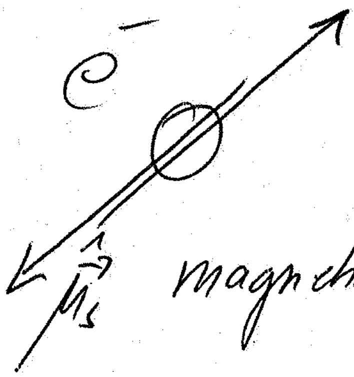
Magnetische WW e^- mit Magnetfeld B_0



$\hat{\vec{S}}$ Spin-Operator $\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$

$\hat{\vec{\mu}}_s$ magnetisches Moment von e^-

$$\boxed{\hat{\vec{\mu}}_S = \hbar \gamma_e \hat{\vec{S}}}$$

γ_e: gyromagnetisches Verhältnis $= -1.761 \cdot 10^7 \frac{\mathrm{rad}}{\mathrm{s\,G}}$

$$\gamma_e = \frac{g_e(-e)}{2 m_e} = -g_e \frac{\mu_B}{\hbar}$$

mit $g_e = 2.002322$ freies e^- g-Wert

$m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}$ kg

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2 m_e} = 9.274 \cdot 10^{-24}\,\mathrm{Am}^2$ Bohr-Magneton

$\hat{\vec{\mu}}_s = -g_e \mu_B \cdot \hat{\vec{S}}$ magn. Moment vom Spin

$\hat{\vec{\mu}}_L = \mu_B \cdot \hat{\vec{L}}$ magn. Moment vom Bahnmoment (für H-Atom 1s) für Spin des e^- gilt:

$$S = 1/2 \qquad m_S = \pm 1/2 \qquad \text{zwei Eigenzustände}$$

$$|\chi_{+1/2}\rangle \equiv |\alpha\rangle$$
$$|\chi_{-1/2}\rangle \equiv |\beta\rangle$$

$$|\chi\rangle = c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle = \begin{pmatrix} c_\alpha \\ c_\beta \end{pmatrix}$$

Es gilt:

Gesamtbetrag: $\hat{S}^2 |\chi\rangle = S(S+1) |\chi\rangle = \frac{3}{4} |\chi\rangle$

z-Komponente: $\hat{S}_z |\chi\rangle = m_S |\chi\rangle = \pm \frac{1}{2} |\chi\rangle$

$\langle \hat{S}_x \rangle$ ~~und~~ kann nicht gleichzeitig mit $\langle \hat{S}_y \rangle$ $\langle \hat{S}_z \rangle$ bestimmt werden!

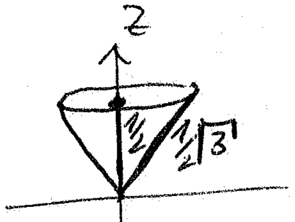


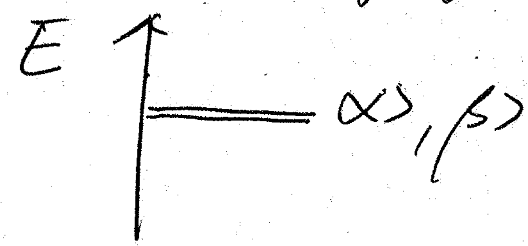
Bild zur "Visualisierung" dieses Sachverhalts

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i \hat{S}_z$$
$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$
$$[\hat{S}_z, \hat{S}^2] = 0 \quad \checkmark$$

Aus diesen "Rechenregeln" folgt eine Darstellung der Operatoren $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z \equiv$ Pauli'schen Spinmatrizen

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

ohne äußeres Magnetfeld



E-Entartet
gleiche Besetzung beider Niveaus
keine makroskopische Magnetisierung

mit äußerem Magnetfeld $\vec{B}_0 = (0, 0, B_0)$ in z-Richtung

$$E = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_0 \quad \text{"klassisch"}$$

$$\hat{\mathcal{H}} = -\hat{\vec{\mu}}_s \cdot \vec{B}_0 \quad \text{"qm"}$$

$$= -\hat{\mu}_z \cdot B_0 \quad (\text{da } B_0 \text{ in z-Richtung})$$

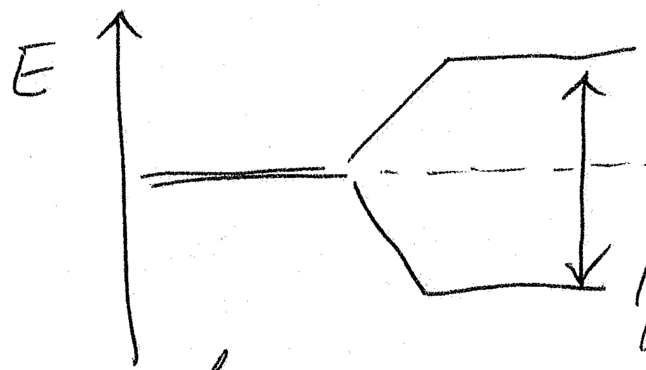
$$\hat{\mu}_z = \hbar\gamma_e \hat{S}_z = \frac{\hbar\gamma_e}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$\boxed{\hat{\mathcal{H}}_{Zeemann} = -\frac{\hbar\gamma_e B_0}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}}$$

EF sind die beiden Spinfunktionen |α> und |β>

$$-\frac{\hbar\gamma_e B_0}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} = \underbrace{-\frac{\hbar\gamma_e B_0}{2}}_{E_\alpha\ (m_s = +1/2)}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} \quad ✓$$

$$-\frac{\hbar\gamma_e B_0}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} = \underbrace{+\frac{\hbar\gamma_e B_0}{2}}_{E_\beta\,(m_s=-1/2)}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$$ ✓



$|\alpha\rangle \quad -\frac{\hbar\gamma_e B_0}{2} = \frac{g_e\mu_B B_0}{2} \quad (\gamma_e < 0)$

$|\beta\rangle \quad +\frac{\hbar\gamma_e B_0}{2} = -\frac{g_e\mu_B B_0}{2}$

ohne Magnetfeld

$$\boxed{E_{m_s} = g_e\mu_B\, m_s \cdot B_0}$$

$$\Delta E = g_e\mu_B B_0$$

Absorption von em-Welle wenn: $\omega_{em} = \frac{\Delta E}{\hbar}$

$$\hbar\omega_{em} = \Delta E = g_e\mu_B B_0$$

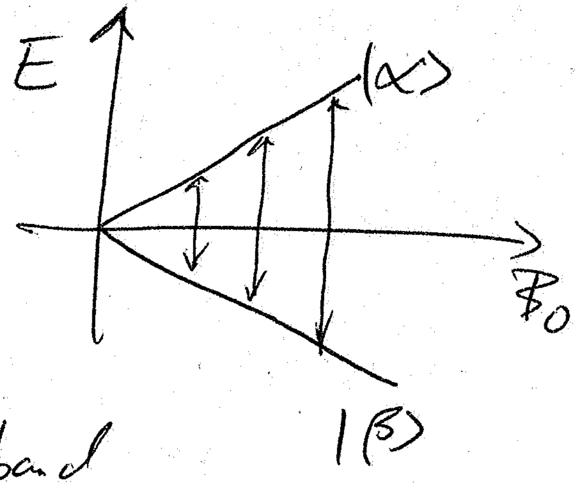
$$\boxed{\omega_{em} = \frac{g_e\mu_B}{\hbar}B_0 = |\gamma_e| B_0}$$

<u>Larmor-Frequenz</u>

Zeemann-Aufspaltung im Magnetfeld

Typische Werte:

B_0 [~~...~~]	ν_L	
1 G	2.8 MHz	
3300 G $\hat{=}$ 0.33 T	9.2 GHz	X-band
1.2 T	34 GHz	Q-band
9.2 T	260 GHz	J-Band

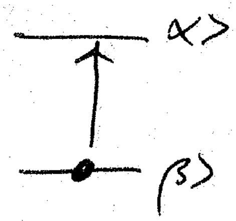


Praktisch sind auch die Operatoren

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

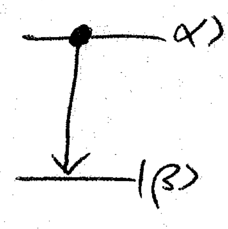
$$S_- = \hat{S}_x - i S_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+ |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}_{|\beta\rangle} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{|\alpha\rangle}$$



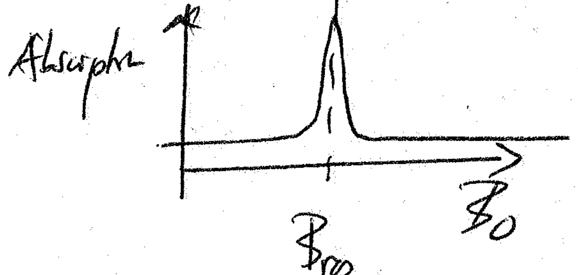
"Aufsteige-Operator"
Absorption von MW-Quant

$$\hat{S}_- |\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{|\alpha\rangle} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}_{|\beta\rangle}$$



"Absteige Operator"
Emission (stim. oder spontan)

Praktisch: Feste ν_{MW}, variabler B_0

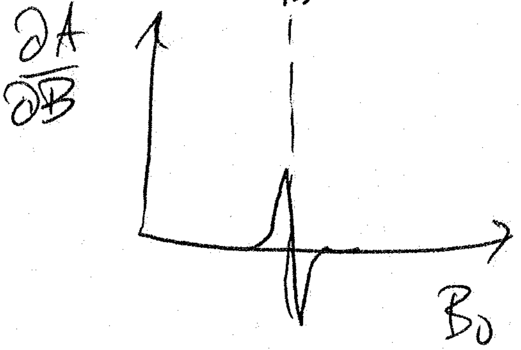


$$\boxed{g_e = \frac{\cancel{h}\, h\nu_{MW}}{\cancel{g}\, \mu_B \cdot B_0}}$$

Bestimmung von g-Faktor

Charakteristisch für Molekül

Abweichung vom freien e^- Wert kommt durch Zumischung von Bahnmoment $\vec{L}$ (Gett)



- Das wäre nur 1 Linie ~~p~~ von param. Molekül ($S = \frac{1}{2}$)

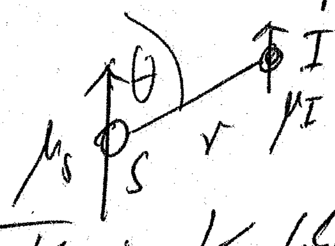
Zusätzlich: Hyperfein-Kopplung zu magn. Momenten von Kernen

(^1H, ^2H, ^{13}C, ^{19}F, $^{15/14}N$, ^{29}Si, ^{31}P ...)

$\vec{\mu}_I$ sind $\leq 10^{-3}$ von $\vec{\mu}_S$

(kleine "Störung" der E-Niveaus von e^-)

Zwei Beiträge a) "Klassische" Dipol-Dipol WW



WW-Energie abhängig von r und θ

b) Fermi-Kontakt WW

Aufenthaltswahrscheinlichkeit von e^- im Kern