Elektronen- und Kernspin Resonanz (nach Haken, Wolf: Atom- und Quantenphysik)

(14.2. Quantentheoretische Behandlung des Elektronen- und Protonenspins)

14.2.1 Spin als Drehimpuls

Elektron → Eigendrehimpuls → Spin (auch Protonen, Neutronen, etc.)

Bis jetzt: Schrödingergl.: ohne Spin   nun: Spin betrachten, mit einbeziehen

(- Spin - Bahn Kopplung
- Zeeman Effekt
- Spinresonanz
- Pauli Prinzip

Spin ist ein Drehimpuls → Vektor mit Komponenten s_x, s_y, s_z

$$\vec{s} = (s_x, s_y, s_z) \qquad (14.19)$$

Experimente: Spin-Komponente // externem $\vec{B}$ (z.B. $\hat{z}$) $+\hbar/2$ oder $-\hbar/2$

→ echtes 2-Niveau System: Wellenfunktionen: $|\uparrow\rangle$ $|\downarrow\rangle$

Quantentheorie: Operatoren $(\vec{p} \to i\hbar\vec{\nabla})$ $\hat{s}$ ← Hut/Dach: Operator

Messung:
$$\hat{s}_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \qquad (14.20a)$$
$$\hat{s}_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \qquad (14.20b)$$

oder zusammengefasst:
$$\hat{s}_z |\psi_{m_s}\rangle = \hbar m_s |\psi_{m_s}\rangle \qquad (14.21)$$

$m_s = +1/2 \quad (\to |\uparrow\rangle)$

$m_s = -1/2 \quad (\to |\downarrow\rangle)$

m_s: Quantenzahl z-Komponente Spin

Formalismus: Matrizen

wähle $\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ (14.24, 25)

→ $\hat{s}_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle$ und $\hat{s}_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle$ wie verlangt (14.20)

allgemein: quantenmechanische Überlagerung $|\psi_s\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ (14.26)

Normierung: „Länge" oder Skalarprodukt definieren: (2 dim., diskreter Hilbertraum)

$$|s_1\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \qquad |s_2\rangle = \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad \to \quad \langle s_1|s_2\rangle = s_1^{\overset{\text{dagger}}{\dagger}} s_2 = (a_1^*, b_1^*)\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \qquad (14.27\text{-}29)$$
$$= a_1^* a_2 + b_1^* b_2$$

(wie in normaler linearen Algebra)

Es gilt:

$$\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0 \qquad \text{Orthogonalität} \qquad (14.32)$$

$$\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1 \qquad \text{Normierung} \qquad (14.30, 31)$$

ok, es fehlen x- und y- Richtungen (bis jetzt nur z)

man fordert wie üblich für Drehimpulse die kanonischen Vertauschungsregeln:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] \propto S_z \,, \quad [S_y, S_z] \propto S_x \,, \quad [S_z, S_x] \propto S_y$$

mit folgender Wahl ist das erfüllt:

$$\left.\begin{aligned} \hat{S}_x &= \sigma_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_y &= \sigma_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_z &= \sigma_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}\right\} \text{ \underline{Pauli} Matrizen} \qquad (14.33)$$

$$\hat{\vec{S}} = \vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T$$

Es gilt: $$\vec{\sigma}^2 = \sigma^T \sigma = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}\left\{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right\}$$

$$= \hbar^2 \frac{3}{4} \cdot \mathbb{1} \quad \left(= \hbar^2 s(s+1)\, \mathbb{1}\right) \qquad (14.34)$$

analog zu Bahndrehimpuls

d.h. für irgendein $|s\rangle$ gilt: $\hat{S}^2 |s\rangle = \hbar^2 \frac{3}{4} |s\rangle$