# Quantenmechanische Behandlung

Spin-Hamiltonian für $e^-$ : $\hat{\mathcal{H}}_S = \mathcal{H}^S_{zeemann} = -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B}$

$$= -g_e \beta_e \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B} = g_e \mu_B \cdot \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B}$$

$\mu_B = |\beta_e|$

$\vec{B} = (0, 0, B_0)$
in z-Richtung

$$= g_e \mu_B \cdot \hat{S}_z \cdot B_0$$

$\hat{S}_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ Pauli-Spin-Matrix

$$\boxed{\hat{\mathcal{H}}_S = \frac{g_e \mu_B B_0}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}$$

zwei Eigenfunktionen für $S = 1/2$ : $m_S = +1/2$ , $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

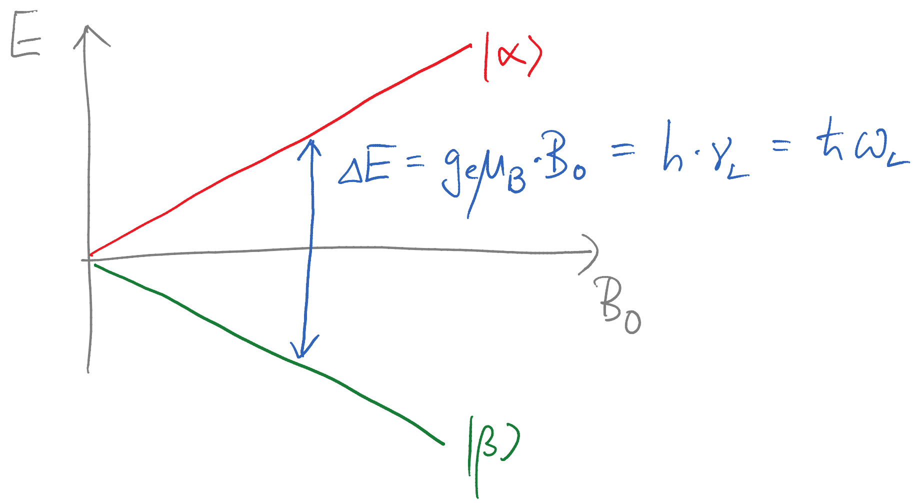
$m_S = -1/2$ , $|\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

sind EF zum $\hat{\mathcal{H}}^S_{zeemann}$-Operator :

$$\frac{g_e \mu_B B_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = E_\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

genauso für $|\beta\rangle$

$$\rightarrow \quad E_{\alpha/\beta} = E_{m_S} = m_S \cdot g_e \mu_B \cdot B_0$$




$\nu_L$ : Larmorfrequenz

| $B_0$ | $\nu_L$ | |
|---|---|---|
| 1G | 3 MHz | RF |
| 0.1T | 3 GHz | MW |
| 10 T | 300 GHz | |
| 100 T | 3 THz | far-IR |

Erweiterung auf $1 e^-$ $(S = 1/2)$ $1\,H$ $(I = 1/2)$

$$\hat{\mathcal{H}}_S = \hat{\mathcal{H}}^S_{Zeeman} + \mathcal{H}^I_{Zeeman} + \mathcal{H}^{SI}_{hyperfein}$$

$$= g_e \beta_e B_0 (\hat{S}_z \otimes \hat{\mathbb{1}}) + \hbar \gamma_I B_0 (\hat{\mathbb{1}} \otimes \hat{I}_z) + ha \cdot \hat{S}_z \otimes \hat{I}_z$$

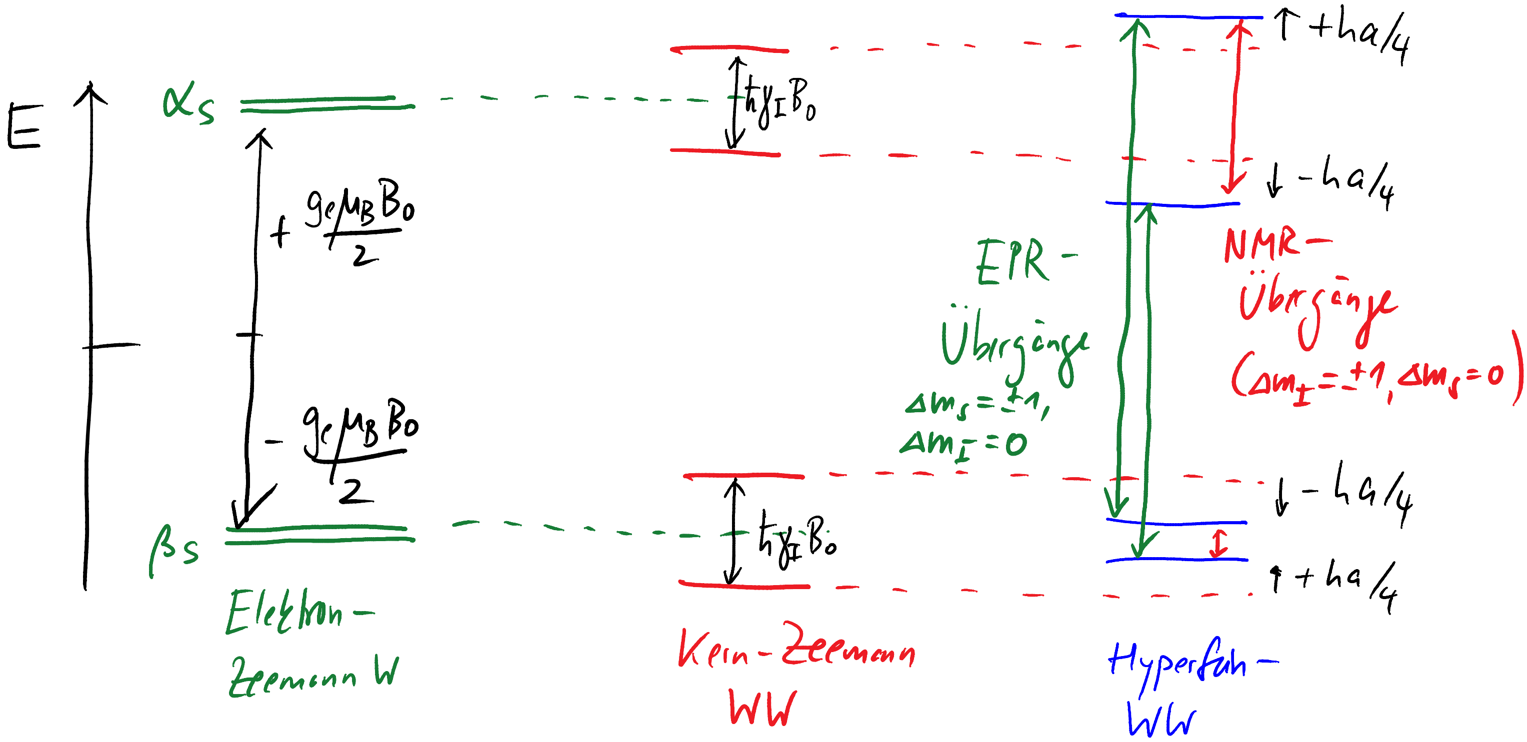
$$\hat{\mathbb{1}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \hat{I}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{A} \otimes \hat{B} = \begin{pmatrix} A_{11} B & A_{12} B \\ A_{21} B & A_{22} B \end{pmatrix}_{4 \times 4}$$

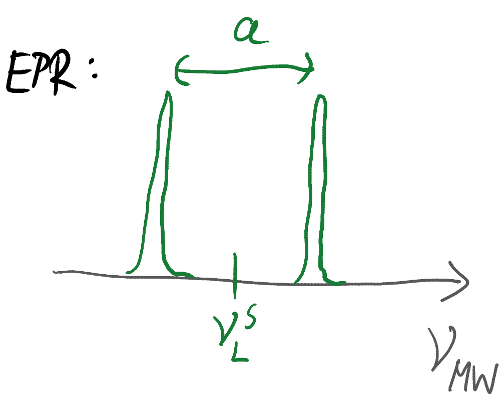
Eigenfunktionen : $\alpha_S \alpha_I$, $\alpha_S \beta_I$, $\beta_S \alpha_I$, $\beta_S \beta_I$

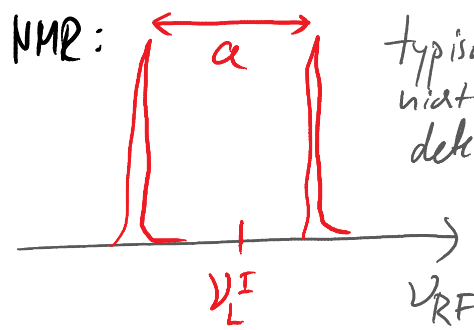
$$\hat{\mathcal{H}}_S = \frac{g_e \beta_e B_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar \gamma_I B_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} + \frac{ha}{4} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

Hamilton-Operator ist in der Basis der Spin-Produktfunktionen diagonal

→ EW können direkt abgelesen werden



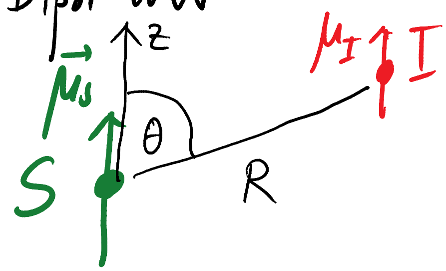




typischerweise nicht detektierbar!

für $B_0 = 0.3\,T$ $\quad \nu_L^S \approx 9\,GHz$, $\nu_L^I(^1H) \approx 14\,MHz$, $a \approx 10-100\,MHz$ (kleine Störung für e-Spin)

# Physikalische Ursache der HF-WW:

a) magn. Dipol-Dipol WW




$$\hat{\mathcal{H}}_{DD} \sim \frac{1}{R^3}(3\cos^2\theta - 1)$$

für Flüssigkeiten mit $e^-$ und $^1H$ am gleichen Molekül

$R = \text{const}$, $\theta = \text{variabel}$

$$0 \overset{!}{=} \int_0^{\pi}\int_0^{1}(3\cos^2\theta - 1)\, d\cos\theta\, d\varphi$$

kein Beitrag!

b) Fermi-Kontakt WW

$$\boxed{a = \frac{8\pi}{3} \cdot \mu_S \cdot \mu_I \cdot \underbrace{|\psi_e(I)|^2}_{\text{Aufenthalts-Wahrscheinlichkeit von } e^- \text{ am Kern}}}$$

# Nützliche Rechenregeln für Spin-Operatoren

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+ = S_x + iS_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_- = S_x - iS_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hat{S}_z$$

$$\hat{S}^2 \chi_{s,m_s} = s(s+1)\,\chi_{s,m_s}$$

$$\hat{S}_z \chi_{s,m_s} = m_s \cdot \chi_{s,m_s}$$

$$\hat{S}_+ \chi_{s,m_s} = \sqrt{(s-m_s)(s+m_s+1)}\;\chi_{s,m_s+1}$$

$$\hat{S}_- \chi_{s,m_s} = \sqrt{(s+m_s)(s-m_s+1)}\;\chi_{s,m_s-1}$$

Mit diesen Regeln lassen sich auch die Spinmatrizen für $S > 1/2$ konstruieren