

Zusammenfassung (30.6) 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).

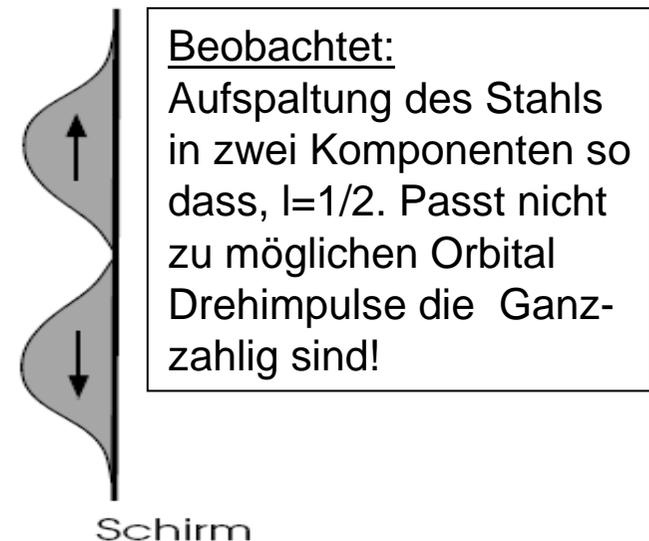
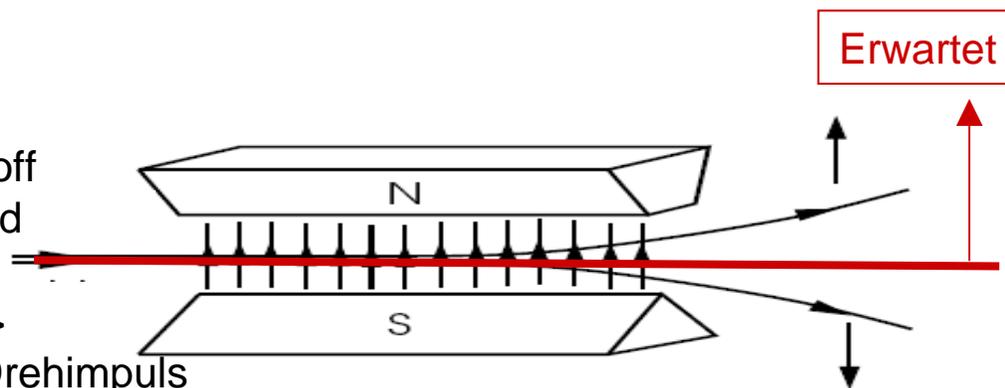
$$\hat{\mathbf{M}} = - \frac{e}{2 m c} \hat{\mathbf{L}} \quad \text{Magnetisches Moment des Wasserstoff Atoms.}$$

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

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

Quelle:

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



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 1/2 Operator.**

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

➤ Spin ist unabhängig von Orbital Freiheitsgraden. $[\hat{S}_i, \hat{X}_j] = [\hat{S}_i, \hat{P}_j] = [\hat{S}_i, \hat{L}_j] = 0$

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

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

➤ $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ Ist Basis von Spin 1/2 Hilbertraum \mathcal{H}_s

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

➤
$$\begin{aligned} \hat{S}_+ &= \hat{S}_x + i\hat{S}_y, & \hat{S}_- &= \hat{S}_x - i\hat{S}_y \\ \hat{S}_+ |\uparrow\rangle &= 0, & \hat{S}_+ |\downarrow\rangle &= \hbar |\uparrow\rangle \\ \hat{S}_- |\uparrow\rangle &= \hbar |\downarrow\rangle, & \hat{S}_- |\downarrow\rangle &= 0 \end{aligned}$$

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

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

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

Magnetisches Moment der Elektron:

$$\hat{\mathbf{M}}_s = -g \frac{e}{2mc} \hat{\mathbf{S}} = -g \mu_B \hat{\mathbf{S}} / \hbar \quad g: \text{ Landé oder Giromagnetische Faktor.}$$

$g \approx 2$ Kann man aus der Dirac Gleichung herleiten.

Zusammenfassung 3.7 Der Spinor Zustand.

➤ Gesamt Hilbertraum des Elektrons.

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

➤ 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:

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

Damit ist:

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

➤ Operatoren in \mathcal{H} $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$

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

$$\hat{A}_{orbital} : \mathcal{H}_{orbital} \rightarrow \mathcal{H}_{orbital} \quad \hat{A}_{spin} : \mathcal{H}_{spin} \rightarrow \mathcal{H}_{spin}$$

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

Hamilton Operator des Elektrons im äußere EM Feld.

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

Ortsraum Darstellung der Stationäre Schrödinger Gleichung.

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

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

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

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

Mit Spinor Wellenfunktion

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

hat man dann:

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

Pauli Theorie des Elektrons.

(Coulomb Eichung)

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

$$\hat{H}_{Orbital} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} + \frac{e}{2mc} B \hat{L}_z \quad (\text{Vernachlässigung der diamagnetischen Term})$$

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

Stationäre Zustände:

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

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

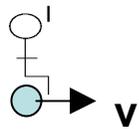
$$\vec{\psi}_{n,l,m,\downarrow}(\mathbf{x}) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

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

Gesamt Magnetisches Moment:

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

Zusammenfassung 7.7. Spin-Bahn Kopplung.

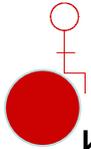


Elektron: $-e$

In CM Inertialsystem



Elektron bewegt sich mit Geschwindigkeit \mathbf{v} .



Kern: Ze

In  Elektron Ruht.

$$\mathbf{B}' = \mathbf{B} - \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \approx 1 \quad (\text{Siehe ED})$$

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

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

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

Spin-Bahn Kopplung.



Ist keine Inertialsystem! Korrektur: Klassisch Thomas precession (Siehe Jackson, Classical ED.), QM Dirac Gleichung (Siehe QM II) \rightarrow Faktor $\frac{1}{2}$.

Dynamik von Spin Systeme

Spin Präzession.

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

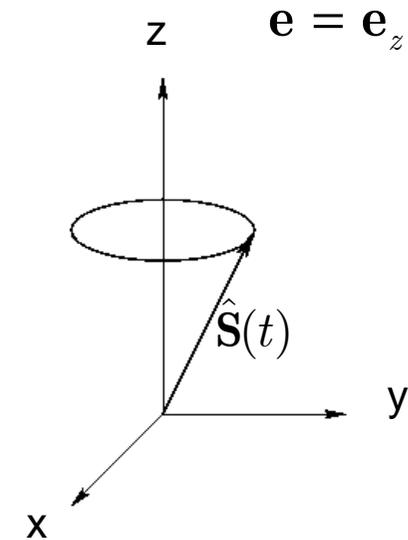
Heisenberg bild:

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

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

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

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



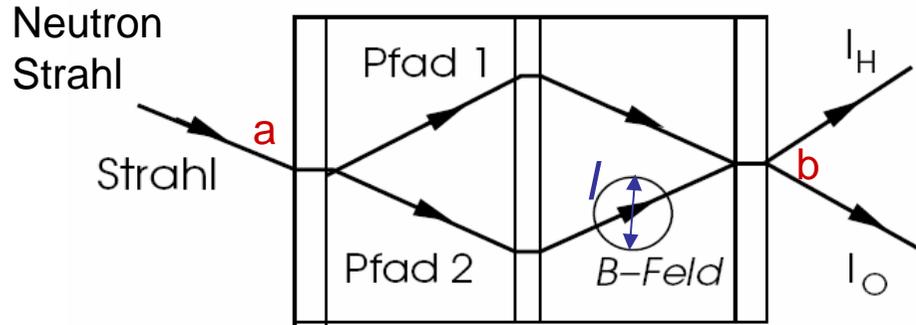
Schrödinger bild:

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

$$\langle \sigma | e^{-i\omega_0 t \hat{S}_z / \hbar} | \sigma' \rangle \rightarrow \begin{pmatrix} e^{-i\omega_0 t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} \Rightarrow |\Psi(t+T)\rangle = -|\Psi(t)\rangle \quad \text{obwohl} \quad \hat{\mathbf{S}}(t+T) = \hat{\mathbf{S}}(t)$$

Man erwartet Interferenz Phänomene mit Periode $2T = T_1$

Experimentelle Nachweis,



$$H^{tot} = \left(\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}) \right) \otimes 1_s + g \mu_B B(\hat{\mathbf{X}}) \otimes \hat{S}_z / \hbar$$

$$\langle \mathbf{b} | \otimes \langle s | \hat{U}(t, 0) | \mathbf{a} \rangle \otimes | s' \rangle = \int \{ D\mathbf{x}(r) \} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t dr \underbrace{\frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(r) - V(\mathbf{x}(r))}_{=L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})} - g \mu_B B(\mathbf{x}(r)) [\sigma_z]_{s,s'} / 2 \right) \approx$$

$$K_1^{Orbital} + K_2^{Orbital} e^{-i\Gamma_2^{Spin} [\sigma_z]_{s,s'} / 2} \quad \text{mit} \quad K_j^{Orbital} = e^{\frac{i}{\hbar} \int_{\text{Pfad } j} dr L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})}, \quad \Gamma^{Spin} = \frac{g \mu_B}{\hbar} \int_{\text{Pfad 2}} dr B(\mathbf{x}(r))$$

Sei $\vec{\Psi}(\mathbf{x}, t=0) \approx \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{a}) \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ so dass,

$$\sum_{s=\pm 1} |\psi_s(\mathbf{b}, t)|^2 \approx \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} |K_1^{Orb}|^2 + |K_2^{Orb}|^2 + 2 \text{Re} \left(K_1^{Orb*} K_2^{Orb} e^{-i\Gamma^{Spin} s / 2} \right)$$

Interferenz Muster ändert sich periodisch mit Periode $\Delta \Gamma^{Spin} = \frac{g \mu_B}{\hbar} \int_{\text{Pfad 2}} dr \Delta B(\mathbf{x}(r)) = 4\pi$

VERIFICATION OF COHERENT SPINOR ROTATION OF FERMIONS [☆]

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

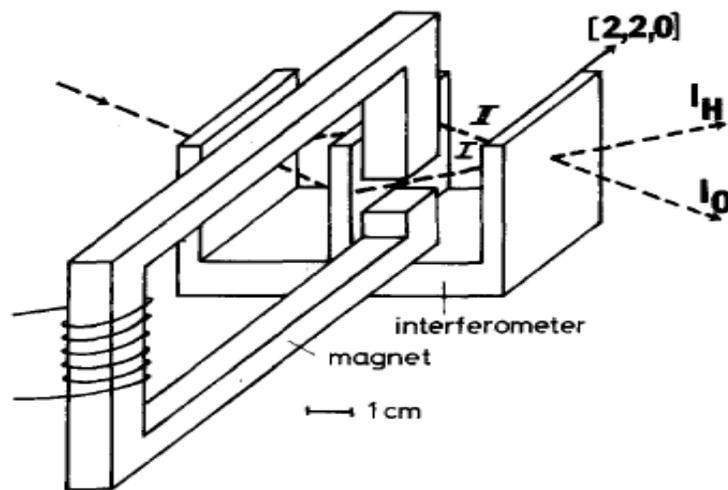
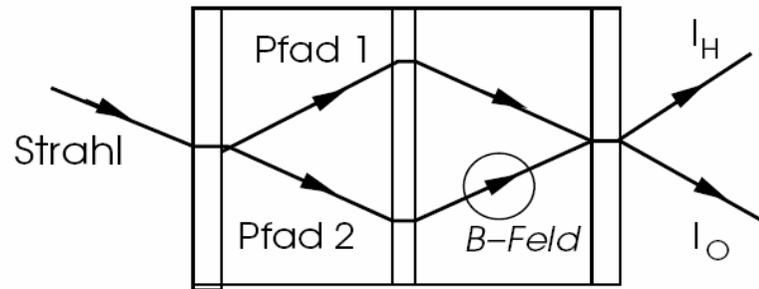


Fig. 1. Sketch of the experimental setup.

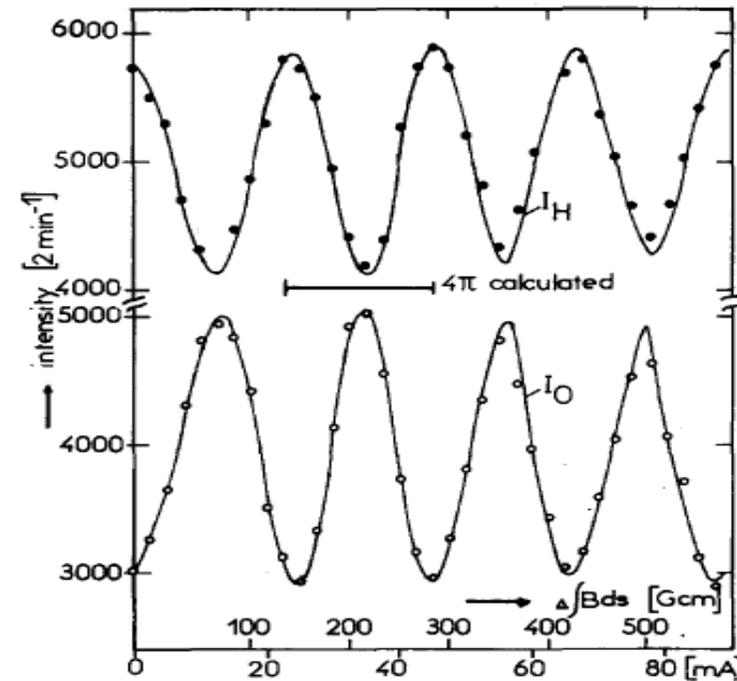


Fig. 2. Observed intensity oscillations of the 0- and H-beam as a function of the difference of the magnetic field action on beam I and II ($\Delta \int B ds = \int B_z ds$ (path I) - $\int B_z ds$ (path II)).

Zeitevolution Operator für Zeitabhängige Hamilton Operatoren $\hat{H}(t)$

Def: $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$

Aus Schr. Gl. : $\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$

➤ $\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1) \hat{U}(t_1, t_0), \quad t > t_1 > t_0$

➤ U ist Unitär. $\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{1}$

➤ Dyson Reihe.

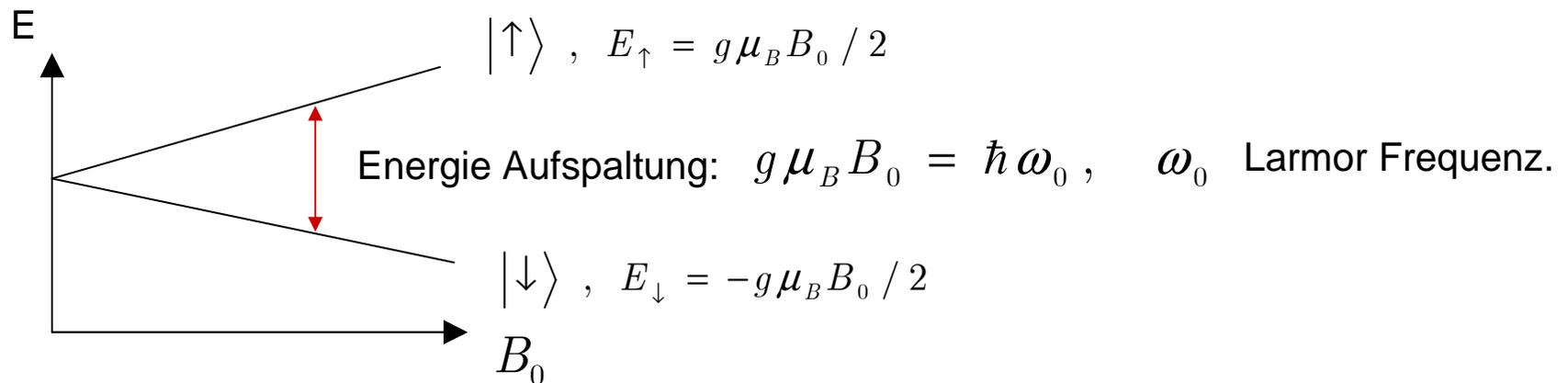
$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n)$$

Bem: Falls $\hat{H}(t) = \hat{H}$ liefert die Dyson Reihe: $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}$

NMR. Nukleare Magnetische Resonanz

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

Stationäre Zustände:



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

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

Modell:

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

Rechnung ergibt:

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

➤ 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 $\left| \langle \downarrow | \hat{U}(t, 0) | \uparrow \rangle \right|^2 = \sin^2(\omega_1 t / 2)$

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

