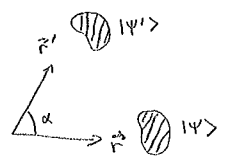


Der Ausgangspunkt für die Betrachtung von Drehungen ist die unitäre Transformation (vgl. Seite 64)

$$|\Psi'\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right) |\Psi\rangle.$$



Für „skalare“ Funktionen, d.h. $\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle \in \mathbb{C}$, wurde $\hat{\mathbf{J}}$ durch den Bahndrehimpulsoperator $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ realisiert.

Allerdings haben wir gesehen, dass die Drehimpulsalgebra auch durch die $SO(3)$ -Matrizen Σ_j realisiert werden kann:

$$[\hbar \Sigma_j, \hbar \Sigma_k] = i \hbar \epsilon_{jkm} \hbar \Sigma_m \quad (\text{Seite 65}).$$

Also liegt eine wichtige Verallgemeinerung nahe:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Seien } \hat{S}_j, j=1,2,3, \text{ konstante } (2s+1) \times (2s+1) \text{-Matrizen} \\ \text{mit der Eigenschaft } [\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i \hbar \epsilon_{jkm} \hat{S}_m. \text{ Dann} \\ \text{genügen die Operatoren } \hat{J}_j := \hat{L}_j + \hat{S}_j \text{ der Drehimpulsalgebra} \\ \text{(weil die gemischten Terme verschwinden)}. \text{ Der Zustand } |\Psi\rangle, \\ \text{auf den } \hat{\mathbf{J}} \text{ operiert, hat insgesamt } (2s+1) \text{ „Freiheitsgrade“:} \\ \\ \langle \vec{r}, * | \Psi \rangle = \begin{pmatrix} \langle \vec{r}; s | \Psi \rangle \\ \langle \vec{r}; s-1 | \Psi \rangle \\ \vdots \\ \langle \vec{r}; -s+1 | \Psi \rangle \\ \langle \vec{r}; -s | \Psi \rangle \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2s+1} \\ \\ \text{Wir sprechen von einem „Teilchen mit Spin } s\text{.“} \end{array} \right]$$

Die „alte“ Wellenfunktion: $s=0$.

Mit den Matrizen $\hbar \Sigma_j$: $s=1$.

Jetzt: $s = \frac{1}{2}$!

Generatoren für $s = \frac{1}{2}$

74

Die Generatoren für eine beliebige Spinguantenzahl s können mit Hilfe der allgemeinen Ergebnisse aus Seite 68 konstruiert werden.

$$\begin{aligned} \bullet \langle \frac{1}{2}, s'_3 | \hat{S}_3 | \frac{1}{2}, s_3 \rangle &= \hbar s_3 \delta_{s'_3 s_3} \xrightarrow{s_3} \frac{1}{2} \quad -\frac{1}{2} \\ &\Rightarrow \hat{S}_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Seite 66:

$$\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_1 \pm i \hat{S}_2$$

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hbar \hat{S}_3$$

$$\hat{S}_+ = \frac{1}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$$

$$\hat{S}_- = \frac{-i}{2} (\hat{S}_+ - \hat{S}_-)$$

$$\hat{S}_+ | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \alpha | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle$$

$$\Rightarrow |\alpha|^2 = \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{S}_- \hat{S}_+ | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle$$

$$= \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | [\hat{S}_-, \hat{S}_+] | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle$$

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

$$\bullet \langle \frac{1}{2}, s'_3 | \hat{S}_1 | \frac{1}{2}, s_3 \rangle = \frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{(\frac{1}{2} - s_3)(\frac{3}{2} + s_3)} \delta_{(s_3+1)s'_3} + \sqrt{(\frac{1}{2} + s_3)(\frac{3}{2} - s_3)} \delta_{(s_3-1)s'_3} \right]$$

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

$$\bullet \langle \frac{1}{2}, s'_3 | \hat{S}_2 | \frac{1}{2}, s_3 \rangle = \frac{i\hbar}{2} \left[\sqrt{(\frac{1}{2} + s_3)(\frac{3}{2} - s_3)} \delta_{(s_3-1)s'_3} - \sqrt{(\frac{1}{2} - s_3)(\frac{3}{2} + s_3)} \delta_{(s_3+1)s'_3} \right]$$

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

Wir schreiben $\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2} \tau_j$, wobei τ_j die „Pauli-Matrizen“ sind:

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Es gilt: $\tau_j^\dagger = \tau_j$, $\text{Sp}[\tau_j] = 0$, und (Übung)

$$\tau_j \tau_k = \delta_{jk} \mathbb{1}_{2 \times 2} + i \epsilon_{jkm} \tau_m$$

(Gegenprobe:

$$\begin{aligned} [\hat{S}_j, \hat{S}_k] &= \frac{\hbar^2}{4} [\tau_j, \tau_k] = \frac{\hbar^2}{4} \cdot 2i \epsilon_{jkm} \tau_m \\ &= i\hbar \epsilon_{jkm} \hat{S}_m \end{aligned}$$

Eine mikroskopische Drehung (Übung):

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \vec{S}\right) = \exp\left(-\frac{i\alpha}{2} \vec{n} \cdot \vec{\tau}\right) = \mathbb{1}_{2 \times 2} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i \vec{n} \cdot \vec{\tau} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right).$$

(Diese Matrix ist unitär und hat $\det=1$, gehört also zur Gruppe $SU(2)$.)

Erwartungswerte

Mit der vektorartigen Wellenfunktion („Spinorenwellenfunktion“)

$$\langle \vec{r}, * | \Psi \rangle = \begin{pmatrix} \langle \vec{r}, +\frac{1}{2} | \Psi \rangle \\ \langle \vec{r}, -\frac{1}{2} | \Psi \rangle \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}) \\ \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

können folglich Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeiten berechnet werden.

Einheitsoperator

Skalarprodukt:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \Psi \rangle &= \int d^3\vec{r} \sum_{s_3 = +\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}} \langle \phi | \vec{r}; s_3 \rangle \langle \vec{r}; s_3 | \Psi \rangle \\ &= \int d^3\vec{r} \left[\phi_+^*(\vec{r}) \Psi_+(\vec{r}) + \phi_-^*(\vec{r}) \Psi_-(\vec{r}) \right]. \end{aligned}$$

Konjugierter Spinor:

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

Norm:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3\vec{r} \left[|\Psi_+(\vec{r})|^2 + |\Psi_-(\vec{r})|^2 \right].$$

Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\begin{aligned} \text{Ort } \vec{r}, \hat{S}_3\text{-Zustand } +\frac{1}{2} &: |\Psi_+(\vec{r})|^2 \\ \text{„ „ „ „ } -\frac{1}{2} &: |\Psi_-(\vec{r})|^2 \end{aligned}$$

Erwartungswerte:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{S}_j | \Psi \rangle &= \int d^3\vec{r} \sum_{s_3 = +\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}} \sum_{s'_3 = +\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}} \langle \Psi | \vec{r}; s'_3 \rangle \langle s'_3 | \hat{S}_j | s_3 \rangle \langle \vec{r}; s_3 | \Psi \rangle \\ &= \int d^3\vec{r} (\Psi_+^*(\vec{r}), \Psi_-^*(\vec{r})) \cdot \begin{pmatrix} \hat{S}_j \text{ als} \\ \text{Matrix} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}) \\ \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Der Hamilton-Operator muss auch als eine Matrix betrachtet werden. Seine Form bestimmt, welche Operatoren gleichzeitige Eigenzustände mit $\hat{H}$ haben.

Beispiel 1:

$$\hat{H} = \left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(|\hat{r}|) \right\} \mathbb{1}_{(2s+1) \times (2s+1)}$$

normalerweise nicht explizit gezeigt

Es gibt keine Abhängigkeit von $\hat{S}$ hier

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

Also können sowohl S_3 als auch L_3 bestimmt werden.

eigentlich multipliziert durch $\mathbb{1}_{(2s+1) \times (2s+1)}$ wie oben

Beispiel 2:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(|\hat{r}|) + K \underbrace{\hat{L} \cdot \hat{S}}_{\text{"Spin-Bahn-Kopplung"}}, \quad K \in \mathbb{R}.$$

Jetzt gilt:

$$\begin{aligned} * [\hat{L}_i, \hat{H}] &= K [\hat{L}_i, \hat{L}_j \hat{S}_j] \\ &= K i\hbar \epsilon_{ijm} \hat{L}_m \hat{S}_j \neq \hat{0} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} * [\hat{S}_i, \hat{H}] &= K [\hat{S}_i, \hat{L}_j \hat{S}_j] \\ &= K \hat{L}_j i\hbar \epsilon_{ijm} \hat{S}_m \neq \hat{0}. \end{aligned}$$

Aber der Gesamtdrehimpuls bleibt immer noch erhalten:

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

D.h. j_3 ist eine "gute" Quantenzahl.

— • — • —