# Kapitel 7

# Der Spin der Elektronen

## 7.1 Quantenmechanische Beschreibung

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

**Spinore**

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

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

wobei $\psi_+(\vec{x}, t)$ ein Elektron mit Spin "oben" und $\psi_-(\vec{x}, t)$ ein Elektron mit Spin "unten" beschreiben.

**Pauli-Matrizen**

Der Elektron Spin–Operator $\vec{\mathbf{S}}$ ist nach Kap. 5.2.3 durch diese Pauli-Matrizen $\sigma_i$ gegeben:

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{\mathbf{S}} &= \frac{\hbar}{2}\Big(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\Big) , \\ \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \\ \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \\ \sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \end{aligned}}$$

Die Matrizen $\sigma_j$ haben die Eigenschaften

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

**Basiswahl**

Bezeichen wir mit $\tilde{\psi}_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ den Zustand mit Spin-rauf und mit $\tilde{\psi}_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ den Zustand mit Spin-runter, so gilt erwartungsgemäß:

$$\mathbf{S}_3\,\tilde{\psi}_+ \;=\; \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \;=\; \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\;, \qquad \mathbf{S}_3\,\tilde{\psi}_- \;=\; -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\;.$$

Für festes $\vec{x}$ und $t$ spannen $\tilde{\psi}_+$ und $\tilde{\psi}_-$ einen 2–dim. Vektorraum auf, dessen Elemente als Spinoren bezeichnet werden. Ein allgemeines Element mit komplexen Koeffizienten $c_+$, $c_-$ läßt sich in der folgenden Art darstellen:

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

Die Entwicklungskoeffizienten $c_\pm(\vec{x},t)$ entsprechen also genau den $\psi_\pm(\vec{x},t)$, nur die Interpretation hat sich geändert.

Die Norm von $\tilde{\psi}(\vec{x},t)$ ist durch

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

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

**Erwartungswerte**

Im folgenden wird die Ortsabhängigkeit von $\tilde{\psi}$ ignoriert, und zunächst werden nur Spineigenschaften betrachtet. Für die Erwartungswerte $< \mathbf{S}_j >$ der Komponenten $\mathbf{S}_j$ im Zustand $\tilde{\psi}$ bekommt man

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

und analog:

$$\begin{aligned} < \mathbf{S}_2 > \;&=\; -\frac{i\hbar}{2}\Big(c_+^* c_- - c_-^* c_+\Big)\;, \\ < \mathbf{S}_3 > \;&=\; \frac{\hbar}{2}\Big(|c_+|^2 - |c_-|^2\Big)\;. \end{aligned}$$

Man bemerke, daß die Erwartungswerte real sind, da es sich um Observable handelt.

## 7.2 Drehungen von Spins

Im Kap. 5.1.3 haben wir bemerkt, daß Wellenfunktionen via

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

gedreht werden. Dieses gilt nur für ganzzahligen Drehimpuls $j = 0, 1, 2 \ldots$. In Kap. 5.2.3 hatten wir gesehen, daß für $j = 1/2$ die Drehimpulsoperatoren $\vec{L} = \vec{S}$ durch die entsprechenden Spin-Matrizen gegeben sind, für $j = 1/2$ gilt die analoge Formel

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

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

**Drehung um die z-Achse**

Wir wollen nun als Beispiel eine Drehung um die 3-Achse betrachten: $\vec{\varphi} = (0, 0, \varphi)$:

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

Spin nach oben und unten erhalten also entgegengesetzte Phasen und bei einer Drehung um $2\pi$ die Phase $(-1)$. Um eine Spin in den Ausgangszustand überzuführen bedarf es also einer Drehung um $4\pi$.

## 7.3 Das magnetische Moment des Elektrons

**Gyromganetischer 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

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{\mu} &= -\frac{e_0 g}{2m_e}\vec{\mathbf{S}} \quad , \\ \text{wobei } g &\approx 2 \quad , \quad \text{in guter Näherung;} \end{aligned}}$$

erzeugt. $g$ heißt *gyromagnetischer Faktor* = $g$–Faktor (klassisch hatten wir die obrige Formel mit $g = 1$ gefunden).

**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

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

und für einen zeitabhängigen Spinor $\tilde{\psi}(t) = \begin{pmatrix} c_+(\vec{x},t) \\ c_-(\vec{x},t) \end{pmatrix}$ erhalten wir die zeithabhängige Schrödinger–Gleichung

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt}\tilde{\psi}(t) \;=\; \frac{e_0 g\hbar}{4m_e}\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\right)\tilde{\psi}(t)\,.}$$

**Lamor-Frequenz**

Wir betrachten ein konstantes Magnetfeld $\vec{B} = (0,0,B_0)$ und lösen die Schrödinger-Gleichung mittels des Ansatzes $\tilde{\psi}(t) = e^{-i\omega t}\begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$, $c_\pm = \text{const.}$:

$$\hbar\omega \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \;=\; \frac{eg\hbar B_0}{4m_e}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}\,.$$

Die beiden Eigenfrequenzen $\omega_\pm$ sind

$$\boxed{\omega_+ \;=\; \frac{e_0 g B_0}{4m_e} \;\equiv\; \omega_L \qquad \text{und} \qquad \omega_- = -\omega_L\,.}$$

Die zugehörigen Eigenvektoren sind $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. $\omega_L$ nennt man die *Lamor-Frequenz.*

Für einen allgemeinen Anfangszustand $\tilde{\psi}(t=0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ findet man also die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung:

$$\boxed{\tilde{\psi}(t) \;=\; \begin{pmatrix} a\,e^{-i\omega_L t} \\ b\,e^{i\omega_L t} \end{pmatrix}, \qquad \omega_L = \frac{e_0 g B}{4m_e}}\,, \qquad |a|^2 + |b|^2 = 1\,.$$

**Präzession**

Als Beispiel betrachten wir einen Anfangszustand, in welchem der Spin entlang der 1-Achse ausgericht ist, also wenn $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ Eigenvektor zu $\mathbf{S}_1$ zum Eigenwert $\frac{1}{2}\hbar$ ist:

$$\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \;=\; \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}\,.$$

Wir berechnen nun den Erwartungswert:

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

$$\boxed{\begin{array}{rrcl} & <\mathbf{S}_1>(t) & = & \frac{\hbar}{2}\cos 2\omega_L t \ , \\ \text{analog} & <\mathbf{S}_2>(t) & = & \frac{\hbar}{2}\sin 2\omega_L t \ , \\ & <\mathbf{S}_3>(t) & = & 0 \end{array}}$$

d. h. der Spin präzediertmit der doppelten Lamor–Frequenz um die Richtung von $\vec{B}$!

## 7.4 Paramagnetische Resonanz

Der $g$-Faktor in der Beziehung

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

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

**RF-Felder**

Analog zu dem Induzieren von Übergängen zwischen verschiedenen Niveaus bei Atomen durch Einstrahlen von Licht, kann man Übergänge zwischen den beiden Energieniveaus $\pm\omega_L = g|q|B_0/(4m)$ eines Spins in einem konstanten Magnetfeld $B_0$ induzieren, indem man zusätzlich ein oszillierendes (RF-Radiofrequenz) Magnetfeld $B$ überlagert.

Es sei also

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

Mit

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{B} \;=\; \begin{pmatrix} B_0\,, & B\Big(\cos\omega t - i\sin\omega t\Big) \\ B\Big(\cos\omega t + i\sin\omega t\Big)\,, & -B_0 \end{pmatrix}$$

lautet die Schrödinger–Gleichung (für $q = -e_0$)

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

**Variation der Konstanten**

Da $\mathbf{H} = \mathbf{H}(t) = \hbar\omega_g\vec{\sigma}\cdot\vec{B}(t)$ jetzt explizit von der Zeit abhängt, kann keine Erhaltung der Energie für das System mehr gelten, analog zu den erzwungenen Schwingungen in der Mechanik.

Der Ansatz (*Variation der Konstanten*)

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

führt zu den Gleichungen

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

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

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

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

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

**Induzierte Übergänge**

Hat man zur Zeit $t = 0$: $a(0) = 1$ und $b(0) = 0$ (äquivalent zu $\dot{a}(0) = 0$), d.h. alle Spins zeigen nach "oben", so erhält man zu späteren Zeiten:

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

Ist $T$ die Zeit, die das RF-Magnetfeld eingeschaltet ist, so ist am Ende der Bruchteil $|b(T)|^2$ der Spins "umgeklappt":

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

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 $T = \pi/(2\omega_g)$, da dann $\sin^2 = 1$ ($\pi$-Puls).

Die obige paramagnetischeResonanzmethode hat viele Anwendungen in der Atom– und Kernphysik, der Festkörperphsik (NMR, $\mu$SR) sowie auch in der Medizin.