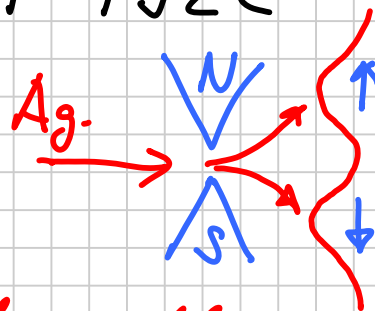


6. Der Spin

Stern-Gerlach experiment - 1922

$\Rightarrow$ Spin $S = \frac{1}{2}$?



6.1 Spin-Operator und Observable

Analog zum Drehimpuls-Operator $\hat{\vec{L}}$:

Spin-Operator: $\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{S}_k$$

und $[\hat{S}_z, \hat{S}_{\pm}] = \pm i\hbar \hat{S}_{\pm}$, $[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hbar \hat{S}_z$

mit $\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$

Wir können eine Richtung $\vec{e}$ so wählen, dass es zwei Spineigenzustände zu $\hat{\vec{S}} \cdot \vec{e}$ mit Eigenwerte: $\pm \frac{1}{2}\hbar$ gibt.

Ohne Beschränkung, wählen wir: $\vec{e} \parallel z$ -Achse und führen die Eigenzustände, als sogenannte **Spinoren** ein: $|S\rangle = \{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$

Es gilt für Basiszustände

$$\hat{S}_z |\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle$$

mit Orthogonalitätsbeziehung:

$$\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1$$

$$\langle \uparrow | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | \uparrow \rangle = 0$$

Diese Zustände sind auch Eigenzustände von $\hat{S}^2$

$$\hat{S}^2 |s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s\rangle$$

also: $\hat{S}^2 |\uparrow\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\uparrow\rangle$ und $\hat{S}^2 |\downarrow\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\downarrow\rangle$

Die Aufsteige- $\hat{S}_+$ und Absteige- $\hat{S}_-$ -Operatoren wirken in folgender Weise:

$$\begin{cases} \hat{S}_+ |\uparrow\rangle = 0 \\ \hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle \\ \hat{S}_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle \\ \hat{S}_- |\downarrow\rangle = 0 \end{cases}$$

Wir können den Spin-Operator durch 2×2 Matrizen im Spinor-Raum darstellen:

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$$

- die Pauli-Matrizen:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

und $\hat{\sigma}_+ = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}_- = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Die Wirkung des Spin-Operators entspricht:

$$\hat{S}_\mu |\alpha\rangle \rightarrow \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_\mu \begin{pmatrix} \alpha_\uparrow \\ \alpha_\downarrow \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_\mu^{\uparrow\uparrow} \alpha_\uparrow + \hat{\sigma}_\mu^{\uparrow\downarrow} \alpha_\downarrow \\ \hat{\sigma}_\mu^{\downarrow\uparrow} \alpha_\uparrow + \hat{\sigma}_\mu^{\downarrow\downarrow} \alpha_\downarrow \end{pmatrix}$$

6.2 Eigenschaften der Pauli-Matrizen

100

$(\hat{\sigma}_0, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ - Vollständige Basis für 2×2 Matrizen

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{1}$$

für $\forall \hat{A}$ - 2×2 matrix

$$\hat{A} = a_0 \hat{\sigma}_0 + \vec{a} \cdot \vec{\hat{\sigma}}$$

mit $a_0 = \frac{1}{2} \text{Sp} \hat{A} \hat{\sigma}_0$ und $\vec{a} = \frac{1}{2} \text{Sp} \hat{A} \vec{\hat{\sigma}}$

weil: $\hat{\sigma}_i^2 = \hat{\sigma}_0$, $\text{Sp} \hat{\sigma}_x = \text{Sp} \hat{\sigma}_y = \text{Sp} \hat{\sigma}_z = 0$, $\text{Sp} \hat{\sigma}_0 = 2$

Kommutationsrelation:

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i \hat{\sigma}_z \text{ und } \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} = \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 0$$

→ $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = i \hat{\sigma}_z$

mit allen zyklischen Vertauschungen von $\{x, y, z\}$

Ferner:

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = i \hat{\sigma}_0$$

Zusammengefasst:

$$\hat{\sigma}_a \cdot \hat{\sigma}_b = \delta_{ab} \hat{\sigma}_0 + i \epsilon_{abc} \hat{\sigma}_c$$

Daraus folgt

$$(\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{a})(\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{b}) = \hat{\sigma}_0 (\vec{a} \cdot \vec{b}) + i \vec{\hat{\sigma}} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

6.3 Magnetisches Moment

a) Orbital (Bahn)-Moment

ein Teilchen mit der Ladung e im E-M Feld.

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

Eichtransformation:

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \chi, \quad \phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}$$

Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{\vec{p}}^2 - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right] + e\phi(\vec{r}, t)$$

Wir betrachten ein uniformes Magnetfeld entlang der z-Achse

$$\vec{B} = (0, 0, B)$$

Mit der Wahl der Coulomb-Eichung: $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$,
führen wir das Vektorpotential ein, als:

$$\vec{A}(\vec{r}) = -\frac{1}{2} (\vec{\hat{r}} \times \vec{B})$$

$$(\vec{B} = \text{const} \rightarrow \vec{\nabla} \times \vec{A} = -\frac{1}{2} [\vec{\nabla} \times (\vec{r} \times \vec{B})] = -\frac{1}{2} [(\vec{B} \cdot \vec{\nabla}) \vec{r} - \vec{B} (\vec{\nabla} \cdot \vec{r})] = \vec{B})$$

$$\text{Da,} \quad \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{p}, \quad \text{folgt:}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + e\phi + \frac{e}{2mc} \underbrace{(\vec{\hat{r}} \times \vec{B}) \cdot \vec{p}}_{-\vec{B} \cdot (\vec{\hat{r}} \times \vec{p}) = -\vec{B} \cdot \vec{L}} + \frac{e^2}{8mc^2} \underbrace{(\vec{\hat{r}} \times \vec{B})^2}_{\vec{\hat{r}}^2 \vec{B}^2 - (\vec{\hat{r}} \cdot \vec{B})^2 = B^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2)}$$

Paramagnetismus

Diamagnetismus

Vergleichen wir die GröÙordnung dieser Beider Terme für Elektronen in Atom:

$$\frac{\frac{e^2}{8mc^2} \langle \hat{x}^2 + \hat{y}^2 \rangle B^2}{\frac{e}{2mc} \langle L_z \rangle B} \sim \frac{eB}{4c} \frac{a_0^2}{\hbar} \sim 10^{-10} B \quad (\text{in Gauß})$$

mit: $\langle \hat{x}^2 + \hat{y}^2 \rangle \sim a_0^2$ und $\langle L_z \rangle \sim \hbar$

Vergleichen wir den Paramagnetischen Term mit der Coulomb-Energie:

$$\frac{\frac{e}{2mc} \langle L_z \rangle B}{\frac{e^2}{a_0}} \sim \frac{a_0^2 \alpha B}{2e} \sim 10^{-10} B$$

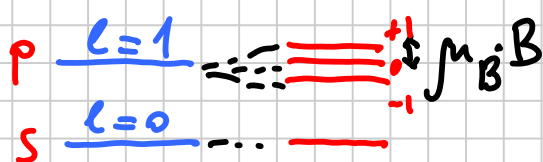
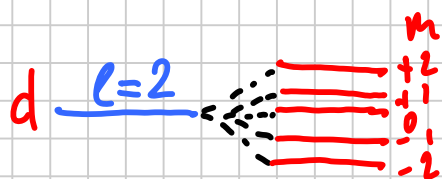
Zeeman-Effekt

Unter Vernachlässigung des diamagnetischen Terms, können wir den Hamilton-Operator schreiben als:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{2mc} \vec{B} \cdot \vec{L}$$

Für das Wasserstoff-Atom und $\vec{B} = B \vec{e}_z$:

$$E_{n\ell m} = -\frac{1R_y}{n^2} - \frac{e\hbar}{2mc} m B \equiv -\frac{1R_y}{n^2} + \hbar \omega_L m$$



mit $\omega_L = -\frac{eB}{2mc}$

- Larmor-Frequenz

Die Änderung der Energie der Atomniveaus in Magnetfeld bedeutet, dass die Zustände ein **Magnetisches Moment** besitzen, das definiert wird als:

$$\vec{M} = -\frac{\partial E}{\partial \vec{B}} = -\frac{e}{2mc} \vec{L} = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}$$

mit $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ — das **Bohrsche Magneton**

Paramagnetisches Moment:

$$\vec{M}_p = \frac{\mu_B}{\hbar} \langle \vec{L} \rangle = \frac{e}{2mc} \langle \vec{L} \rangle \sim \mu_B$$

Diamagnetisches Moment:

$$\vec{M}_d = -\frac{e^2}{4mc^2} \langle \hat{x}^2 + \hat{y}^2 \rangle \vec{B} \sim -\frac{e^2 a_0^2}{6mc^2} \vec{B}$$

b) Spin-Moment (Analog zum Bahn-Moment)

$$\vec{M}_s = g \frac{e}{2mc} \langle \vec{S} \rangle$$

wobei g — der gyromagnetische Faktor ist.

Aus der relativistischen QM: $g = 2.0023 \approx 2$ (**Dirac**)

Der Zeeman-Effekt für das totale magnetische Moment hat die Form:

$$\hat{H}_Z = -\vec{M} \cdot \vec{B} = -\frac{e}{2mc} (\underbrace{\vec{L}}_{\vec{M}_{\text{Bahn}}} + 2 \underbrace{\vec{S}}_{\vec{M}_{\text{Spin}}}) \cdot \vec{B}$$

6.4 Der Spinorzustand

Der spin ist ein **interner** Freiheitsgrad, der unabhängig von den räumlichen Koordinaten und Impulsen ist:

$$[\hat{\vec{S}}, \hat{\vec{r}}] = [\hat{\vec{S}}, \hat{\vec{p}}] = [\hat{\vec{S}}, \hat{\vec{L}}] = 0$$

$\forall \psi \Rightarrow$ direktes Produkt:

$$|\psi\rangle = \int d^3r [\psi_{\uparrow}(\vec{r}) |\vec{r}\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \psi_{\downarrow}(\vec{r}) |\vec{r}\rangle \otimes |\downarrow\rangle]$$

Die Projektion auf Orts- und Spin-Eigenzustände:

$$\langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi_{\uparrow}(\vec{r}) |\uparrow\rangle + \psi_{\downarrow}(\vec{r}) |\downarrow\rangle$$

$$\langle \uparrow | \psi \rangle = \int d^3r \psi_{\uparrow}(\vec{r}) |\vec{r}\rangle \quad \text{etc.}$$

Tensorprodukte $\otimes$

Besitzt das QM-System - Teilsysteme mit unabhängigen Hilberträumen, so können die Zustände des Gesamtsystems als Tensorprodukte geschrieben werden.

Für den Orbital und Spin-Teil:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 \otimes \hat{H}_s$$

mit Zuständen: $|\psi\rangle = |\vec{r}\rangle \otimes |s\rangle$

def: $\hat{H}_0 \otimes \hat{H}_s (|\vec{r}\rangle \otimes |s\rangle) = \hat{H}_0 |\vec{r}\rangle \otimes \hat{H}_s |s\rangle$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 \otimes \hat{1}_s + \hat{1}_0 \otimes \hat{H}_s$$

Der Zustand der Teilchen wird durch eine **Spinor** (Vektor) - Wellenfunktion beschrieben;

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\vec{r}) \\ \psi_{\downarrow}(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

Normierung:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3r [|\psi_{\uparrow}(\vec{r})|^2 + |\psi_{\downarrow}(\vec{r})|^2] = 1$$

die Pauli-Theorie des Electrons:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B}$$

Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\psi(\vec{r})}_{\text{Spinor!}} = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + V(\vec{r}) \right] \hat{\sigma}_0 + \mu_B \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{B} \psi(\vec{r})$$

Relativistische QM $\rightarrow$ Spin-Bahn-Kopplung:

$$\hat{H}_{SO} = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{\vec{S}} \cdot (\underbrace{\vec{r} \times \vec{p}}_{\vec{L}}) = \lambda \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$$

Beispiel (Tensorprodukte)

$$\hat{H}_{SO} = \lambda \sum_{i=x,y,z} \hat{S}_i \otimes \hat{L}_i$$

6.5 Symmetrie-Eigenschaften des Spinorzustands

Spin-Rotation: (Analog zum $\vec{L}$)

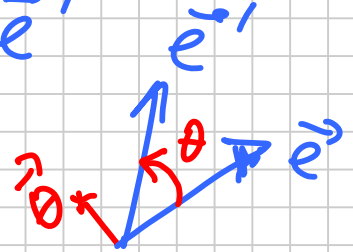
$$\hat{U}_S(\vec{\theta}) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\theta} \cdot \hat{\vec{S}}} \quad - \text{Unitäre Transformation}$$

Betrachte den Eigenzustand $|\vec{e}\uparrow\rangle$ mit Quantisierungsachse $\vec{e}$:

$$\hat{\vec{S}} \cdot \vec{e} |\vec{e}\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2} |\vec{e}\uparrow\rangle$$

Unitäre Transformation: $\vec{e} \rightarrow \vec{e}'$

$$|\vec{e}'\uparrow\rangle = \hat{U}_S(\vec{\theta}) |\vec{e}\uparrow\rangle$$



Spin-Operator

$$\hat{\vec{S}} \cdot \vec{e}' = \hat{U}_S(\vec{\theta}) \hat{\vec{S}} \cdot \vec{e} \hat{U}_S^\dagger(\vec{\theta})$$

Beachte, dass: $\hat{U}_S^\dagger(\vec{\theta}) = \hat{U}_S(-\vec{\theta})$

Beispiel: Rotation um z-Achse

$$\hat{U}_S(\varphi) = e^{\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{S}_z}$$

Erwartungswerte: S_z :

$$\langle \psi | e^{\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{S}_z} \hat{S}_z e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{S}_z} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{S}_z | \psi \rangle$$

←
Kommutiert

für $\hat{S}_+$:

$$\langle \psi | e^{\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{S}_z} \hat{S}_+ e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{S}_z} | \psi \rangle = \begin{cases} \hat{1} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \\ \text{nur } \langle\uparrow|\hat{S}_+|\downarrow\rangle \neq 0 \end{cases}$$

$$= \langle \psi | e^{\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{S}_z} |\uparrow\rangle \langle\uparrow|\hat{S}_+|\downarrow\rangle \langle\downarrow| e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{S}_z} | \psi \rangle =$$

$$= e^{i\varphi} \langle \psi | \uparrow \rangle \langle\uparrow|\hat{S}_+|\downarrow\rangle \langle\downarrow| \psi \rangle = e^{i\varphi} \langle \psi | \hat{S}_+ | \psi \rangle$$

Analog für $\hat{S}_-$ mit $e^{i\varphi} \rightarrow e^{-i\varphi}$

Damit:

$$\langle \psi | e^{\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{S}_z} \hat{S}_x e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{S}_z} | \psi \rangle = \cos \varphi \langle \psi | \hat{S}_x | \psi \rangle$$

$$\langle \psi | e^{\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{S}_z} \hat{S}_y e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{S}_z} | \psi \rangle = \sin \varphi \langle \psi | \hat{S}_y | \psi \rangle$$

$\Rightarrow$ Die Spin-Komponenten rotieren wie bei einem Vektor!

Spinor $\Leftrightarrow$ zweikomponenten Vektor $\Leftrightarrow$

$\hat{U}_s(\vec{\theta}) \sim (2 \times 2)$ Matrix: $\hat{d}_s(\vec{\theta})$
mit Hilfe der Pauli-Matrizen. ($\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$)

$$\hat{d}_s(\vec{\theta}) = e^{\frac{i}{2} \vec{\theta} \cdot \vec{\sigma}} = \hat{\sigma}_0 \cos \frac{\theta}{2} + i \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\theta}{2}$$

mit $\vec{\theta} = \theta \vec{n}$ und $\vec{n}^2 = 1$

Denn:

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{e}' = \hat{d}_s(\vec{\theta}) \vec{\sigma} \cdot \vec{e} \hat{d}_s(-\vec{\theta}) \Leftrightarrow \vec{e} \rightarrow \vec{e}'$$

$$\vec{e}' = \hat{R}(\vec{\theta}) \vec{e}$$

$\hat{R}$ - Rotationsmatrix in 3d

Zweivertigkeit: Rotation der Spin $= \frac{1}{2}$

$$\theta = 2\pi \rightarrow \hat{d}_s(2\pi \vec{n}) \vec{\sigma} \cdot \vec{e} \hat{d}_s(-2\pi \vec{n}) = \vec{\sigma} \cdot \vec{e}$$

$$\hat{d}_s(2\pi \vec{n}) |\vec{e}s\rangle = -|\vec{e}s\rangle$$

d.h. die räumlich äquivalenten Rotationen $\vec{\theta}$ und $\vec{\theta} + 2\pi \vec{n}$ ergeben:

$$\hat{d}_s(\vec{\theta}) \quad \text{und} \quad \hat{d}_s(\vec{\theta} + 2\pi \vec{n}) = -\hat{d}_s(\vec{\theta})$$

Erst die Rotation um 4π führt wieder auf denselben Zustand zurück!

Parität- und Zeitumkehr-Transformationen

Paritätsoperator - $\hat{P}$ ($\hat{P}^\dagger = \hat{P}^{-1}$)

$$\hat{P} \vec{r} \hat{P}^{-1} = -\vec{r} \quad \text{und} \quad \hat{P} \vec{p} \hat{P}^{-1} = -\vec{p}$$

$$\rightarrow \hat{P}^{-1} \vec{S} \hat{P} = \vec{S} \quad - \hat{P} \text{ lässt } \vec{S} \text{ invariant!}$$

$$\text{analog zu } \vec{L}: \hat{P}^{-1} \vec{L} \hat{P} = \vec{L}$$

Zeitumkehr - $\hat{T}$

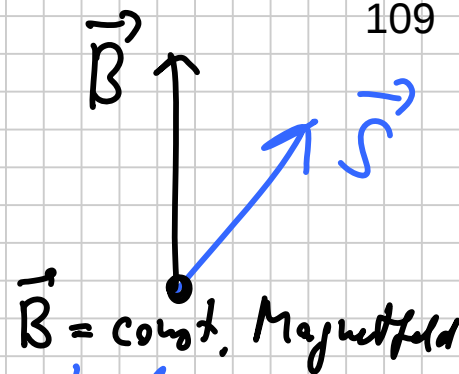
$$\hat{T} \vec{r} \hat{T}^{-1} = \vec{r} \quad \text{und} \quad \hat{T} \vec{p} \hat{T}^{-1} = -\vec{p}$$

$$\rightarrow \hat{T}^{-1} \vec{S} \hat{T} = -\vec{S}$$

$$\text{analog zu } \vec{L}: \hat{T}^{-1} \vec{L} \hat{T} = -\vec{L}$$

6.5 Spin-Präzession

$$\hat{H}_s = -\frac{ge}{2mc} \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B}$$



Die Spindynamik wird durch die Operator Bewegungsgleichung beschrieben:

$$\frac{d}{dt} \hat{\vec{S}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\vec{S}}, \hat{H}] = \frac{ge}{2mc} \hat{\vec{S}} \times \vec{B}$$

$\nwarrow$ H_s

oder:

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{S} \times \vec{B} \quad - \text{Landau-Lifschitz-Gilbert}$$

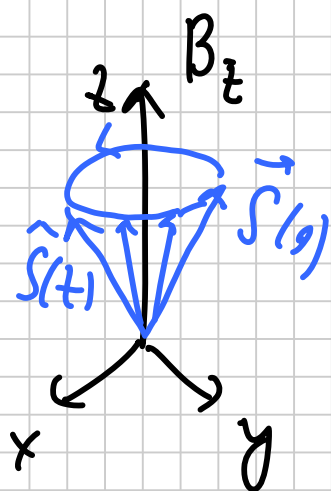
Annahme: $\vec{B} \parallel e_z$

$$\frac{d\hat{S}_x}{dt} = \omega_0 \hat{S}_y, \quad \frac{d\hat{S}_y}{dt} = -\omega_0 \hat{S}_x, \quad \frac{d\hat{S}_z}{dt} = 0$$

mit $\omega_0 = \frac{geB_z}{2mc}$ - Larmor ω_0

Lösung:

$$\begin{cases} \hat{S}_x(t) = \hat{S}_x(0) \cos \omega_0 t + \hat{S}_y(0) \sin \omega_0 t \\ \hat{S}_y(t) = -\hat{S}_x(0) \sin \omega_0 t + \hat{S}_y(0) \cos \omega_0 t \\ \hat{S}_z(t) = \hat{S}_z(0) \end{cases}$$



Der Spin präzessiert im $\vec{B}$ -feld: Larmor-Präzession!

Entwicklung des Zustands des Systems: $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_s t} |\psi(0)\rangle = e^{i\omega_0 t \hat{S}_z / \hbar} |\psi(0)\rangle$$