3.6 Spin und orbitale Freiheitsgrade

relevant für Spinelektronik = Spintronics

Ohne Spin-Bahn Kopplung

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

Hilbertraum ist | $H^{(r)} \varphi_i(r) = E_i^{(r)} \varphi_i(r)$ (Ortsraum)

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

$\boxed{\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(r)} \otimes \mathcal{H}^{(s)}}$ | z.B. $H^{(s)} = -\gamma \vec{B} \cdot \vec{S}$ (Spinraum)

Basis in $\mathcal{H}$: $|\varphi_i\rangle \otimes |\sigma\rangle = |\varphi_i, \sigma\rangle$ | $S_z |\sigma\rangle = \frac{\hbar}{2} \sigma |\sigma\rangle \quad m = \pm\frac{1}{2} \quad \sigma = \pm$

Darstellung im Orts und Spinraum

allgem. Zustand: $|\psi\rangle = \sum_i c_i \varphi_i \qquad |\chi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle$

$|\psi, \chi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\chi\rangle \qquad [\psi] = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \psi(r) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$

$\Rightarrow \langle r + | \psi, \chi\rangle = \psi(r)\alpha$ **Eigenzustände** von $H^{(r)} + H^{(s)}$ sind

$\langle r - | \psi, \chi\rangle = \psi(r)\beta$ Produktzustände aber

es sind auch Spin-Orbital-Verschränkte Zustände möglich

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

Mit Spin Bahnwechselwirkung

$\boxed{H = \frac{p^2}{2m} + V(r) + J \vec{L} \cdot \vec{S}}$ Bahndrehimpuls L_x, L_y, L_z mit $L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \varphi}$

Eigenzustände sind nicht mehr Produktzustände

aber $|\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\sigma\rangle$ bilden eine Basis in $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(r)} \otimes \mathcal{H}^{(s)}$

$\boxed{H = H^{(r)} + H_1}$ mit $H_1 = J \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{J\hbar}{2}\begin{pmatrix} L_z & L_x - iL_y \\ L_x + iL_y & -L_z \end{pmatrix}$

Eigenzustände

$[\psi](r) = \begin{pmatrix} \psi_+(r) \\ \psi_-(r) \end{pmatrix}$ faktorisieren i. Allg. nicht mehr

Betrachte außer $\langle\psi|\psi\rangle^2 \propto$ Ladungsdichte auch „Spintextur"

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

analog $\langle\sigma_x\rangle(r)$ und $\langle\sigma_y\rangle(r)$

Einfaches Beispiel $H = \frac{p^2}{2m} + \alpha \vec{S} \cdot \vec{p}$ freie Teilchen ohne Potential

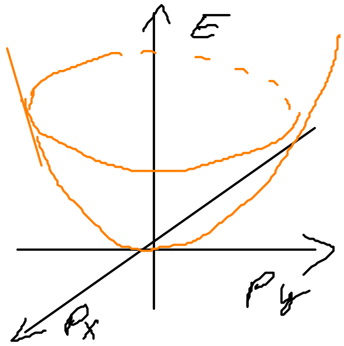
$[H, \vec{p}] = 0 \Rightarrow |p_x, p_y, p_z\rangle$ bleiben Eigenzustände $\langle \vec{r} | \vec{p}\rangle \propto e^{i\vec{p}\vec{r}}$

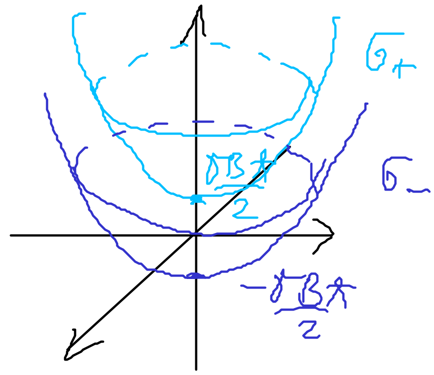
aber $[S_z, H] \neq 0$ d.h. $|\sigma\rangle_z$ mit $S_z|\sigma\rangle_z = \frac{\hbar}{2}\sigma|\sigma\rangle_z$ sind keine Eigenzustände.

Bild für 2-dim

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

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





Aber es gibt eine einfache Lösung:

Wähle für jeden orbitalen Zustand mit $\vec p$ die Spin-Quantisierungsachse parallel zu $\vec p$

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

Energien: $E = \frac{p^2}{2m} + \sigma\alpha\frac{\hbar}{2}p \qquad \sigma = \pm$

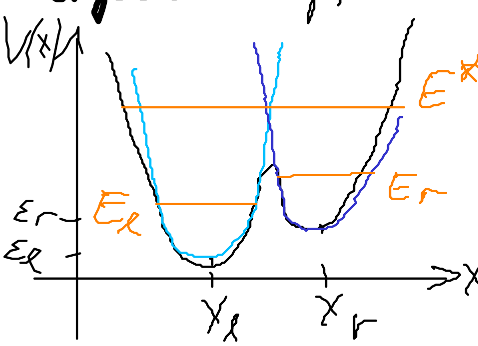
$E(p,\pm)$ aufzeichnen, siehe Übungsblatt (Rashba Spin-Bahn-Kopplung)

R-Sp-B.-Koppl. ermöglicht z.B. (im Prinzip) Transistor für Spin-Strom

3.7 QM. Zwei-Zustandssysteme

siehe C-T Ammoniak Molekül

Beispiel: Doppelmuldenpotential $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$



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

Abhängig von Parametern (m genügend klein) kann die gewünschte Situation realisiert werden

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

$E_r \simeq \varepsilon_r + \frac{\hbar\omega}{2}$

$E^* \gg E_l, E_r$

Zustände: Grundzustand $\psi_l(x) \approx \psi_0(x - x_l)$

$\psi_0(x) \propto \exp[\frac{m\omega}{2\hbar}x^2]$

$\psi_r(x) \approx \psi_0(x - x_r)$

Betrachte nur $E \approx E_l, E_r$ dann bilden $\psi_l(x)$ und $\psi_r(x)$ eine ausreichende Basis

$$\Rightarrow H = \begin{pmatrix} H_{ll} & H_{lr} \\ H_{rl} & H_{rr} \end{pmatrix} \qquad H_{ll} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_l^*(x)\Big[\frac{p^2}{2m} + \underbrace{V(x)}_{\approx V_l}\Big]\varphi_l(x)\, dx$$

$$H_{rr} \approx E_r$$

$$H_{lr} = \int \varphi_l^*(x)\Big[\frac{p^2}{2m} + V(x)\Big]\varphi_r(x)\, dx = -A$$

hängt von Details Überlapp der Wellenfunktion und von $V(x)$ zwischen x_l und x_r ab.

A könnte i. Allg. komplex sein hier aber reell.

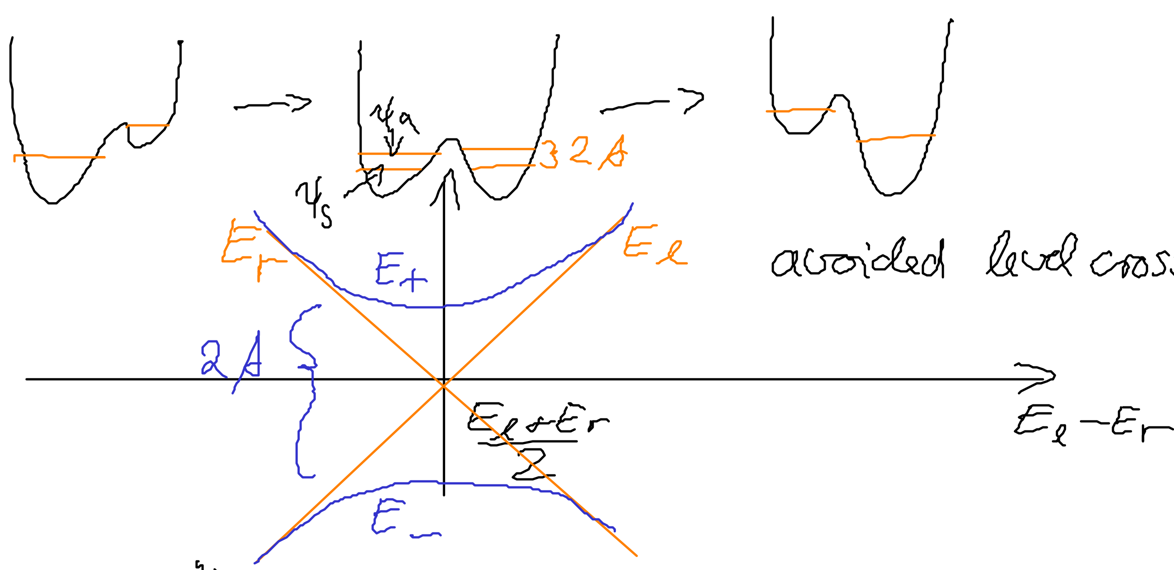
$$\Rightarrow H = \begin{pmatrix} E_l & -A \\ -A & E_r \end{pmatrix}$$

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

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

$$\boxed{\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \cos\tfrac{\theta}{2}\,|\varphi_l\rangle - \sin\tfrac{\theta}{2}\,|\varphi_r\rangle \\ |\psi_-\rangle &= \sin\tfrac{\theta}{2}\,|\varphi_l\rangle + \cos\tfrac{\theta}{2}\,|\varphi_r\rangle \end{aligned} \qquad \tan\theta = \frac{2A}{E_l - E_r}}$$

In manchen Fällen kann $E_l - E_r$ variiert werden



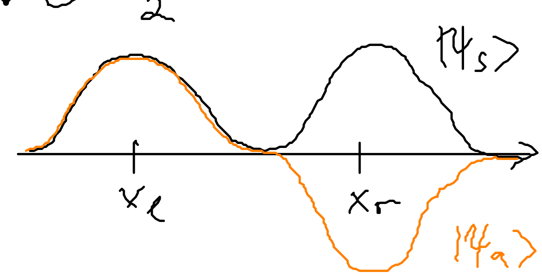
avoided level crossing

wegen Überlappmatrixelement $A \neq 0$

Am Symmetriepunkt $E_l = E_r$: $\theta = \frac{\pi}{2}$

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\varphi_l\rangle - |\varphi_r\rangle\big) = |\psi_a\rangle$$

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\varphi_l\rangle + |\varphi_r\rangle\big) = |\psi_s\rangle$$



Grundzustand ist symmetrisch
konsistent mit Knotenregel

Zeitabhängigkeit: $E_l = E_r$, $\frac{E_l + E_r}{2} = 0$

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

$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\exp[i\frac{\Delta}{\hbar}t]\,|\psi_+\rangle + \exp[i\frac{\Delta}{\hbar}t]\,|\psi_-\rangle\right)$

$P_l = |\langle\psi_l|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)$

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