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

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

Experiment: 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:
$$\hat{S}_z|\psi_{m_s}\rangle = \hbar m_s|\psi_{m_s}\rangle \qquad (14.21)$$

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

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

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)

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

(wie in normaler linearen Algebra)

Es gilt: $\langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0$ Orthogonalität (14.32)

$\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1$ Normierung (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:

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

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

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

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

analog zu Bahndrehimpuls

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

14.2.2. Schrödinger-Gleichung des Spins im Magnetfeld

Ziel: formuliere Schrödingergleichung für Spin $H\psi = E\psi$ H: Energie (Operator)

↳ was ist Energie eines Spins im B-Feld?

Elektronenspin → magnetisches Moment

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \qquad (14.35) \quad \text{Bohrsches Magneton}$$

m_e: Masse Elektron

e: positive Elementarladung

μ_B ist Vektor, antiparallel zur Spin $\vec{\mu} = -\frac{e}{m_0}\vec{\sigma}$ (enthält $\hbar/2$) (14.36)

gilt auch für Kernspin: $\mu_B \to \mu_N$ oder μ_K ersetze $m_e \to m_p$, $-e \to e$

(μ_N: Nucleon, μ_K: Kern)

bedenke $\frac{m_e}{m_p} \approx 1800$