3.6 Spin und orbitale Freiheitsgrade

relevant für Spinelektronik (Spintronic)

ohne Spin-Bahn-Kopplung

$H = H^{(r)} + H^{(s)}$ $\quad$ $H^{(r)}$ wirkt nur auf orbitale Freiheitsgrade

$$H^{(r)} \varphi_i(r) = E_i^{(r)} \varphi_i(r)$$

$H^{(s)}$ wirkt nur auf Spin

$$H^{(s)} = -\gamma \vec{B} \vec{S}$$

$S_z |\sigma\rangle = \frac{\hbar}{2} \sigma |\sigma\rangle$ $\quad$ also z.B. Spin $\frac{1}{2}$ $\quad m = \pm \frac{1}{2} \hat{=} \sigma = \pm$

Hilbertraum ist Tensorproduktraum

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(r)} \otimes \mathcal{H}^{(s)}$$

mit Basis $|\varphi_{i\sigma}\rangle = |\varphi_i\rangle \otimes |\sigma\rangle$

Darstellung im Ort und Spinraum:

allg. Zustand:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle \qquad (\text{Ort})$$

$$|\chi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle \qquad (\text{Spin})$$

$$\left.\begin{aligned} \langle r+|\psi,\chi\rangle &= \psi(r)\,\alpha \\ \langle r-|\psi,\chi\rangle &= \psi(r)\,\beta \end{aligned}\right\} \text{als Vektor}$$

$$[\psi] = \begin{pmatrix} \psi^+ \\ \psi^- \end{pmatrix} = \psi(r) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

für $|\psi\rangle \otimes |\chi\rangle$

Es sind auch Spin- und Orbitalverschränkte Zustände möglich

z.B. $\varphi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \varphi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Diese Produktzustände sind auch Eigenzustände zu $H^r + H^s$

mit Spin - Bahn - WW

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) + \gamma \underbrace{\vec{L}}_{\text{Bahndrehimpuls}} \cdot \overbrace{\vec{S}}^{\text{Spin}} = H^{(r)} + H_1$$

L_x, L_y, L_z

$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$

Eigenzustände sind nicht mehr einfach Produktzustände.

Was sind dann Eigenzustände?

$|\psi\rangle = |\rho\rangle \otimes |\sigma\rangle$ bilden weiterhin eine vollst. Basis.

$$H_1 = \gamma \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{\gamma \hbar}{2} \begin{pmatrix} L_z & L_x - i L_y \\ L_x + i L_y & -L_z \end{pmatrix}$$

Eigenzustände

$$[\psi](r) = \begin{pmatrix} \psi^+(r) \\ \psi^-(r) \end{pmatrix}$$ ← "**Spinor**"

faktorisieren i. A. nicht mehr (⇒ neu berechnen)

Betrachte außer $\langle\psi|\psi\rangle^2 \propto$ Ladungsdichte auch die "Spindichte"

$$\langle[\psi]|\sigma_z|[\psi]\rangle = |\psi^+(r)|^2 - |\psi^-(r)|^2$$

lokale Spin-Ausrichtung

analog $\langle\sigma_x\rangle$ und $\langle\sigma_y\rangle$ (nur mit Mischtermen)

aber das ist doch zu schwer :)

Einfaches Beispiel

$$H = \frac{p^2}{2m} + \alpha \vec{S} \cdot \vec{p}$$

freie Teilchen, kein Potential

also $[H, \vec{p}] = 0 \Rightarrow |p_x, p_y, p_z\rangle$ bleiben Eigenfkt.

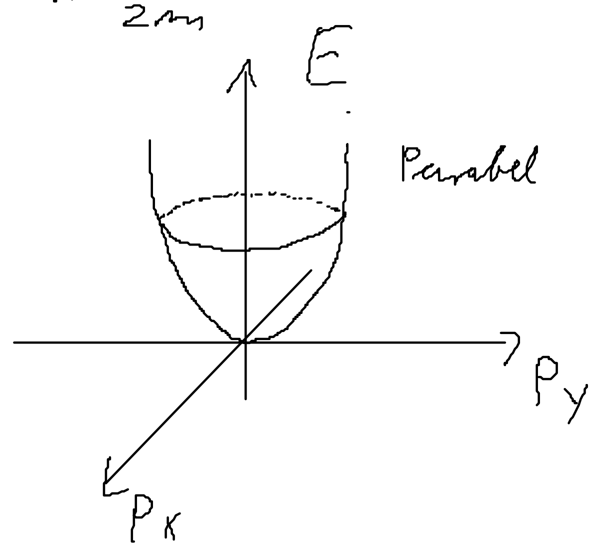
$\Rightarrow \quad \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \propto e^{i \vec{p} \vec{r}}$ (Ebene Wellen)

aber $[S_z, H] \neq 0$ d. h. $|\sigma\rangle_z$ mit $S_z |\sigma_z\rangle = \frac{\hbar}{2} \sigma |\sigma\rangle_z$

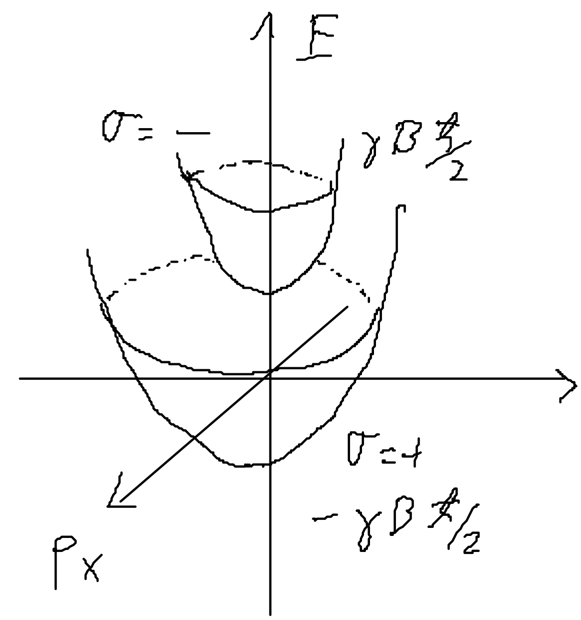
sind **keine** Eigenzustände

Bild für 2 dim.

$H = \frac{p^2}{2m}$



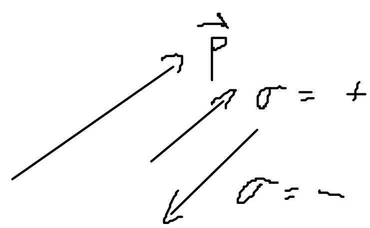
$H = \frac{p^2}{2m} - \gamma B S_z$



feste Quantisierungsachse für Spin $\parallel \vec{B}$

es gibt eine einfache Lösung

wähle für jeden orbitalen Zustand mit $\vec{p}$ die Spin-Quantisierungsachse parallel zu $\vec{p}$



Eigenzustände

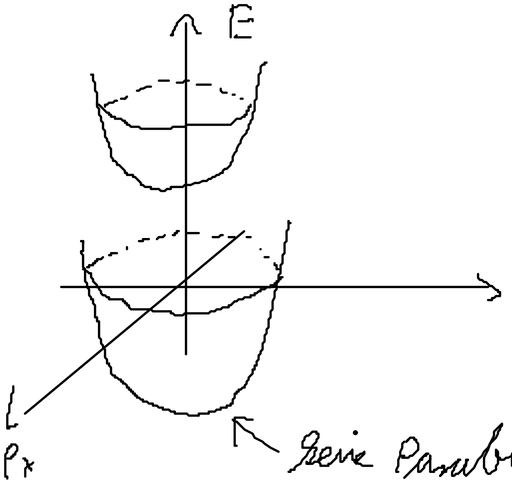
$|\vec{p}\rangle \otimes |\sigma\rangle_{\vec{p}}$

(Quantisierungsachse $\uparrow\uparrow$ oder $\downarrow\uparrow$ zu $\vec{p}$)

$\uparrow\uparrow$ oder $\uparrow\downarrow$ zu $\vec{p}$

Energien sind $E = \frac{p^2}{2m} + \sigma \alpha \frac{\hbar}{2} p \quad , \sigma = \pm$

$(p = |\vec{p}|)$



keine Parabel
sondern Gerade hier (?)

Rashba – Spin-Bahn-Kopplung

$E(p, \pm)$ aufzeichnen

siehe Übungsaufgabe

$\Downarrow$

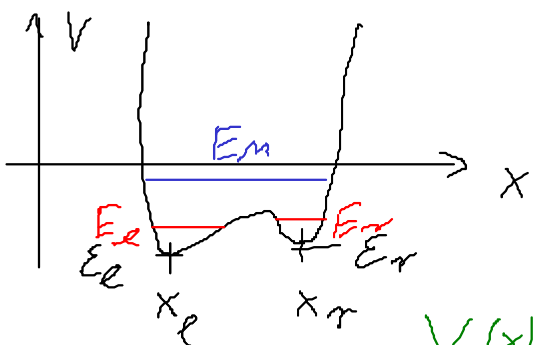
Ermöglicht ein Prinzip Transistor für Spin-Strom

3.7 Allgemeine Quantenmechanik

2-Zustands-Systeme

(siehe CT – Ammoniak)

Beispiel hier: Doppelmuldenpotential



so, dass das Potential durch Parabeln angenähert werden kann

$$V(x) \approx \begin{cases} V_l(x) = \varepsilon_l + \frac{m\omega^2}{2}(x - x_l)^2 \\ V_r(x) = \varepsilon_r + \frac{m\omega^2}{2}(x - x_r)^2 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad H = \frac{p^2}{2m} + V$$

Abh. von Parametern (m genügend klein) kann die gewünschte Situation realisiert werden:

Grundzustände: $E_r \approx \varepsilon_r + \frac{\hbar\omega}{2}$

$E_l \approx \varepsilon_l + \frac{\hbar\omega}{2}$

1. Angeregter Zustand

$E_M \gg E_l, E_r$

$|\psi_{l/r}\rangle \sim$ harm. Oszillator, also

$\sim \psi_0(x - x_{l/r})$

$|\varphi_M\rangle \sim 4$

Betrachte nur $E \approx E_e, E_r$

dann bilden $\varphi_e(x)$ und $\varphi_r(x)$ eine ausreichend gute Approximation einer Basis

$$\Rightarrow \quad H = \begin{pmatrix} H_{ee} & H_{er} \\ H_{re} & H_{rr} \end{pmatrix}$$

$$H_{ee} = \int \varphi_e^*(x) \left[\frac{p^2}{2m} + \underbrace{V(x)}_{\approx V_e(x)} \right] \varphi_e(x)$$

H_{rr} analog

was ist mit H_{re} und H_{er} ?

Überlappmatrixelement

$$H_{er} = \int \varphi_e^*(x) \left[\frac{p^2}{2m} + V(x) \right] \varphi_r(x)\, dx \quad =: -A$$

Hängt von Details ab: Überlapp der Wellenfkt. und $V(x)$ zwischen x_e und x_r ab

A kann i. A. komplex sein   Hier ist A reell

$$\Rightarrow \quad H = \begin{pmatrix} E_e & -A \\ -A & E_e \end{pmatrix}$$

Hoppler, ein Spin-Problem

diagonalisieren $\longrightarrow$ $H = \begin{pmatrix} E_- & 0 \\ 0 & E_+ \end{pmatrix}$

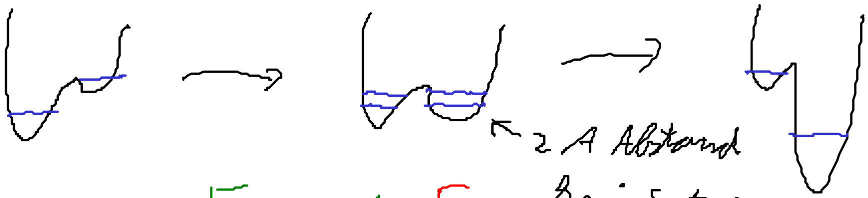
$$E_\pm = \frac{1}{2}(E_e + E_r) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_e - E_r)^2 + 4A^2}$$

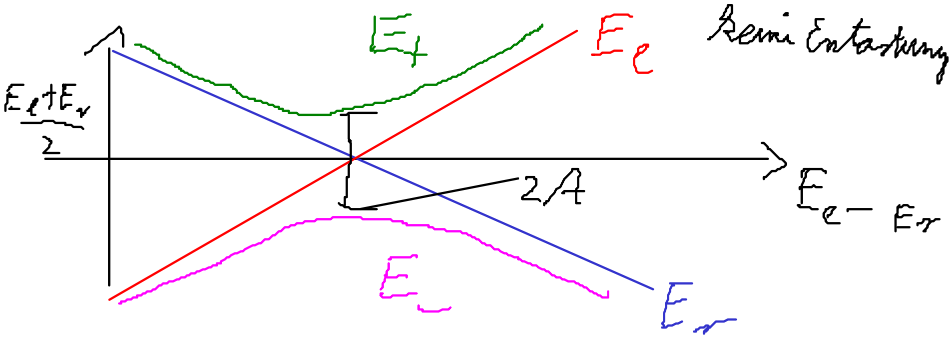
$$|\psi_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\,|\varphi_e\rangle - \sin\frac{\theta}{2}\,|\varphi_r\rangle$$

$$|\psi_-\rangle = \sin\frac{\theta}{2}\,|\varphi_e\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\,|\varphi_r\rangle$$

$$\tan\theta = \frac{2A}{E_e - E_r}$$

In manchen Fällen kann $E_e - E_r$ variiert werden





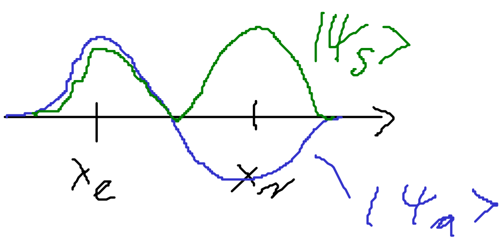
Überlappmatrixelement

avoided level crossing wenn $A \neq 0$

Am Symmetriepunkt $E_e = E_r$ ist $\theta = \frac{\pi}{2}$

$$\Rightarrow \quad |\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_e\rangle - |\varphi_r\rangle\right) = |\psi_a\rangle$$

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_e\rangle + |\varphi_r\rangle\right) = |\psi_s\rangle$$



Grundzustand ist symmetrisch

konsistent mit "Knotenregel"

$\Leftrightarrow \quad H_{er} = -A$

Zeitabh. kohärente Oszill.

$t=0 \quad |\psi(0)\rangle = |\varphi_e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle\right)$

$$\Rightarrow \quad |\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\exp\left(-\frac{iAt}{\hbar}\right)|\psi_+\rangle + \exp\left(\frac{iAt}{\hbar}\right)|\psi_-\rangle\right)$$

Welches links oder rechts?

$$P_e = |\langle \varphi_e | \psi_e(t)\rangle|^2 = \cos\left(\frac{At}{\hbar}\right)$$

Oszillation zwischen e und r $\hat{=}$ Drehung um x-Achse beim Spin