Kap. 7 Der Spin.

Der Spin ist ein interner Freiheitsgrad eines Teilchen und hängt weder von den räumlichen Koordinaten noch von Impuls ab.

Der Spin legt die Statistik (Fermion oder Boson) fest. (QMII).

Stern Gerlach Experiment (1922).

$$\hat{\mathbf{M}} = -\frac{e}{2\,m\,c}\hat{\mathbf{L}}$$

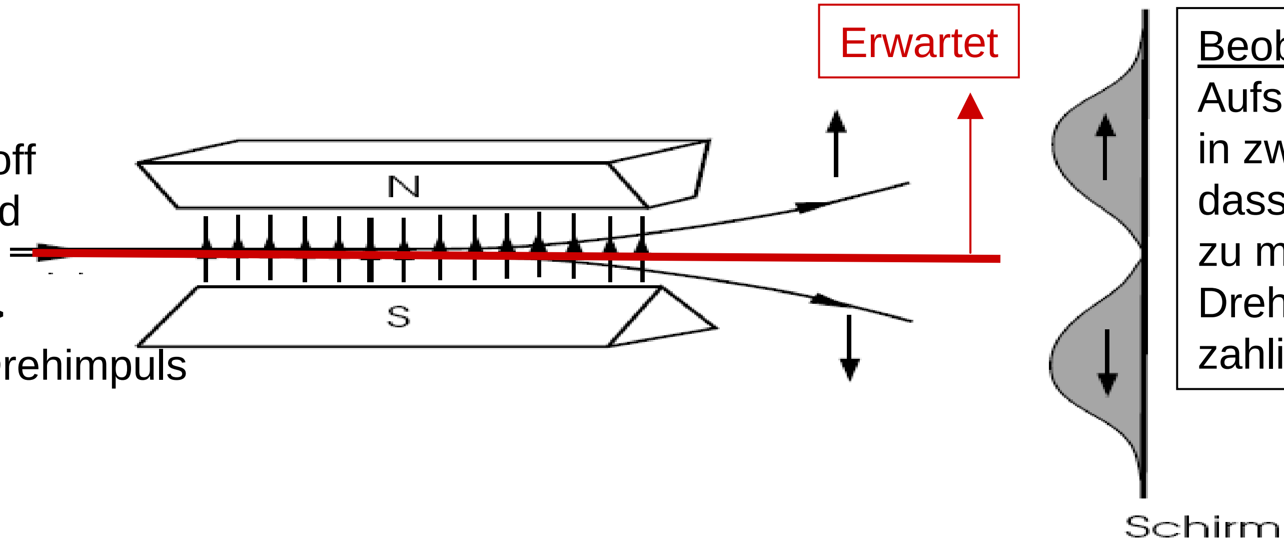
Magnetisches Moment des Wasserstoff Atoms.

$$\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{M}\bullet\mathbf{B}) \approx M_z \frac{\partial}{\partial z} B_z \; \mathbf{e}_z$$

Kraft auf Magnetisches Moment. => Zuständen mit verschiedenen $\hat{L}_z$ Quantenzahlen erfahren verschieden Starke Kräfte.

Quelle:

Wasserstoff
1s Zustand
oder
Ag : 5s =>
Gesamt Drehimpuls
l=0



Beobachtet:
Aufspaltung des Stahls in zwei Komponenten so dass, l=1/2. Passt nicht zu möglichen Orbital Drehimpulse die Ganz-zahlig sind!

Interpretation: Elektron besitzt eine interne Drehimpuls **„Spin“** von $l = 1/2$

Bem: Spin der Elektron folgt aus relativistische Formulierung der QM. Dirac Gleichung (QMII)

Der Spin ½ Operator.

- Analog zu Drehimpuls: $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z),\qquad [\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \varepsilon^{i,j,k} \hat{S}_k$

- Spin ist unabhängig von Orbital Freiheitsgraden. $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{orbital} \otimes \mathcal{H}_{spin}$

$$\left[1 \otimes \hat{S}_i, \hat{X}_j \otimes 1\right] = \left[1 \otimes \hat{S}_i, \hat{P}_j \otimes 1\right] = \left[1 \otimes \hat{S}_i, \hat{L}_j \otimes 1\right] = 0$$

- Es gibt Zwei Spin zuständen $|\uparrow\rangle, \ |\downarrow\rangle$ mit $\hat{S}_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle, \ \hat{S}_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$

$$\left[\text{Dreimpuls Notation: } |\uparrow\rangle = \left|l = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2}\right\rangle, \quad |\downarrow\rangle = \left|l = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}\right\rangle\right]$$

- $|\uparrow\rangle, \ |\downarrow\rangle$ Ist Basis von Spin ½ Hilbertraum $\mathcal{H}_s$

$$\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1, \quad \langle\downarrow|\uparrow\rangle = 0, \quad \sum_{s=\uparrow,\downarrow} |s\rangle\langle s| = 1_s$$

$$\boxed{\begin{array}{ll} \hat{S}_{+} = \hat{S}_{x} + i\hat{S}_{y}\,, & \hat{S}_{-} = \hat{S}_{x} - i\hat{S}_{y} \\ \hat{S}_{+}\left|\uparrow\right\rangle = 0\,, & \hat{S}_{+}\left|\downarrow\right\rangle = \hbar\left|\uparrow\right\rangle \\ \hat{S}_{-}\left|\uparrow\right\rangle = \hbar\left|\downarrow\right\rangle, & \hat{S}_{-}\left|\downarrow\right\rangle = 0 \end{array}}$$

- Der Spin Operator kann man durch die 2X2 Pauli Spin Matrizen Darstellen.

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_{s,s'=\uparrow,\downarrow} |s'\rangle\langle s|\ \langle s'|\hat{\mathbf{S}}|s\rangle \quad , \langle s'|\hat{\mathbf{S}}|s\rangle = \frac{\hbar}{2}\left([\sigma_x]_{s',s}, [\sigma_y]_{s',s}, [\sigma_z]_{s',s}\right)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

<u>Magnetisches Moment der Elektron:</u>

$$\hat{\mathbf{M}}_s = -g\frac{e}{2mc}\hat{\mathbf{S}} = -g\,\mu_B\,\hat{\mathbf{S}}/\hbar$$

$g:$ Landé oder Giromagnetische Faktor.

$g = 2$ Kann man aus der Dirac Gleichung herleiten.

Dynamik von Spin Systeme

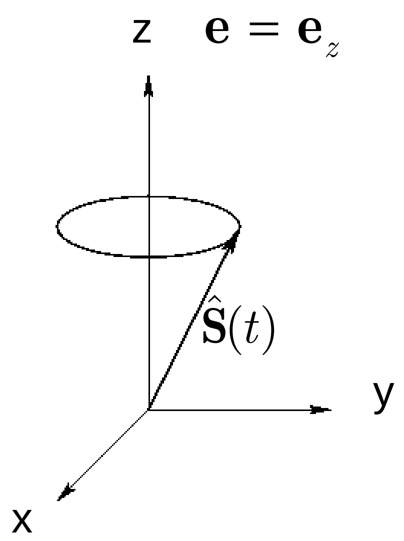
Spin Präzession.

$$\hat{H} = g\mu_B \mathbf{B} \bullet \hat{\mathbf{S}} / \hbar$$

Heisenberg bild:

$$\hat{\mathbf{S}}(t) = e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{\mathbf{S}}\, e^{-it\hat{H}/\hbar} = R(\mathbf{e},\ \omega_0 t)\,\hat{\mathbf{S}}(t=0),$$

$$\mathbf{e} = \mathbf{B}/|\mathbf{B}|, \qquad \omega_0 = \frac{ge|\mathbf{B}|}{2mc}$$ Larmor Frequenz



$R(\mathbf{e},\ \omega_0 t)$ Drehung um Achse **e** Winkel $\omega_0 t$

In Zeit $T = 2\pi/\omega_0$ hat $\hat{\mathbf{S}}(t)$ eine volle Umdrehung durchgeführt.

Schrödinger bild:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-it\hat{H}/\hbar}|\psi\rangle = e^{-i\omega_0 t\mathbf{e}\bullet\hat{\mathbf{S}}/\hbar}|\psi\rangle = \sum_{\sigma,\sigma'=\uparrow,\downarrow}|\sigma\rangle\langle\sigma|e^{-i\omega_0 t\mathbf{e}\bullet\hat{\mathbf{S}}/\hbar}|\sigma'\rangle\langle\sigma'|\psi\rangle$$

$$\langle\sigma|e^{-i\omega_0 t\hat{S}_z/\hbar}|\sigma'\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \cos(\omega_0 t/2) - i\sin(\omega_0 t/2)\mathbf{e}_z & -i\sin(\omega_0 t/2)[\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y] \\ -i\sin(\omega_0 t/2)[\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y] & \cos(\omega_0 t/2) + i\sin(\omega_0 t/2)\mathbf{e}_z \end{pmatrix}$$

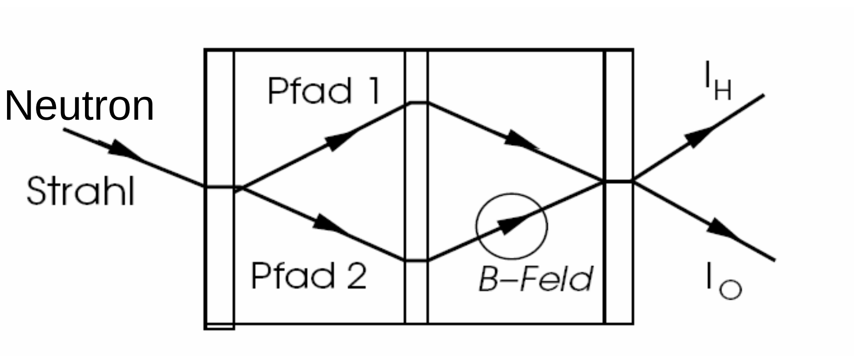
$$\Rightarrow |\Psi(t + 2\pi/\omega_0)\rangle = -|\Psi(t)\rangle \quad \text{obwohl} \quad \hat{\mathbf{S}}(t + 2\pi/\omega_0) = \hat{\mathbf{S}}(t)$$

Man erwartet Interferenz Phänomene mit Periode $T = 4\pi/\omega_0$!

Volume 54A, number 6 PHYSICS LETTERS 20 October 1975

VERIFICATION OF COHERENT SPINOR ROTATION OF FERMIONS ☆

H. RAUCH, A. ZEILINGER, G. BADUREK, A. WILFING
Atominstitut der Oesterreichischen Hochschulen, A-1020 Wien, Austria



Weg im Uniform Magnetfeld B_z hat Länge l
Geschwindigkeit der Neutrons: v

$$|\psi\rangle_{final} = |\psi\rangle_{Pfad\ 1} + |\psi\rangle_{Pfad\ 2} =$$

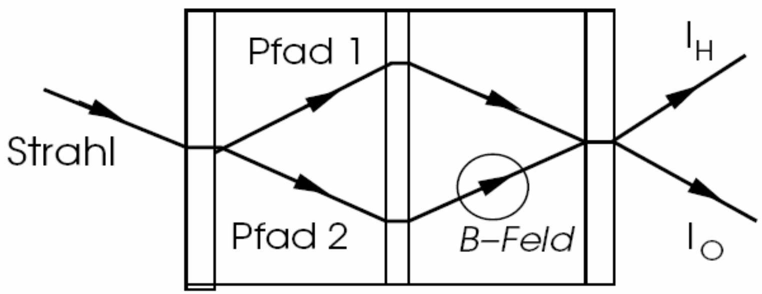
$$|\psi\rangle_{initial} + e^{-i\hat{S}_z \omega_0 l / v\hbar} |\psi\rangle_{initial}$$

Volle Spin rotation für: $\omega_0 l / v = 2\pi$

Periode der Interferenz Muster: $\omega_0 l / v = 4\pi$

VERIFICATION OF COHERENT SPINOR ROTATION OF FERMIONS ☆

H. RAUCH, A. ZEILINGER, G. BADUREK, A. WILFING
Atominstitut der Oesterreichischen Hochschulen, A-1020 Wien, Austria



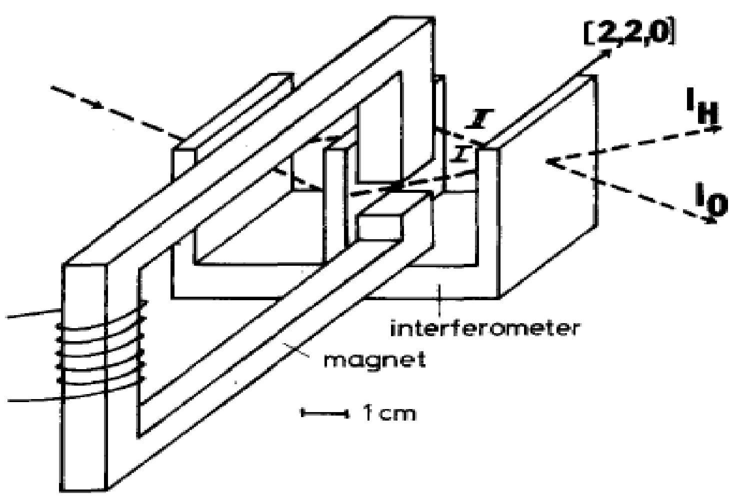


Fig. 1. Sketch of the experimental setup.

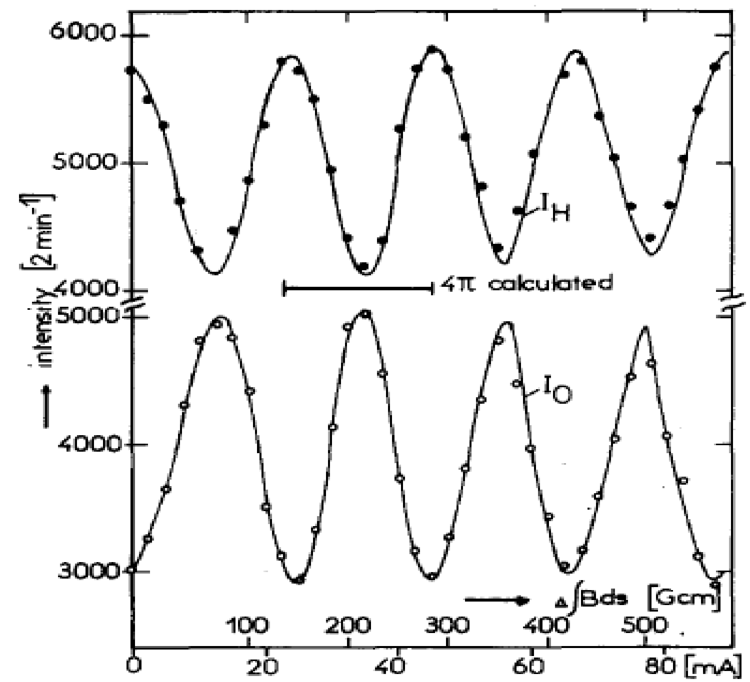
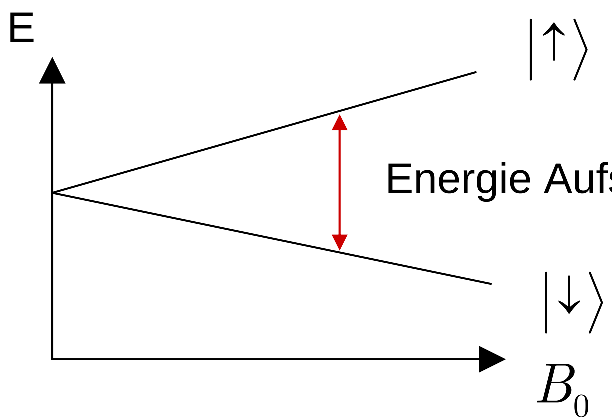


Fig. 2. Observed intensity oscillations of the 0- and H-beam as a function of the difference of the magnetic field action on beam I and II ($\Delta\int B\,ds = \int B_z\,ds$ (path I) $- \int B_z\,ds$ (path II).

NMR. Nukleare Magnetische Resonanz

$$\hat{H}_0 = g\mu_B \mathbf{B}_0 \bullet \hat{\mathbf{S}} / \hbar \,, \quad \mathbf{B}_0 = (0, 0, B_0)$$

Stationäre Zustände:



$$|\uparrow\rangle \,, \quad E_\uparrow = g\mu_B B_0 / 2$$

Energie Aufspaltung: $g\mu_B B_0 = \hbar\omega_0 \,,$ $\quad \omega_0$ Larmor Frequenz.

$$|\downarrow\rangle \,, \quad E_\downarrow = -g\mu_B B_0 / 2$$

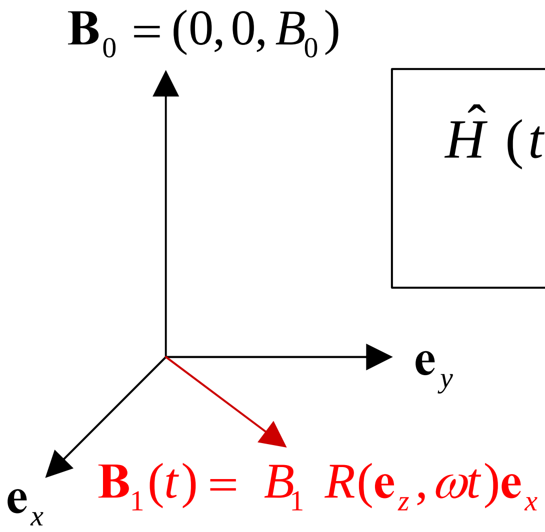
In Magnetfeld der Frequenz $\omega = \omega_0$ erwartet man ein Resonanzverhalten des

Spinflips Übergangs $|\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$

Modell:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + g\mu_B \mathbf{B}_1(t) \bullet \hat{\mathbf{S}} / \hbar \,, \qquad \mathbf{B}_1(t) = B_1(\cos(\omega t), \sin(\omega t), 0)$$

Gesucht. $\quad \left| \langle \downarrow | \hat{U}(t,0) | \uparrow \rangle \right|^2$



$$\boxed{\hat{H}(t) = \underbrace{\frac{g\,\mu_B B_0}{\hbar}}_{=\omega_0} \hat{S}_z + \underbrace{\frac{g\,\mu_B B_1}{\hbar}}_{=\omega_1} \underbrace{R(\mathbf{e}_z, \omega t)\,\mathbf{e}_x}_{\mathbf{e}_1(t)} \bullet \hat{\mathbf{S}}}$$

Sei: $\hat{U}_0(t) = e^{-it\omega \hat{S}_z/\hbar}$ so dass, $\hat{U}_0^\dagger(t)\hat{H}(t)\hat{U}_0(t) = \tilde{\hat{H}} = \omega_0 \hat{S}_z + \omega_1 \hat{S}_x$

und $$\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}_0^\dagger(t)\hat{U}(t,0) = -\frac{i}{\hbar}\left[\tilde{\hat{H}} - \omega \hat{S}_z\right]\hat{U}_0^\dagger(t)\hat{U}(t,0)$$

Mit $$\left[\tilde{\hat{H}} - \omega \hat{S}_z\right] = \Omega\; \boldsymbol{\alpha}\bullet\hat{\mathbf{S}}, \quad \boldsymbol{\alpha} = (\omega_1, 0, \omega_0 - \omega)/\Omega, \quad \Omega = \sqrt{\omega_1^2 + (\omega_0 - \omega)^2}$$

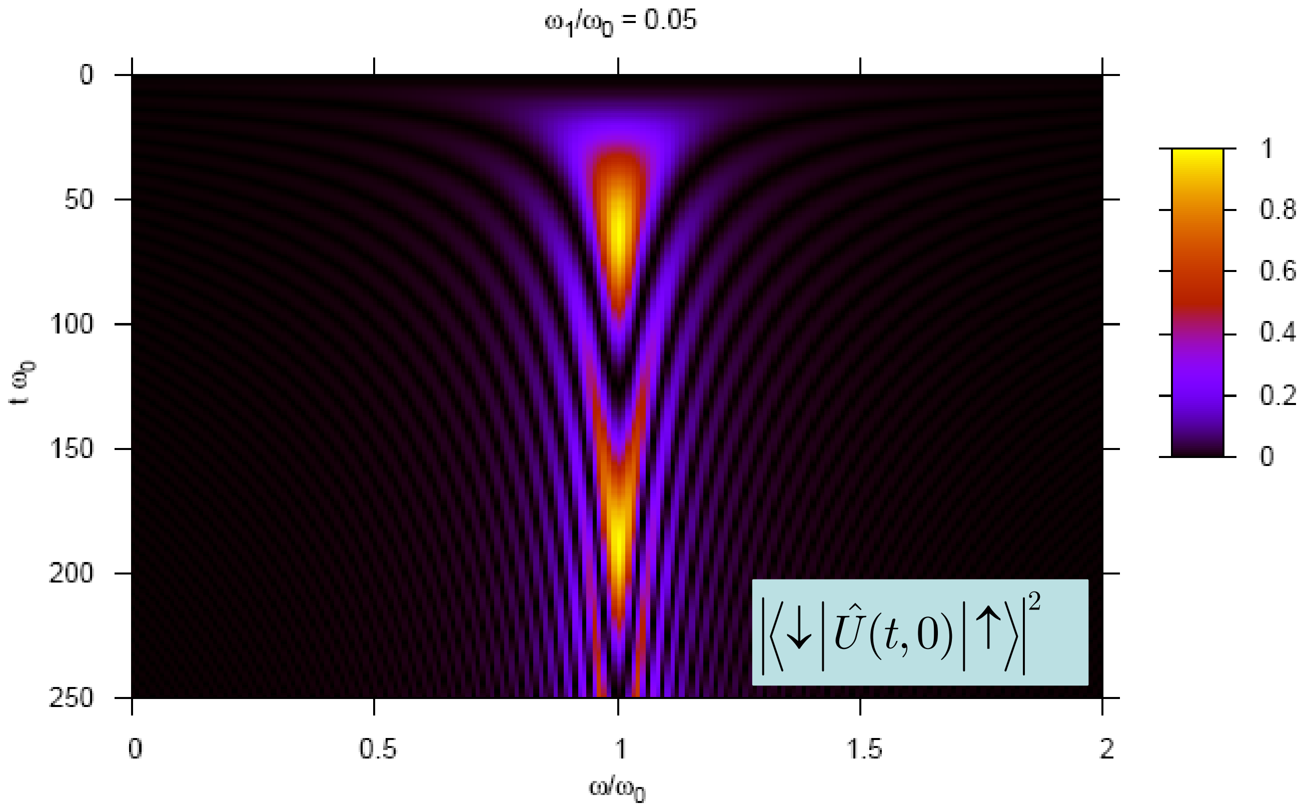
$$\hat{U}_0^\dagger(t)\hat{U}(t,0) = e^{-it\Omega\, \boldsymbol{\alpha}\bullet\hat{\mathbf{S}}/\hbar} \quad \text{oder} \quad \hat{U}(t,0) = e^{-it\omega\hat{S}_z/\hbar} e^{-it\Omega\, \boldsymbol{\alpha}\bullet\hat{\mathbf{S}}/\hbar}$$

Rechnung ergibt:

$$\left|\left\langle \downarrow \left| \hat{U}(t,0) \right| \uparrow \right\rangle\right|^2 = \sin^2\left(\sqrt{(\omega-\omega_0)^2+\omega_1^{\,2}}\; t/2\right)\frac{\omega_1^{\,2}}{(\omega-\omega_0)^2+\omega_1^{\,2}} \qquad \omega_1 = g\,\mu_B B_1/\hbar$$

- Resonanz in Amplitude bei $\omega = \omega_0 := g\mu_B B_0/\hbar$. Hängt von Magnetisches Moment des Kerns und Lokal Magnetfeld ab. Breite der Resonanz. ω_1
- Beim Resonanz ist $\left|\left\langle \downarrow \left| \hat{U}(t,0) \right| \uparrow \right\rangle\right|^2 = \sin^2(\omega_1 t/2)$

=> Bei $t = \dfrac{\pi}{\omega_1}$ 100% Wahrscheinlichkeit Kernspin umzudrehen.



Der Spinor Zustand.

- **Gesamt Hilbertraum des Elektrons.**

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{orbital} \otimes \mathcal{H}_{spin} \qquad \text{mit} \quad \text{z.B.} \quad \mathcal{H}_{orbital} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \quad \text{und} \quad \mathcal{H}_{spin} = \mathbb{C}^2$$

- **Basis von $\mathcal{H}$**

Sei $|\mathbf{x}\rangle$ basis von $\mathcal{H}_{orbital}$ d.h. $\int d^3\mathbf{x} \; |\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}| = 1_{orbital}$

Sei $|s\rangle$ basis von $\mathcal{H}_{spin}$ d.h. $\sum_{s=\uparrow,\downarrow} |s\rangle\langle s| = 1_{spin}$

Dann ist:

$$|\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle \;\text{ basis von }\; \mathcal{H} \quad \text{d.h.} \quad \forall \; |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad |\psi\rangle = \sum_{s=\uparrow,\downarrow} \int d^3\mathbf{x} \; \psi_s(\mathbf{x}) \, |\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle$$

- **Skalarprodukt:**

$$\left(\langle\mathbf{y}| \otimes \langle s'|\right)\left(|\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle\right) = \langle\mathbf{y}|\mathbf{x}\rangle\langle s'|s\rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{y}-\mathbf{x})\,\delta_{s,s'}$$

Damit ist:

$$\psi_s(\mathbf{x}) = \left(\langle\mathbf{x}| \otimes \langle s|\right) |\psi\rangle$$

- <u>Operatoren in $\mathcal{H}$</u> $\quad \hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$

$$\hat{A} = \hat{A}_{orbital} \otimes \hat{A}_{spin} \quad \text{und} \quad \hat{A}_{orbital} \otimes \hat{A}_{spin} \quad (|\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle) = \left(\hat{A}_{orbital}|\mathbf{x}\rangle\right) \otimes \left(\hat{A}_{spin}|s\rangle\right)$$

$$\hat{A}_{orbital} : \mathcal{H}_{orbital} \to \mathcal{H}_{orbital} \qquad \hat{A}_{spin} : \mathcal{H}_{spin} \to \mathcal{H}_{spin}$$

<u>Beisp:</u>

$$\hat{1} = \hat{1}_{orbital} \otimes \hat{1}_{spin} = \sum_{s=\uparrow,\downarrow} \int d^3\mathbf{x} \; \left(|\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle\right)\left(\langle\mathbf{x}| \otimes \langle s|\right)$$

<u>Hamilton Operator des Elektrons im äußere EM Feld.</u>

$$\hat{H} = \underbrace{\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\hat{\mathbf{X}}\right)\right)^2 - e\phi\left(\hat{\mathbf{X}}\right)\right]}_{=\hat{H}_{Orbital}} \otimes \hat{1}_s \quad \overbrace{+ \frac{ge}{2mc}\underbrace{\mathbf{B}\left(\hat{\mathbf{X}}\right) \otimes \hat{\mathbf{S}}}_{=\sum_{i=1}^{3} B_i\left(\hat{\mathbf{X}}\right)\otimes \hat{S}_i}}^{= -\mathbf{B}\left(\hat{\mathbf{X}}\right)\otimes \hat{\mathbf{M}}_s}$$

<u>Ortsraum Darstellung der Stationäre Schrödinger Gleichung.</u>

$$\left(\langle\mathbf{x}| \otimes \langle s|\right)\hat{H}\left|\psi\right\rangle = E \underbrace{\left(\langle\mathbf{x}| \otimes \langle s|\right)\left|\psi\right\rangle}_{=\psi_s(\mathbf{x})}$$

$$\sum_{s'=\uparrow,\downarrow} \int d^3\mathbf{y} \left(\langle \mathbf{x} | \otimes \langle s |\right) \hat{H} \left(|\mathbf{y}\rangle \otimes |s'\rangle\right)\left(\langle \mathbf{y} | \otimes \langle s' |\right)|\psi\rangle = E\,\psi_s(\mathbf{x})$$

$$\sum_{s'=\uparrow,\downarrow} \left[\hat{H}_{Orbital}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla,\ \mathbf{x}\right) \delta_{s,s'} + \frac{ge}{2mc}\sum_{i=1}^{3} B_i(\mathbf{x}) \left[S_i\right]_{s,s'} \right] \psi_{s'}(\mathbf{x}) = E\,\psi_s(\mathbf{x})$$

$S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i, \quad \sigma_i$ Pauli Spin Matrix

<u>Mit Spinor Wellenfunktion</u> $\vec{\psi}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{x}) \\ \psi_\downarrow(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$ <u>hat man dann:</u>

$$\boxed{\left[\hat{H}_{Orbital}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla,\ \mathbf{x}\right) 1_s + \frac{ge}{2mc}\sum_{i=1}^{3} B_i(\mathbf{x}) S_i \right] \vec{\psi}(\mathbf{x}) = E\,\vec{\psi}(\mathbf{x})}$$

<u>Pauli Theorie des Elektrons.</u>

(Coulomb Eichung)

Beisp: Wasserstoff Atom mit $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x}) = (0, 0, B)$ => $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\mathbf{x} \times \mathbf{B}$

$$\hat{H}_{Orbital} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} + \frac{e}{2mc} B \hat{L}_z$$

(Vernachlässigung der diagmagnetischen Term)

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} \right) 1_s + \frac{e}{2mc} B \left(\hat{L}_z 1_s + g S_z \right)$$

Stationäre Zustände:

$$\boxed{\vec{\psi}_{n,l,m,\uparrow}(\mathbf{x}) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta,\varphi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}$$

$$E_{n,m,\uparrow} = -Ry \frac{Z}{n^2} + \frac{eB}{2mc} \hbar (m + g/2)$$

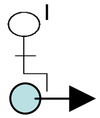
$$\boxed{\vec{\psi}_{n,l,m,\downarrow}(\mathbf{x}) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta,\varphi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}$$

$$E_{n,m,\downarrow} = -Ry \frac{Z}{n^2} + \mu_B B (m - g/2)$$

Gesamt Magnetisches Moment:

$$\boxed{\hat{\mathbf{M}}_{tot} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{B}} = -\frac{e}{2mc} \left(\hat{\mathbf{L}} 1_s + g \mathbf{S} \right)}$$

Spin-Bahn Kopplung.

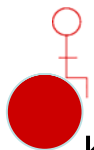


Elektron: -e

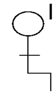
$\mathbf{v}$

In CM Intertialsystem 

Elektron bewegt sich mit Geschwindigkeit **v.**



Kern: Ze

In  Elektron Ruht.

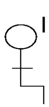
$$\mathbf{B}' = \mathbf{B} - \frac{1}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{E}, \qquad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \approx 1$$

(Siehe ED)

In $\hat{H} = \underbrace{\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\hat{\mathbf{X}}\right)\right)^2 - e\phi\left(\hat{\mathbf{X}}\right)\right]}_{=\hat{H}_{Orbital}} \otimes \hat{1}_s + g\mu_B \mathbf{B}\left(\hat{\mathbf{X}}\right)\otimes \hat{\mathbf{S}}/\hbar$ sollte man

B durch B‘ ersetzen. Mit $\phi(\mathbf{x}) = \phi(r)$, $\mathbf{E} = -\nabla\phi(\mathbf{x})$, $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ ist

$$\hat{H} = \hat{H}_{Orbital} \otimes \hat{1}_s + g\mu_B \mathbf{B}\left(\hat{\mathbf{X}}\right)\otimes\hat{\mathbf{S}}/\hbar - \underbrace{\frac{1}{2}\frac{g\mu_B}{cm}\frac{1}{\left|\hat{\mathbf{X}}\right|}\left.\frac{\partial\phi}{\partial r}\right|_{\mathbf{x}=\hat{\mathbf{X}}}\hat{\mathbf{L}}\otimes\hat{\mathbf{S}}/\hbar}_{\text{Spin-Bahn Kopplung.}}$$

 Ist keine Inertialsystem! Korrektur: Klassisch Thomas precession (Siehe Jackson, Classical ED.) ,
QM Dirac Gleichung (Siehe QM II) -> Faktor ½.

Spin-Bahn Kopplung, Symmetrie Eigenschaften.

Hilbert Raum: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathrm{Orbital}} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{spin}}$

Hamilton Operator:

$$\hat{H} = \overbrace{\left[\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\hat{\mathbf{X}}|} \right]}^{\hat{H}_{Orb}} \otimes \hat{1}_{spin} + \alpha\, \hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{\mathbf{S}} = \hat{H}_{Orb} \otimes \hat{1} + \alpha \left(\hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{1} \right) \bullet \left(\hat{1} \otimes \hat{\mathbf{S}} \right)$$

$$= \hat{H}_{Orb} \otimes \hat{1} + \alpha \sum_{i=1}^{3} \left(\hat{L}_i \otimes \hat{1} \right) \bullet \left(\hat{1} \otimes \hat{S}_i \right)$$

$\hat{H}$ ist **nicht** invariant unter $\hat{T}_L(\mathbf{e}, \Theta) = e^{-i\mathbf{e} \bullet (\hat{\mathbf{L}} \otimes 1)\Theta / \hbar}$

$\hat{H}$ ist invariant unter $\hat{T}(\mathbf{e}, \Theta) = e^{-i\mathbf{e} \bullet \left[\hat{\mathbf{L}} \otimes 1 + 1 \otimes \hat{\mathbf{S}} \right] \Theta / \hbar}$,

$$\mathrm{Def}: \hat{\mathbf{J}} \equiv \hat{\mathbf{L}} \otimes 1 + 1 \otimes \hat{\mathbf{S}}$$

Gesamt Drehimpuls.