s}_2, \hat{s}_3$ und $\hat{s}^2$ in dieser Basis zu finden, definieren wir wieder Leiteroperatoren, in Analogie zu $J^\pm$:

$$\hat{s}^\pm = \hat{s}_1 \pm i \hat{s}_2. \quad (6.16)$$

Kennt man die Darstellung dieser Operatoren, so kann man rückwärts aus

$$2 \hat{s}_1 = \hat{s}^+ + \hat{s}^-, \quad (6.17)$$

$$2i \hat{s}_2 = \hat{s}^+ - \hat{s}^-, \quad (6.18)$$

die Operatoren $\hat{s}_1$ und $\hat{s}_2$ gewinnen. Die Wirkung der Leiteroperatoren ist vom allgemeinen Drehimpuls $\hat{J}$ bekannt, vgl. Abschnitt 5.1.2:

$$\hat{s}^+ |-\rangle = \hbar |+\rangle, \quad (6.19)$$

$$\hat{s}^+ |+\rangle = 0, \quad (6.20)$$

$$\hat{s}^- |-\rangle = 0, \quad (6.21)$$

$$\hat{s}^- |+\rangle = \hbar |-\rangle. \quad (6.22)$$

Wir finden nun die Matrixdarstellung von $\hat{s}^+$. Sei zunächst:

$$\hat{s}^+ \rightarrow \langle s_3 | \hat{s}^+ | s'_3 \rangle = \hbar \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix},$$

wobei $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ die gesuchten Matrixeinträge sind, die nur Werte von entweder 0 oder 1 annehmen können. Unter Verwendung der Koordinaten-Darstellung (6.13) und (6.14), sowie Gleichung (6.20) folgt:

$$\begin{aligned} \hbar \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &\stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} \alpha \\ \gamma \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

woraus sich sofort $\alpha = 0$ und $\gamma = 0$ ergibt. Wir betrachten analog die zweite Gleichung für $\hat{s}^+$, Glg. (6.19),

$$\begin{aligned} \hbar \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &\stackrel{!}{=} \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \beta \\ \delta \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Hieraus folgt $\delta = 0$ und $\beta = 1$. Analog verfahren wir für $\hat{s}^-$ und erhalten

$$\langle s_3 | \hat{s}^+ | s'_3 \rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.23)$$

$$\langle s_3 | \hat{s}^- | s'_3 \rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.24)$$

Dies ist die „ s_3 -Darstellung“ der Operatoren $\hat{s}^\pm$. Die Basisvektoren sind hier also Eigenfunktionen von $\hat{s}_3$. In dieser Basis ist $\hat{s}_3$ diagonal, und $\hat{s}_{1,2}$ folgen aus den Bestimmungsgleichungen (6.17) und (6.18).

Die Matrizen aller drei Spinoperatoren lassen sich dann kompakt in folgender Form schreiben:

$$\langle s_3 | \hat{s}_i | s'_3 \rangle = \frac{\hbar}{2} \sigma_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (6.25)$$

mit

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.26)$$

sowie

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.27)$$

und

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (6.28)$$

sowie die Identitäts-Matrix

$$\hat{1}_{s_3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.29)$$

Die Matrizen σ_i und der Vektor $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ wurden von Wolfgang Pauli eingeführt und heißen **Pauli-Spinmatrizen** für $s = \frac{1}{2}$. Sie sind nicht nur für Spin-1/2-Teilchen relevant, sondern stellen fundamentale Größen in der gesamten theoretischen Physik dar⁷.

⁷insbesondere in der Theorie der Drehungsgruppe, vgl. Eigenschaft 8

Eigenschaften der Pauli-Matrizen: Wir fassen die wichtigsten Eigenschaften der Spinmatrizen zusammen:

1.
$$\sigma_i^2 = \hat{1}_{s_3}. \quad (6.30)$$

2.
$$\sigma_\alpha \sigma_\beta = i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3, \quad \alpha \neq \beta, \quad (6.31)$$

3.
$$\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 = i \hat{1}_{s_3}. \quad (6.32)$$

4.
$$\text{Tr } \sigma_i = 0, \quad \forall i, \quad (6.33)$$

5.
$$\det \sigma_i = -1, \quad \forall i, \quad (6.34)$$

6.
$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i, \quad \forall i, \quad (6.35)$$

7. Aus 2) folgt, dass $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ und die 1-Matrix $\hat{1}_{s_3}$ eine Algebra sind und, darüber hinaus, eine Basis im Raum der 2×2 -Matrizen bilden. Damit lassen sich beliebige Operatoren im Spin 1/2-Raum durch diese vier Operatoren (und ihre Matrizen) ausdrücken.

8. Für jede Komponente k der Paulimatrizen ist der Operator $e^{i\phi \hat{\sigma}_k}$ ein Drehoperator, der eine Rotation um die Achse $\mathbf{e}_k$ um den Winkel ϕ bewirkt.

9. Es gilt die Kommutations-Eigenschaft

$$[\sigma_1, \sigma_2] = 2i \sigma_3, \quad (6.36)$$

und die zyklischen Vertauschungen.

10.
$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij} \hat{1}_{s_3}. \quad (6.37)$$

Diese Eigenschaften beweist man durch direktes Einsetzen der Definitionen der Matrizen.

6.5 Pauligleichung

Wir benötigen nun eine Bewegungsgleichung für Elementarteilchen mit Spin im elektromagnetischen Feld. Wir koppeln das EM-Feld wie in der klassischen Elektrodynamik („minimale Kopplung“) an. Für den Impuls folgt dann⁸:

$$\underline{p} \rightarrow \underline{p} - e\underline{A}, \quad (6.38)$$

was wir direkt auf die Operatoren übertragen, und außerdem bewirkt das skalare Potential φ die potentielle Energie V :

$$V = e\varphi. \quad (6.39)$$

⁸Wir verwenden SI-Einheiten. Im CGS-System ist eA zu ersetzen durch eA/c .

Der Hamilton-Operator wird dann zu:

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} (\hat{\underline{p}} - e\underline{A}(\underline{r}, t))^2 + V(\underline{r}, t) + \Delta\hat{H}_s, \quad (6.40)$$

wobei ΔH_s den Spinbeitrag darstellt. Mit den Maxwellgleichungen für das klassische elektrische und magnetische Feld und der Definition der Potentiale gilt:

$$\begin{aligned} \underline{E} &= -\nabla\varphi - \frac{\partial\underline{A}}{\partial t}, \\ \underline{B} &= \nabla \times \underline{A}. \end{aligned}$$

Der Spinbeitrag beschreibt die zusätzliche Energie eines Spins im Magnetfeld⁹:

$$\Delta\hat{H}_s = -\hat{\underline{m}}_s \circ \underline{B},$$

wobei das Magnetmoment des Spins gegeben war durch¹⁰

$$\hat{\underline{m}}_s = g_s \frac{e}{2M} \hat{\underline{s}}.$$

Mit diesen Definitionen ergibt sich sofort die Verallgemeinerung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung auf ein Teilchen mit (beliebigem) Spin im elektromagnetischen Feld, die *Pauligleichung* genannt wird:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \left[\frac{1}{2M} (\hat{\underline{p}} - e\underline{A})^2 + V - \frac{e}{2M} g_s \underline{B} \circ \hat{\underline{s}} \right] |\psi\rangle \quad (6.41)$$

Dies ist die allgemeine darstellungsunabhängige Form, für beliebige Potentiale $\underline{A}(\underline{r}, t)$ und $\phi(\underline{r}, t)$.

Die Definition von $\underline{A}$ und φ ist jedoch nicht eindeutig, denn aus der Elektrodynamik wissen wir, dass *Eichfreiheit*

$$(\underline{A}, \varphi) \xrightarrow{\chi(\underline{r}, t)} (\tilde{\underline{A}}, \tilde{\varphi}) \quad (6.42)$$

vorliegt, wobei die Funktion $\chi(\underline{r}, t)$ die Eichtransformation ist. Das Problem ist nun: Wie ändert sich die Pauli-Gleichung bei einer solchen Eichtransformation und welche physikalischen Forderungen sind zu stellen?

Eichinvarianz: Wir stellen die fundamentale Forderung, dass—genau wie in der Elektrodynamik—alle physikalischen Eigenschaften (Messresultate) invariant bei Eichtransformationen sind:

$$\Rightarrow \begin{cases} \text{Felder } \underline{E}, \underline{B} \\ \rho = \psi\psi^* \end{cases} \quad \text{invariant unter } \chi(\underline{r}, t),$$

das heißt, in der Quantenmechanik muss zusätzlich die Wahrscheinlichkeitsdichte invariant bleiben. Wir wissen aus der Elektrodynamik, dass die Felder E und B invariant sind bei Transformationen der folgenden Form:

$$\begin{aligned} \underline{A} &\rightarrow \tilde{\underline{A}} = \underline{A} + \nabla\chi(\underline{r}, t) \\ \varphi &\rightarrow \tilde{\varphi} = \varphi - \frac{\partial}{\partial t}\chi(\underline{r}, t) \end{aligned}$$

⁹vergleiche unsere Diskussion in Abschnitt 6.1

¹⁰Im CGS-System ist das Magnetmoment zu ersetzen durch $m \rightarrow m/c$.

Wir wissen außerdem, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte, $|\psi|^2$, invariant bei Transformationen der Form

$$\psi \rightarrow \tilde{\psi} = \psi \cdot e^{if[\chi]}$$

ist, bei denen ein reiner Phasenfaktor hinzugefügt wird, wobei f reell ist und von der Eichtransformation abhängen kann.

Wir bestimmen nun das Funktional $f[\chi]$ durch Einsetzen in die Pauligleichung¹¹ und lassen den Spin zunächst weg. Nach der Eichung hat die Gleichung die folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi} &= \hat{H} \tilde{\psi}, \\ i\hbar e^{if(\chi)} \left(\dot{\psi} + i \frac{\partial f}{\partial \chi} \dot{\chi} \psi \right) &= \frac{1}{2M} e^{if(\chi)} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + \hbar \frac{\partial f}{\partial \chi} \cdot \nabla \chi - e\mathbf{A} - e\nabla \chi \right)^2 \psi + e^{if(\chi)} (e\varphi - e\dot{\chi}) \psi \\ i\hbar \left(\dot{\psi} + i \frac{\partial f}{\partial \chi} \dot{\chi} \psi \right) &= \frac{1}{2M} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + \hbar \frac{\partial f}{\partial \chi} \cdot \nabla \chi - e\mathbf{A} - e\nabla \chi \right)^2 \psi + (e\varphi - e\dot{\chi}) \psi \end{aligned}$$

Die Pauligleichung bleibt forminvariant genau dann, wenn alle $\nabla \chi$ - und $\dot{\chi}$ -Terme simultan verschwinden. Dies führt auf folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{\chi} \cdot \left(-\hbar \frac{\partial f}{\partial \chi} + e \right) &= 0 \\ \nabla \chi \cdot \left(\hbar \frac{\partial f}{\partial \chi} - e \right) &= 0 \end{aligned}$$

Diese beiden Gleichungen werden für

$$\frac{df}{d\chi} = \frac{e}{\hbar}$$

erfüllt. Daraus folgt:

$$f[\chi] = \frac{e}{\hbar} \chi + \text{const}$$

Damit geht obige Gleichung in die ursprüngliche Pauli-Gleichung über, und es ist

$$\tilde{\psi}(\underline{r}, t) = \psi(\underline{r}, t) e^{i \frac{e}{\hbar} \chi(\underline{r}, t)} \quad (6.43)$$

die Eichtransformation der Wellenfunktion.

Bemerkung: Der $\Delta \hat{H}_s$ -Anteil des Hamilton Operators ist invariant unter Eichtransformationen, da er die elektromagnetischen Potentiale nicht enthält und beeinflusst somit (6.43) nicht.

6.5.1 Pauligleichung in Orts-Spindarstellung (s beliebig)

Als Basis nehmen wir im Folgenden die Eigenzustände von $\hat{r}$ und $\hat{s}_3$, wobei wir die Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigen werden:

$$|\underline{r}s_3\rangle \approx |\underline{r}\rangle |s_3\rangle$$

¹¹Streng genommen, ist f ein Funktional, $f[\chi(\mathbf{r}, t)]$, und die Ableitung ist als Funktionalableitung $\delta f / \delta \chi$ aufzufassen.

mit der Vollständigkeitsrelation:

$$\hat{1} = \sum_{s_3} \int d\underline{r} |\underline{r} s_3\rangle \langle \underline{r} s_3| .$$

Die Wellenfunktion in dieser Darstellung ist dann:

$$|\psi\rangle \rightarrow \langle \underline{r} s_3 | \psi \rangle = \psi(\underline{r}, s_3, t), \quad (6.44)$$

wobei die Quantenzahl s_3 $2s + 1$ verschiedene Werte annehmen kann.

Wir wollen nun die Orts-Spinor-Darstellung der Pauligleichung erhalten. Dafür multiplizieren wir diese mit $\langle \underline{r}, s_3 |$. Das Einfügen einer $\hat{1}$ hinter $\hat{s}$ im folgenden Ausdruck führt auf:

$$\begin{aligned} \langle \underline{r} s_3 | \underline{B} \circ \hat{s} | \psi \rangle &= \underline{B} \sum_{s'_3=-s}^s \langle \underline{r} s_3 | \hat{s} | \underline{r} s'_3 \rangle \langle \underline{r} s'_3 | \psi \rangle \\ &= \underline{B} \sum_{s'_3=-s}^s \langle s_3 | \hat{s} | s'_3 \rangle \langle \underline{r} s'_3 | \psi \rangle , \end{aligned}$$

und die Pauligleichung wird zu:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\underline{r}, s_3, t) = \sum_{s'_3=-s}^s \left[\left(\frac{1}{2M} (\hat{p} - e\underline{A}(\underline{r}, t))^2 + V(\underline{r}, t) \right) \delta_{s_3, s'_3} - \frac{e}{2M} g_s \underline{B} \langle s_3 | \hat{s} | s'_3 \rangle \right] \psi(\underline{r}, s'_3, t). \quad (6.45)$$

Der Teil mit der Matrix des Spinoperators ist nicht-diagonal und koppelt daher die verschiedenen Spinorkomponenten. Man erhält ein System von $2s + 1$ gekoppelten Gleichungen. Analog kann man die $p - s_3$ - und weitere Darstellungen gewinnen.

Spinor-Form der Pauli-Gleichung. Die Orts-Spin-Zustände (6.44) lassen sich alternativ kompakt als ein Spaltenvektor darstellen, somit erhält man die *Spinor-Wellenfunktion*:

$$\psi(\underline{r}, s_3, t) \rightarrow \Phi(\underline{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi(\underline{r}, s, t) \\ \psi(\underline{r}, s-1, t) \\ \vdots \\ \psi(\underline{r}, -s, t) \end{pmatrix}$$

Die Normierung erfolgt mit dem Vektor aus dem dualen Hilbertraum, der sich durch Transposition und komplexe Konjugation der Elemente ergibt:

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \psi | \psi \rangle = \int d\underline{r} \Phi^\dagger \cdot \Phi \\ &= \int d\underline{r} (\psi_s^*, \psi_{s-1}^*, \dots, \psi_{-s}^*) \begin{pmatrix} \psi_s \\ \psi_{s-1} \\ \vdots \\ \psi_{-s} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{s_3=-s}^s \int d\underline{r} |\psi(\underline{r}, s_3, t)|^2 \end{aligned}$$

Wir können die nun die Pauli-Gleichung (6.45) mit der Spinor-Wellenfunktion Φ in einer kompakteren Form aufschreiben, in der die Spinvariable nicht explizit auftritt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\underline{r}, t) = \left[\left(\frac{1}{2M} (\hat{p} - e\underline{A})^2 + V \right) \hat{1}_s - \frac{e}{2M} g_s \underline{B} \circ \hat{s} \right] \Phi(\underline{r}, t), \quad (6.46)$$

wobei $\hat{1}_s$ eine Diagonal-Matrix im Spinraum ist. Der Operator in der eckigen Klammer ist durch eine quadratische Matrix der Dimension $(2s+1) \times (2s+1)$ im Spinraum dargestellt. Diese Formulierung ist äquivalent zur vorherigen Beschreibung durch $2s+1$ gekoppelte Gleichungen.

Spezialfall $s = 1/2$. Für ein Teilchen mit Spin $s = \frac{1}{2}$ wird Φ ein zweizeiliger Spinor:

$$|\psi\rangle \rightarrow \Phi = \begin{pmatrix} \psi(\underline{r}, +\frac{\hbar}{2}, t) \\ \psi(\underline{r}, -\frac{\hbar}{2}, t) \end{pmatrix}$$

In diesem Fall wird die Spinor-Pauli-Gleichung (6.46) besonders einfach: sie enthält zweizeilige Spaltenvektoren und 2×2 -Matrizen, die sich durch die Pauli-Matrizen ausdrücken lassen.

Fazit. Kontinuitätsgleichung. Die erhaltene Pauli-Gleichung verallgemeinert die Schrödinger-Gleichung für den Fall eines geladenen Teilchens mit Spin im elektromagnetischen Feld. Daher müssen diese Gleichungen alle Eigenschaften der Schrödinger-Gleichung erfüllen. Insbesondere muss die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div} \underline{j} = 0$$

erfüllt sein. Hierbei ist die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(\underline{r}, t) = \Phi^\dagger \Phi = \sum_{s_3=-s}^s |\psi(\underline{r}, s_3, t)|^2 \quad (6.47)$$

und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$\underline{j}(\underline{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2M} [\Phi^\dagger \nabla \Phi - \Phi \nabla \Phi^\dagger] - \frac{e}{M} \underline{A} \cdot \rho \quad (6.48)$$

Die Spinbeiträge verhalten sich hier additiv:

$$\begin{aligned} \underline{j} &= \sum_{s_3=-s}^s \underline{j}_{s_3} \\ \rho &= \sum_{s_3=-s}^s \rho_{s_3}. \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis erhält man in Analogie zur Kontinuitätsgleichung für die gewöhnliche Schrödinger-Gleichung. Wie bisher ergibt sich die direkt messbare elektrische Stromdichte zu:

$$\underline{j}_{el}(\underline{r}, t) = e \cdot \underline{j}(\underline{r}, t).$$

Aufgabe: Man leite den Ausdruck (6.48) ab.

6.5.2 Pauligleichung in der Coulomb-Eichung. Schwachtes Magnetfeld

Die Eichinvarianz erlaubt erhebliche Vereinfachungen der Gleichungen, vor allem durch günstige Wahl der Eichung. Wir wählen hier die Coulomb-Eichung, $\nabla \underline{A} = 0$ (vergleiche Elektrodynamik), so dass folgt:

$$\hat{p}(\underline{A}\psi) = \underline{A}\hat{p}\psi.$$