Horst Rollnik

Quantentheorie 2

Quantisierung und Symmetrien physikalischer Systeme
Relativistische Quantentheorie

Springer
Berlin
Heidelberg
New York
Hongkong
London
Mailand
Paris

Physics and Astronomy ONLINE LIBRARY

http://www.springer.de/phys-de/

Damit können wir auf die Rechnungen im Abschnitt 4.3.4 zurückgreifen, um den Magnetismus zu beschreiben.

5 Quantentheorie des Drehimpulses II

Im 3. Kapitel dieses Bandes haben wir die allgemeinen quantenmechanischen Eigenschaften des Drehimpulses erläutert und dabei wichtige Ergebnisse über seine Eigenwerte und Eigenvektoren gewonnen. Konkretisiert wurde der Formalismus anschließend durch die Behandlung der Zustände mit ganzzahligen Drehimpulsquantenzahlen, die als Bahndrehimpuls eine wichtige physikalische Rolle spielen.

Im folgenden Kapitel widmen wir uns zunächst den wichtigsten Drehimpulszuständen, die nicht in der klassischen Physik auftreten, aber von der allgemeinen Theorie gefordert werden, den Zuständen mit $j = 1/2$. Es war eine wichtige grundsätzliche Entdeckung, daß diese Zustände in der Natur als **Spin** realisiert sind. Dadurch wurde einerseits deutlich, daß in der Physik die mathematisch erlaubten Möglichkeiten voll ausgeschöpft werden und so ein weiteres, sehr tiefliegendes Beispiel für die „unreasonable effectiveness" der Mathematik für die Beschreibung der Natur gegeben wird.[1] Andererseits betraten dadurch die Teilchen mit dem Spin 1/2 die Bühne der Physik, die sich in der Folge als die fundamentalen Objekte der Natur erweisen sollten. Jeder Physiker hat daher gute Gründe sich mit den „Spinoren" vertraut zu machen, die diese Teilchen beschreiben.

5.1 Der Spin des Elektrons und die Gruppe $SU(2)$

Bei der genaueren experimentellen Untersuchung der Atomspektren und ihrer Aufspaltung in magnetischen und elektrischen Feldern stieß man in der Mitte der zwanziger Jahre des vorigen Jahrhunderts auf eine Reihe gravierender, da qualitativer Widersprüche zu den theoretischen Erwartungen. Sie lassen sich in der Feststellung zusammenfassen: Man beobachtete die Aufspaltung von Spektrallinien oder von Elektronenstrahlen in eine gerade Anzahl von

---

[1] Diese pointierte Formulierung hat Wigner in einem Artikel mit dem Titel „The unreasonable effectiveness of mathematics in the natural sciences" geprägt, der in dem Buch
Symmetries and Reflections, Scientific Essays by Eugene P.Wigner, edited by W.J. Moore and M. Scriven, Indiana University Press 1967
abgedruckt ist.

Komponenten, während die Drehimpulsmultipletts nur ungerade Multipletts, nämlich mit der Anzahl

$$2l + 1$$

erwarten lassen. Im einzelnen fand man:

(i) Es gibt Spektren mit einer geradzahligen Multiplettstruktur
In den Alkalispektren treten Dubletts auf, deren bekanntestes Beispiel die doppelte gelbe Natrium-D-Linie ist. Dabei wurde eine allgemeine empirische Regel für Atom- und Ionen-Spektren gefunden. Bei Atomen oder Ionen mit einer ungeraden Zahl von Elektronen treten gerade Multiplizitäten – Dubletts, Quartetts usw. – auf; dagegen findet man bei geraden Zahlen von Elektronen ungerade Multiplizitäten – Singuletts, Tripletts, Quintetts usw.

(ii) Die Zahl der Zeeman-Terme und deren Aufspaltungsregeln widersprechen in vielen Fällen dem Experiment, insbesondere beim Wasserstoff und den Alkali-Atomen, vgl. Abbildung 4.16(a).
Es gilt wieder die Multiplizitätsregel: eine ungerade Elektronenzahl ist mit einer geraden Anzahl von Zeeman-Termen verbunden und umgekehrt.
Ferner beobachtet man Abweichungen von der einfachen Aufspaltungsregel für benachbarte Niveaus, nach der

$$\Delta E = \mu_B B \tag{5.1.1}$$

unabhängig vom speziellen Niveau gelten sollte; vielmehr findet man experimentell kompliziertere Verhältnisse, die man formelmäßig mit der Regel

$$\Delta E = g\, \mu_B B \tag{5.1.2}$$

beschreibt, wo der g-Faktor von Energieniveau zu Energieniveau variiert:

anomaler Zeeman-Effekt.

Dadurch treten innerhalb eines Multipletts Aufspaltungen auf, die verschiedene Vielfache einer Grundfrequenz sind, wie die Abbildung 4.17(a) zeigt.

(iii) Der Stern-Gerlach Versuch
bestätigt die in den Spektren gefundenen Multiplizitätsregeln. Ein Wasserstoff-Atomstrahl spaltet in einem inhomogenen Feld in 2 Strahlen auf, vgl. Abbildung 5.1.

Diese Phänomene legen aufgrund der Drehimpulsregel

Multiplizität $= 2j + 1$

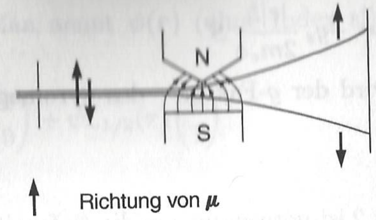

Abb. 5.1. Der Stern-Gerlach Versuch

das Auftreten von $j = \frac{1}{2}$ nahe. Konkret wurde nach vielen tastenden Vorüberlegungen (von 1921 an) im Herbst 1925 von Uhlenbeck und Goudsmit die Hypothese des Elektronenspins eingeführt. In moderner Sprache lautet sie:

Hypothese des Elektronenspins
Neben den Observablen $\boldsymbol{Q}$ und $\boldsymbol{P}$ besitzt ein Elektron eine neue Observable, einen inneren Drehimpuls, genannt Spin $\hbar\boldsymbol{S}$ mit den folgenden Eigenschaften

(a) $\boldsymbol{S}$ ist ein Drehimpuls und es gilt

$$\boldsymbol{S} \times \boldsymbol{S} = i\boldsymbol{S} \tag{5.1.3}$$

(b) Für jede Komponente von $\boldsymbol{S}$ gibt es zwei mögliche Eigenwerte, daher gehört $\boldsymbol{S}$ zur Drehimpulsquantenzahl $j = \frac{1}{2}$, und sein Quadrat hat den Wert

$$\boldsymbol{S}^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1) = \frac{3}{4} \tag{5.1.4}$$

(c) Die Komponenten des Spins kommutieren mit den Bahnvariablen $\boldsymbol{P}$ und $\boldsymbol{Q}$,

$$[S_j, Q_k] = 0 \quad ; \quad [S_j, P_k] = 0,$$

so daß z.B. der Ort $\boldsymbol{Q}$ und die dritte Komponente des Spins, S_3, gleichzeitig gemessen werden können.

(d) Der Gesamtdrehimpuls eines Elektrons wird durch die Summe von Bahndrehimpuls $\boldsymbol{L}$ und Spin $\boldsymbol{S}$ gegeben

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S} \tag{5.1.5}$$

Insbesondere werden Drehungen der Elektronenzustände durch den unitären Operator

$$U(\boldsymbol{\theta}) = e^{-i\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{J}} \tag{5.1.6}$$

bewirkt.

(e) Der Spin $\boldsymbol{S}$ ist mit einem magnetischen Moment der Größe[2]

[2]Man beachte: Wegen der negativen Ladung des Elektrons stehen magnetisches Moment und Spin antiparallel zueinander analog zu der Situation beim Bahndrehimpuls, vgl. (4.3.26).

$$\mu_s = g_s \frac{e\hbar}{2m_e c}\, S = -g_s \frac{|e|\hbar}{2m_e c}\, S \tag{5.1.7}$$

verbunden. Dabei wird der g-Faktor – das gyromagnetische Verhältnis – durch

$$g_s = 2 \tag{5.1.8}$$

gegeben. Dieser Wert 2 ist notwendig, um die Aufspaltung der Atomniveaus quantentheoretisch richtig zu beschreiben. Außerdem folgt er direkt aus der Größe der Stern-Gerlach-Aufspaltung.

Der Wert des g-Faktors widerspricht den Erwartungen; denn für die Bahnbewegung gilt nach (4.3.21)

$$g_l = 1 \tag{5.1.9}$$

Der doppelt so große Wert des Spin-Moments hat zunächst Ablehnung und Aufregung verursacht. Wir werden im Abschnitt 5.1.5 darauf zurückkommen.

5.1.1 Darstellung des Spins mit Hilfe von Pauli-Matrizen und -Spinoren

Wir ziehen zunächst die Schlußfolgerungen aus den Hypothesen (a) bis (c). Aufgrund dieser Eigenschaften bilden nicht $\boldsymbol{Q}$ (oder $\boldsymbol{P}$) allein ein vollständiges Observablensystem, sondern es muß eine Komponente von $\boldsymbol{S}$ hinzugenommen werden, z.B. S_3, so daß $\boldsymbol{Q}$ und S_3 (bzw. $\boldsymbol{P}$ und S_3) ein vollständiges System von Observablen sind. Dabei betrachten wir einen festen Zeitpunkt t, den wir nicht explizit nennen.
Wir setzen also voraus, daß die Operatoren

$$Q_1, Q_2, Q_3 \text{ und } S_3$$

ein vollständiges System bilden. Im Gegensatz zum Bahndrehimpuls muß man $\boldsymbol{S}^2$ nicht berücksichtigen, da dieser Operator den festen Wert 3/4 hat. Daher stellen die Eigenvektoren von $\boldsymbol{Q}$ und S_3

$$|\,\boldsymbol{r}, s\rangle \text{ mit } \begin{cases} \boldsymbol{Q}\,|\,\boldsymbol{r}, s\rangle = \boldsymbol{r}\,|\,\boldsymbol{r}, s\rangle \\ S_3\,|\,\boldsymbol{r}, s\rangle = s\,|\,\boldsymbol{r}, s\rangle \quad s = \pm\frac{1}{2} \end{cases} \tag{5.1.10}$$

ein vollständiges Basissystem im Hilbertraum der Ein-Elektronenzustände dar. Ein beliebiger Vektor $|\,\psi\rangle$ hat die Darstellung

$$\psi_s(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r}, s\,|\,\psi\rangle \quad s = \pm\frac{1}{2} \tag{5.1.11}$$

Es ist in vielen Fällen praktisch, die damit gegebenen zwei Funktionen zu einer zweikomponentigen Größe

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{+1/2}(\boldsymbol{r}) \\ \psi_{-1/2}(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix} \tag{5.1.12}$$

zusammenzufassen. Man nennt $\psi(\boldsymbol{r})$ (ohne Index s!) einen **Pauli-Spinor**. Offenbar gilt

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi_{+1/2}(\boldsymbol{r})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \psi_{-1/2}(\boldsymbol{r})\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{5.1.13}$$

Die Zweier-Vektoren

$$u_+ = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad ; \quad u_- = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{5.1.14}$$

beschreiben die beiden Spin-Einstellmöglichkeiten:

$$\begin{array}{ll} u_+ : \Uparrow & \textit{spin up} \\ u_- : \Downarrow & \textit{spin down} \end{array} \tag{5.1.15}$$

Der Spinoperator $\boldsymbol{S}$ wirkt auf die Eigenzustände $|\,\boldsymbol{r}, s\rangle$ gemäß den allgemeinen Regeln von Abschnitt 6.3. Wir bezeichnen die Aufsteige- und Absteige-Operatoren des Spins mit

$$S_\pm := S_1 \pm i\, S_2 \tag{5.1.16}$$

so daß gilt

$$S_3\,|\,\boldsymbol{r}, s\rangle \;=\; s\,|\,\boldsymbol{r}, s\rangle \tag{5.1.17}$$

und (5.1.18)

$$S_+\,|\,\boldsymbol{r}, \frac{1}{2}\rangle = 0 \quad ; \quad S_+\,|\,\boldsymbol{r}, -\frac{1}{2}\rangle = |\,\boldsymbol{r}, +\frac{1}{2}\rangle$$

$$S_-\,|\,\boldsymbol{r}, \frac{1}{2}\rangle = |\,\boldsymbol{r}, -\frac{1}{2}\rangle \quad ; \quad S_-\,|\,\boldsymbol{r}, -\frac{1}{2}\rangle = 0 \tag{5.1.19}$$

Mit der Umkehrung

$$S_1 = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) \quad ; \quad S_2 = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) \tag{5.1.20}$$

gilt für die Komponenten S_1 und S_2

$$S_1\,|\,\boldsymbol{r}, +\tfrac{1}{2}\rangle = \tfrac{1}{2}\,|\,\boldsymbol{r}, -\tfrac{1}{2}\rangle \;;\; S_1\,|\,\boldsymbol{r}, -\tfrac{1}{2}\rangle = \tfrac{1}{2}\,|\,\boldsymbol{r}, +\tfrac{1}{2}\rangle \tag{5.1.21}$$

und

$$S_2\,|\,\boldsymbol{r}, +\tfrac{1}{2}\rangle = \tfrac{i}{2}\,|\,\boldsymbol{r}, -\tfrac{1}{2}\rangle \;;\; S_2\,|\,\boldsymbol{r}, -\tfrac{1}{2}\rangle = -\tfrac{i}{2}\,|\,\boldsymbol{r}, +\tfrac{1}{2}\rangle \tag{5.1.22}$$

Diese Wirkungsweise überträgt sich auf $\psi_s(\boldsymbol{r})$ und die Spinoren $\psi(\boldsymbol{r}), u_+, u_-$. Da letztere zweidimensionale Vektoren sind, kann man $\boldsymbol{S}$ durch zweidimensionale Matrizen darstellen. Wegen der Faktoren 1/2 in (5.1.21) und (5.1.22) setzt man

$$\boldsymbol{S} =: \frac{1}{2}\,\boldsymbol{\sigma} \tag{5.1.23}$$

Mit u_+ und u_- als Basis kann man die Komponenten von $\boldsymbol{\sigma}$ durch die Matrizen