Chapter 6

Der Spin der Elektronen

Quantenmechanische Beschreibung

Die Existenz des Spins bedeutet, daß Elektronen, außer der Ortskoordinate $\vec{x}$, oder der Impulskoordinate $\vec{p}$, einen weiteren Freiheitsgrad besitzen: Spin nach öbenünd Spin nach ünten", jeweils bezüglich einer vorgegebenen Richtung (Quantisierungsachse, z.B. die x_3-Richtung). Und dieses obwohl Elektronen Punktteilchen sind.

Spinore

Man verdoppelt die Wellenfunktion $\psi(\vec{x},t)$ zu einem Spinor $\tilde{\psi}(\vec{x},t)$,

$$\psi(\vec{x},t) \rightarrow \quad \tilde{\psi}(\vec{x},t) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x},t) \\ \psi_-(\vec{x},t) \end{pmatrix}$$

wobei $\psi_+(\vec{x},t)$ ein Elektron mit Spin öbenünd $\psi_-(\vec{x},t)$ ein Elektron mit Spin ünten"beschreibt.

Pauli-Matrizen

Der Spin-Operator $\overrightarrow{\mathbf{S}}$ ist nach Anbschnitt ?? durch die Pauli-Matrizen σ_i gegeben,

$$\overrightarrow{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Bis auf den Faktor $\hbar/2$ folgen die Pauli Matrizen den Kommuationsrelationen von Drehimpulsoperatoren,

$$[\sigma_k, \sigma_l] = 2i\epsilon_{klm}\sigma_m, \quad \sigma_j^2 = 1, \quad j = 1,2,3$$

Basiswahl

Bezeichen wir mit $\tilde{\psi}_\pm$die Zustände mit Spin rauf/runter,

$$\tilde{\psi}_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\psi}_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

so gilt erwartungsgemäß:

$$\mathbf{S}_3\tilde{\psi}_+ = \frac{\hbar}{2}\left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_3\tilde{\psi}_- = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

Für festes $\vec{x}$ und t spannen $\tilde{\psi}_+$und $\tilde{\psi}_-$einen 2-dimionalen Vektorraum auf, dessen Elemente als Spinoren bezeichnet werden.

Wellenfunktionen

Ein allgemeines Element des Vektorraums hat komplexen Koeffizienten c_+und c_-, die orts- und zeitabhängig sind:

$$\tilde{\psi}(\vec{x},t) = c_+(\vec{x},t)\tilde{\psi}_+ + c_-(\vec{x},t)\tilde{\psi}_- = \begin{pmatrix}c_+(\vec{x},t)\\c_-(\vec{x},t)\end{pmatrix}$$

Die Entwicklungskoeffizienten $c_\pm(\vec{x},t)$ entsprechen also Wellenfunktionen $\psi_\pm(\vec{x},t)$, von denen es pro Elektron nun zwei gibt. Die Norm von $\tilde{\psi}(\vec{x},t)$ ist durch

$$(\tilde{\psi},\tilde{\psi}) = |c_+|^2 + |c_-|^2$$

gegeben. Wegen der physikalischen Interpretation muss $(\tilde{\psi},\tilde{\psi}) = 1$ sein. $|c_\pm|^2$ ist damit die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Elektron im Zustand ψ den Spin parallel/antiparallel zur x_3-Achse ausgerichtet hat, mit $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$.

Erwartungswerte

Im folgenden wird die Ortsabhängigkeit von $\tilde{\psi}$ ignoriert und zunächst nur Spineigenschaften betrachtet. Für die Erwartungswerte $\langle \mathbf{S}_j \rangle$ der Komponenten $\mathbf{S}_j$ im Zustand $\tilde{\psi}$ ergibt sich

$$< \mathbf{S}_1 >= \frac{\hbar}{2}\left(c_+^*, c_-^*\right)\left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array}\right)\begin{pmatrix}c_+\\c_-\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\left(c_+^* c_- + c_-^* c_+\right),$$

und analog

$$< \mathbf{S}_2 >= -\frac{i\hbar}{2}\left(c_+^* c_- - c_-^* c_+\right)$$
$$< \mathbf{S}_3 >= \frac{\hbar}{2}\left(|c_+|^2 - |c_-|^2\right)$$

Als Observable sind die Erwartungswerte reel.

Drehungen von Spins

Im Abschnitt ?? wurde gezeigt, daß Wellenfunktionen via

$$\psi(R\vec{x}) = e^{-i\vec{\mathbf{L}}\cdot\vec{\varphi}/\hbar}\psi(\vec{x})$$

gedreht werden. Dieses gilt für ganzzahligen Drehimpuls $j = 0, 1, 2\ldots$ Für $j = 1/2$ ist der Drehimpulsoperatoren $\vec{L}$ durch den Spin-Operator $\vec{S}$ zu ersetzen,

$$R\tilde{\psi} = e^{-i\vec{\mathbf{S}}\cdot\vec{\varphi}/\hbar}\tilde{\psi}$$

wobei $\tilde{\psi}$ ein Spinor ist.

Drehung um die z-Achse

Als Beispiel betrachten wir eine Drehung um die 3-Achse, d.h. $\vec{\varphi} = (0, 0, \varphi)$:

$$\begin{aligned} e^{-i\mathbf{S}_3\varphi/\hbar} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\varphi/2)^n}{n!} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^n \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-i\varphi/2)^{(2l)}}{(2l)!} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-i\varphi/2)^{(2l+1)}}{(2l+1)!} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \cos(\varphi/2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - i\sin(\varphi/2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Spin nach oben und unten erhalten also entgegengesetzte Phasen.

Bei einer Drehung um 2π erhalten Spinoren die Phase (-1).

Um einen Spin in den Ausgangszustand überzuführen bedarf es also einer Drehung um 4π.

Das magnetische Moment des Elektrons

Gyromagnetischer Faktor

Ein Elektron mit Spin ist ein rotierendes (geladenes) Teilchen. Aus der Elektrodynamik wissen wir, daß ein Ringstrom mit Drehimpuls $\vec{L} = \vec{S}$ ein magnetisches Moment der Grösse

$$\begin{aligned} \vec{\mu} &= -\frac{e_0 g}{2m_e}\vec{\mathbf{S}} && \text{mit} \\ g &\approx 2 && \text{(in guter Näherung)} \end{aligned}$$

erzeugt. Der g-Faktor heißt gyromagnetischer Faktor. Für klassische Ringströme gilt $g = 1$, siehe auch Abschnitt ??.

Elektron im Magnetfeld

In einem äußeren Feld $\vec{B}$ hat ein klassisches magnetisches Moment $\vec{\mu}$ die Energie $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$. Nach dem Korrespondenzprinzip führt dies zum Hamilton-Operator

$$\mathbf{H} = \frac{e_0 g\hbar}{4m_e}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}$$

Für einen zeitabhängigen Spinor $\tilde{\psi}(t) = \binom{c_+(\vec{x},t)}{c_-(\vec{x},t)}$ erhalten wir die zeithabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{d}{dt}\tilde{\psi}(t) = \frac{e_0 g\hbar}{4m_e}(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})\tilde{\psi}(t)$$

Lamor-Frequenz

Wir betrachten ein konstantes Magnetfeld $\vec{B} = (0,0,B_0)$ und lösen die SchrödingerGleichung mittels des Ansatzes $\tilde{\psi}(t) = e^{-i\omega t}\binom{c_+}{c_-}$, mit $c_\pm$ =const., also

$$\hbar\omega\begin{pmatrix}c_+\\ c_-\end{pmatrix} = \frac{eg\hbar B_0}{4m_e}\left(\begin{array}{cc}1 & 0\\ 0 & -1\end{array}\right)\begin{pmatrix}c_+\\ c_-\end{pmatrix}.$$

Die beiden Eigenfrequenzen $\omega_\pm$sind

$$\omega_+ = \frac{e_0 g B_0}{4m_e} \equiv \omega_L \quad \text{und} \quad \omega_- = -\omega_L$$

mit Eigenvektoren sind $(1,0)$ und $(0,1)$. Hier is ω_L die Lamor-Frequenz. [1] Für einen allgemeinen Anfangszustand $\tilde{\psi}(t=0) = (a,b)$ findet man daher

$$\tilde{\psi}(t) = \begin{pmatrix}ae^{-i\omega_L t}\\ be^{i\omega_L t}\end{pmatrix}, \quad \omega_L = \frac{e_0 g B}{4m_e}, \quad |a|^2+|b|^2 = 1$$

Präzession

Als Beispiel betrachten wir einen Anfangszustand, in welchem der Spin entlang der 1Achse ausgericht ist, also senkrecht zum angelegten Magnetfeld.

Als Erstes müssen wir den Eigenvektor (a,b) zu $\mathbf{S}_1$ (und zum Eigenwert $\hbar/2$) finden:

$$\frac{1}{2}\hbar\left(\begin{array}{cc}0 & 1\\ 1 & 0\end{array}\right)\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}.$$

Wir berechnen nun den Zeit-abhängigen Erwartungswert,

[1] Die hier definierte Larmor-Frequenze gilt für Spin-1/2. Klassisch benutzt man $qgB/(2m)$. Unter Einberechnung der g-Faktoren erhält man sehr ähnliche Werte.

$$
\begin{aligned}
\left(\tilde{\psi}(t), \mathbf{S}_1 \tilde{\psi}(t)\right) &=< \mathbf{S}_1 > (t) \\
&= \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\omega_L t}, e^{-i\omega_L t}\right) \left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right) \begin{pmatrix} e^{-i\omega_L t} \\ e^{i\omega_L t} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\
&= \frac{\hbar}{2} \cos 2\omega_L t
\end{aligned}
$$

Analog ergibt sich

$$
\begin{aligned}
< \mathbf{S}_1 > (t) &= \frac{\hbar}{2} \cos 2\omega_L t \\
< \mathbf{S}_2 > (t) &= \frac{\hbar}{2} \sin 2\omega_L t \\
< \mathbf{S}_3 > (t) &= 0
\end{aligned}
$$

d.h. der Spin "präzediert"mit der doppelten Lamor-Frequenz um die Richtung von $\vec{B}$.

Paramagnetische Resonanz

Der g-Faktor in der Beziehung

$$
\vec{\mu} = \frac{qg}{2m} \overrightarrow{\mathbf{S}}, \quad \overrightarrow{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}, \quad q: \text{ Ladung}
$$

ist im Festkörper keine universelle Konstante, sondern hängt von der chemischen Umgebung ab (via der Spin-Bahn Kopplung, siehe Abschnitt ??). Eine Methode die Größe des g-Faktors experimentell zu bestimmen ist die paramagnetische Resonanz.

RF-Felder

Analog zu der Induktion von atomaren Übergängen zwischen verschiedenen Niveaus durch Einstrahlen von Licht, kann man Übergänge zwischen den beiden Energieniveaus $\pm\hbar\omega_L = \hbar g|q|B_0/(4m)$ eines Spins in einem konstanten Magnetfeld B_0 induzieren. Dafür benötigt man ein zusätzlich oszillierendes Magnetfeld B, typischerweise im Radiofrequenz (RF) Bereich.

Es sei also

$$
\vec{B} = (B \cos \omega t, B \sin \omega t, B_0)
$$

Mit

$$
\vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \left(\begin{array}{cc} B_0, & B(\cos \omega t - i \sin \omega t) \\ B(\cos \omega t + i \sin \omega t), & -B_0 \end{array} \right)
$$

lautet die Schrödinger-Gleichung (mit $q = -e_0$)

$$i\hbar\frac{d\tilde{\psi}}{dt} = \frac{\hbar qg}{4m}\begin{pmatrix} B_0, & Be^{-i\omega t} \\ Be^{i\omega t}, & -B_0 \end{pmatrix}\tilde{\psi}(t)$$

Variation der Konstanten

Die Energie ist nicht erhalten, da $\mathbf{H} = \mathbf{H}(t) = \hbar\omega_g\vec{\sigma}\cdot\vec{B}(t)$ explizit von der Zeit abhängt, analog zu erzwungenen Schwingungen in der Mechanik.

Der Ansatz (Variation der Konstanten)

$$\tilde{\psi}(t) = \begin{pmatrix} a(t)e^{-i\omega_L t} \\ b(t)e^{i\omega_L t} \end{pmatrix}, \quad \frac{d\tilde{\psi}}{dt} = \begin{pmatrix} (\dot{a} - i\omega_L a)\, e^{-i\omega_L t} \\ \left(\dot{b} + i\omega_L b\right) e^{i\omega_L t} \end{pmatrix}$$

führt zu den Gleichungen

$$\begin{aligned} \dot{a} &= -i\omega_g e^{i(2\omega_L-\omega)t}b(t) \\ \dot{b} &= -i\omega_g e^{-i(2\omega_L-\omega)t}a(t) \\ \omega_g &= (ge_0B)\,/(4m) \end{aligned}$$

Differenzieren der 1. Gleichung nach t und Einsetzen der zweiten ergibt

$$\ddot{a} - i\,(2\omega_L - \omega)\,\dot{a} + \omega_g^2 a = 0$$

Der Ansatz $a(t) = Ae^{i\lambda t}$ führt zu einer quadratischen Gleichung für λ, mit den Lösungen

$$\lambda_{1,2} = \omega_L - \frac{1}{2}\omega \pm \sqrt{\left(\omega_L - \frac{1}{2}\omega\right)^2 + \omega_g^2}$$

Die Bewegung des Systems, d.h. des Spinors $\tilde{\psi}(t)$ wird also durch die äussere Frequenz ω moduliert.

Induzierte Übergänge

Wir preparieren das System zur Zeit $t = 0$ in den Spin-oben Zustand: $a(0) = 1$ und $b(0) = 0$, was auch $\dot{a}(0) = 0$ bedeutet. Für allg. Zeiten gilt

$$\begin{aligned} a(t) &= \left[\cos(\widehat{\omega}t) - i\frac{\omega_L - \omega/2}{\widehat{\omega}}\sin\widehat{\omega}t\right] e^{i(\omega_L-\omega/2)t} \\ b(t) &= -i\frac{\omega_g}{\widehat{\omega}}\sin\widehat{\omega}te^{-i(\omega_L-\omega/2)t} \\ \widehat{\omega} &= \sqrt{\left(\omega_L - \frac{1}{2}\omega\right)^2 + \omega_g^2} \end{aligned}$$

Ist T die Zeitspanne, während der das RF-Magnetfeld eingeschaltet ist, so ist am Ende dieser Zeitspanne der Bruchteil $|b(T)|^2$ der Spins ümgeklappt:

$$|b(T)|^2 = \frac{\omega_g^2}{\left(\omega_L - \frac{\omega}{2}\right)^2 + \omega_g^2} \sin^2\left(T\sqrt{\left(\omega_L - \frac{\omega}{2}\right)^2 + \omega_g^2}\right)$$

man hat mittels des RF-Feldes Übergänge zwischen den beiden Zeeman-Niveaus $\pm\omega_L$ erzeugt.

Resonanz

Resonanz liegt vor, falls die Frequenz des RF-Feldes $\omega = 2\omega_L$ ist, also genau der Energiedifferenz der beiden Energieniveaus entspricht. Bei Resonanz ist es möglich, alle Spins umzudrehen, $|b(T)| = 1$. Man wähle hierfür eine Einschaltzeit $T = \pi/\left(2\omega_g\right)$, da dann $\sin^2 = 1$ (π-Puls).

Die obige "paramagnetische"Resonanzmethode hat viele Anwendungen in der Atomund Kernphysik, der Festkörperphsik (NMR, μ SR) sowie auch in der Medizin.