Verschränkung

Pauli Gleichung (ohne el. Potenzial):

$$i\hbar\partial_t\varphi = \frac{1}{2m}\left[(p - qA)^2 - q\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot B\right]\varphi$$

Wobei:

- $p = -i\hbar\partial_z$
- $\boldsymbol{\sigma}$ … Pauli Matrizen $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Wir simulieren in 1D. Das Koordinatensystem wird so gwählt, dass B ausschliesslich in y Richtung zeigt. Damit lässt sich das magnetische Vektorpotenzial A recht einfach wählen als

$$A_x(z) = \int_{z_{\mathrm{min}}}^{z} B_y(z)\,\mathrm{d}x$$

Es wird nur eine Komponente von $\boldsymbol{\sigma}$ benötigt, da $\boldsymbol{\sigma} \cdot B = \sigma_2 B_y$.

Diese Gleichung wird nun diskretisiert:

$$i\hbar\partial_t\varphi = \frac{1}{2m}\left[(-i\hbar\partial_x)^2 + 2(-i\hbar\partial_x)qA - (qA)^2 - gq\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot B\right]\varphi$$

$$i\hbar\partial_t\varphi = \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\partial_x^2\varphi - 2i\hbar qA\partial_x\varphi - (qA)^2\varphi - gq\hbar\boldsymbol{\sigma}_2 B\varphi\right]$$

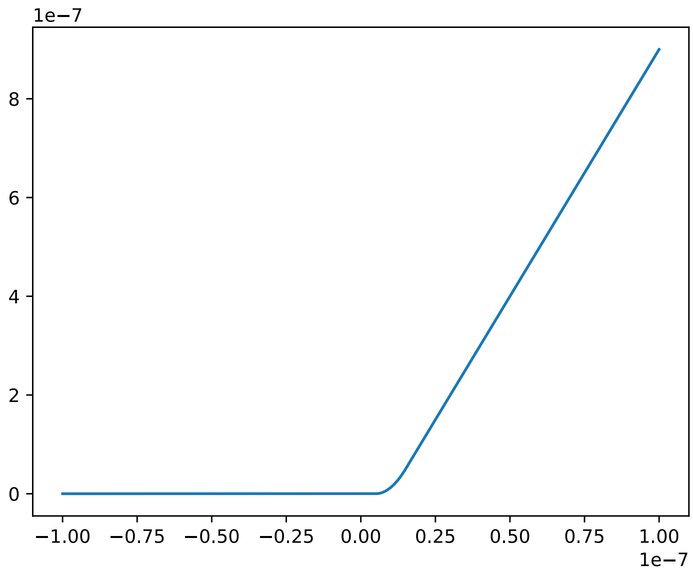
$$i\hbar\partial_t\varphi = \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\frac{\varphi_{x-1} - 2\varphi_x + \varphi_{x+1}}{(\Delta x)^2} - 2i\hbar qA_x\frac{\varphi_{x+1} - \varphi_{x-1}}{2\Delta x} - (qA_x)^2\varphi_x - gq\hbar\boldsymbol{\sigma}_2 B\varphi_x\right]$$

$$i\hbar\partial_t\varphi = \frac{1}{2m}\left[\left(-\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} + i\hbar q\frac{A_x}{\Delta x}\right)\varphi_{x-1} + \left(-\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} - i\hbar q\frac{A_x}{\Delta x}\right)\varphi_{x+1} + \left(2\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} - gq\hbar\sigma_2 B\right)\right]$$

Dabei ist zu berücksichtigen dass φ ein spinor ist also $\varphi = \begin{pmatrix} \varphi\uparrow \\ \varphi\downarrow \end{pmatrix}$ Daher wurde die Gleichung wie folgt in Matrixschreibweise diskretisiert:

$$
\partial_t \begin{pmatrix} \vdots \\ \varphi_{i-1}\uparrow \\ \varphi_{i-1}\downarrow \\ \varphi_i\uparrow \\ \varphi_i\downarrow \\ \varphi_{i+1}\uparrow \\ \varphi_{i+1}\downarrow \\ \vdots \end{pmatrix} = \frac{1}{i\hbar 2m} \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & & & & & \\ \ldots & \left(-\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} + i\hbar q\frac{A_x}{\Delta x}\right) & 0 & \left(2\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} - gq\hbar\sigma_2^{[0,0]}B\right) & -gq\hbar\sigma_2^{[0,1]}B & \left(-\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} - i\hbar q\frac{A_x}{\Delta x}\right) & 0 & \ldots \\ \ldots & 0 & \left(-\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} + i\hbar q\frac{A_x}{\Delta x}\right) & -gq\hbar\sigma_2^{[1,0]}B & 2\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} - gq\hbar\sigma_2^{[1,1]}B & 0 & \left(-\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} - i\hbar q\frac{A_x}{\Delta x}\right) & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \varphi_{i-1}\uparrow \\ \varphi_{i-1}\downarrow \\ \varphi_i\uparrow \\ \varphi_i\downarrow \\ \varphi_{i+1}\uparrow \\ \varphi_{i+1}\downarrow \\ \vdots \end{pmatrix}
$$

Das Vektorpotenzial wurde wie folgt gewählt (B0 = 1T) mit linearer Übergangsphase:



Für das Wellenpaket wurde ein Gaussches Wellenpaket mit spin up gewählt:

$$\varphi = \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2\pi a^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{(z-z_0)^2}{4a^2}\right) \exp(ik_0 z) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wellenfunktion für Zwei Partikel

Ab hier bin ich sehr unsicher ob das so stimmt, ich habe mir ein paar dinge zu Zwei-Partikel Schrödinger-Gleichungen angesehen und dies versucht auf die Pauli-Gleichung zu übertragen

Als nächstes habe ich nun probiert die Wellenfunktion für zwei Teilchen zu simulieren. Dazu hätte ich einen - Zweiteilchen Spinor angesetzt: $\varphi(x_1, x_2)$ und für die Pauli gleichung einfach die Energieterme der beiden Partikel addiert:

$$\begin{gathered} i\hbar\partial_t\varphi(x_1, x_2) = \frac{1}{2m}\Big[\left(-i\hbar\partial_{x_1}\right)^2 + \left(-i\hbar\partial_{x_2}\right)^2 + \\ \left(-i\hbar\partial_{x_1}\right)qA[x_1] + \left(-i\hbar\partial_{x_2}\right)qA[x_2] \\ -(qA[x_1])^2 - (qA[x_2])^2 \\ -gq\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot B[x_1] - gq\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot B[x_2]\Big]\varphi(x_1, x_2) \end{gathered}$$

Diese Gleichung habe ich in ähnlicher Weise diskretisiert (eben 2-dimensional). Allerdings bin ich mir hier nicht ganz sicher wie ich weiter fortfahren sollte. Ich kann “einzelne” Teilchen einsetzen (die eine konstante Funktion in einer Komponente sind (mit passender Skalierung sodass die Norm 1 wird)) und erhalte dabei das gleiche Ergebnis wie bei zwei Teilchen. Ich bin mir aber nicht ganz sicher, wie das mit der verschränkung funktioniert. Wenn ich einen “reinen” up zustand mit einem “reinen” down zustand multipliziere kommt insgesamt 0 heraus (weil die andere spin Komponente eben 0 ist).

Um die Lösung für ein Partikel zu erhalten, habe ich über die andere (absolut-quadrierte) Komponente integriert: $|\varphi(x_1)|^2 = \int |\varphi(x_1, x_2)|^2 \, \mathrm{d}x_2$