

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades  
Bachelor of Science

# Variationeller Ansatz zur Spindynamik in Quantenpunkten

Salem Bassit Rezik  
geboren in Essen

2022

Lehrstuhl für theoretische Physik  
Fakultät Physik  
Technische Universität Dortmund

Erstgutachter: Prof. Dr. Frithjof B. Anders  
Zweitgutachter: Prof. Dr. Götz S. Uhrig  
Abgabedatum: 25.10.2022

## Kurzfassung

In dieser Arbeit werden mittels des Variationsverfahren „Time Dependent Variational Principle“ (TDVP) die Euler-Lagrange-Gleichungen für das Zentralspinmodell mit zwei Spins für einen klassischen und einem modifizierten Ansatz hergeleitet. Darüber hinaus folgt ein Vergleich zwischen der exakten Lösung und der durch den klassischen Ansatz hergeleiteten Lösung.

## Abstract

In this work, using the variational method „Time Dependent Variational Principle“ (TDVP), the Euler-Lagrange equations for the central spin model with two spins are derived for a classical and a modified approach. Furthermore, the exact solution and the solution derived by the classical approach will be compared.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Quantenpunkte</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Zentralspinmodell</b>	<b>5</b>
3.1	Charakteristische Zeitskala . . . . .	5
<b>4</b>	<b>Variationsprinzip</b>	<b>7</b>
4.1	Wahl der Wellenfunktion für einen semiklassischen Ansatz . . . . .	11
4.2	Spin-1/2 im konstanten Magnetfeld . . . . .	11
4.3	Zwei Spins: Klassischer Ansatz . . . . .	15
4.4	Modifizierter Ansatz: Quantenkorrektur . . . . .	17
<b>5</b>	<b>Diskussion</b>	<b>20</b>
5.1	Quantenmechanische Lösung . . . . .	20
5.2	Exemplarischer Vergleich . . . . .	21
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>25</b>
	<b>Literatur</b>	<b>26</b>

# 1 Einleitung

Die Realisierung von Quantencomputer mit genügend hoher Anzahl an Qubits wird oft als das „heilige Gral der Wissenschaft“ angesehen, denn es soll nach theoretischen Überlegungen, die über ein halbes Jahrhundert zurückführen, in der Lage sein, die Grenzen moderner Computer zu überschreiten.

Im Gegensatz zum herkömmlichen Computer, der auf Basis von elektrischen Zuständen in Halbleitertransistoren funktioniert und nur die Zustände  $|0\rangle$  oder  $|1\rangle$  kennt, basiert der Quantencomputer auf der Superposition äquivalenter quantenmechanischer Zustände  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$ , wodurch u.a. eine drastisch höhere Anzahl von Zuständen auf gleichem Raum ermöglicht wird, was in bestimmten Fällen schnellere Prozesse zu Folge hat.

Um sich dieses Problem zu verdeutlichen, wird der Hilbertraum eines N-Teilchen-Systems bestehend aus  $\frac{1}{2}$ -Spin-Teilchen betrachtet, welcher eine Dimension von  $2^N$  besitzt. Allein die Speicherung aller Freiheitsgrade eines 100 Teilchen Systems ist eine unmögliche Herausforderung derzeit.

Dieses Problem hat schon Feynman zu der Annahme verleitet, dass wohl theoretisch ein Computer basierend auf quantenmechanischen Wirkungsmechanismen die wohl angebrachteste Lösung wäre. Und tatsächlich haben Bernstein und Vazirani den ersten Beweis veröffentlicht, dass ein Quantencomputer in der Lage ist, das exponentielle Wachstum der Rechendauer auf ein polynomiales Wachstum runterzubrechen[1].

Darüber hinaus können viele Algorithmen implementiert werden, die vorher nicht möglich waren, dazu gehört auch der bekannte Shor-Algorithmus; ein Faktorisierungsverfahren, welches unter anderem ein gewaltiges Sicherheitsrisiko für das übliche RSA-Kryptosystem darstellt[23, 24].

Die zentralen Bausteine eines Quantencomputers sind die Quantenbits, kurz Qubits. Dabei entspricht ein Qubit ein wohldefiniertes Zwei-Niveau Quantensystem. In der Vergangenheit wurden bereits einige Realisierungsmöglichkeiten des Qubits umgesetzt wie Stickstoff-Fehlstellen-Zentren in Diamanten[14, 12], Kernspin von Molekülen in Flüssigkeiten[27], Supraleitende Schaltkreise[17] und Phosphorunreinheiten im Silikon[15].

Der Realisierungsvorschlag, mit der sich diese Arbeit beschäftigt, ist den Spin eines in einem Quantenpunkt eingefangenen Elektrons zu verwenden[6, 2, 9, 8, 25]. Um die

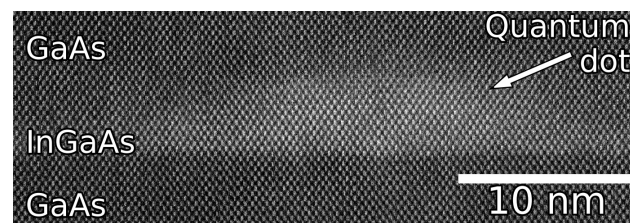
## *1 Einleitung*

---

Elektronenspindynamik zu beschreiben, wird das Zentralspinmodell verwendet und die Dynamik mit dem Variationsverfahren „Time Dependent Variational Principle“ (TDVP) behandelt.

## 2 Quantenpunkte

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der mathematischen Modellierungen der Spindynamik eines negativ geladenen Quantenpunktes, deshalb ist es sinnvoll vorab zu klären, was ein Quantenpunkt überhaupt ist. Damit einhergehend lassen sich die hier angenommenen Modelle begründen.

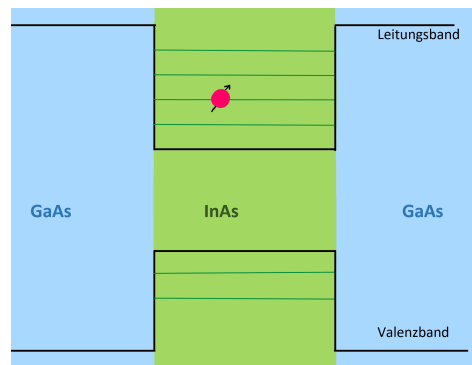


**Abbildung 2.1:** Ein atomar aufgelöstes Bild eines in Galliumarsenid (GaAs) eingebetteten Indium-Gallium-Arsenid (InGaAs)-Quantenpunktes. Das Bild wurde mit der Rastertransmissionselektronenmikroskopie aufgenommen[16].

Die hier betrachten Quantenpunkte sind nanoskopische Halbleiterstrukturen, die wie ein dreidimensionaler Potentialtopf fungieren und einzelne Ladungsträger wie Elektronen oder Löcher einfangen können.

Die Stranski-Krastnov-Methode ist eine weitverbreitete Methode um Quantenpunkte zu erzeugen, dabei ist die Idee zwei Materialien mit unterschiedlicher Gitterkonstante mittels Molekularstrahlepitaxie aufeinander wachsen zu lassen. Der Kürze halber lässt es sich beispielhaft an den beiden Materialien InAs und GaAs erklären, denn dabei wird eine InAs-Schicht auf ein GaAs-Substrat wachsen gelassen, wobei die Gitterkonstante des InAs etwa 7% größer ist [26], wodurch Spannung zwischen beiden Materialien entsteht.

Diese Spannung bewirkt eine Formationen von InAs-Inseln wie in Abbildung 2.1 zu sehen, die nur wenige zehn Nanometer groß sind, und verändert selbst die elektronische Eigenschaften, hauptsächlich den elektrische Feldgradienten des Quantenpunktes. Nun wird GaAs auf das ganze Substrat gewachsen, so dass die InAs-Inseln vollständig von dem GaAs umschlossen sind. Diese umschlossenen InAs-Inseln bilden dann explizit den Quantenpunkt.



**Abbildung 2.2:** Schematische räumliche Bandstruktur eines In(Ga)As/GaAs-Quantenpunktes mit den relevanten Bändern und einem gefangenen Ladungsträger.

Das GaAs, welches den In(Ga)As-Quantenpunkt umschließt, fungiert als Potentialtopf, denn die Energiebandlücke des InAs ist signifikant kleiner als die des GaAs. Nun kann ein einzelnes Elektron räumlich einfangen und durch die Lokalisierung die Wechselwirkung mit dem Substrat unterdrückt werden. Dadurch ist nur noch die Hyperfeinstruktur, also die Wechselwirkung mit den umliegenden Kernspins die dominante Wechselwirkung, wodurch die Dekohärenzzeit verlängert werden kann. In Abbildung 2.2 ist zu erkennen, dass einzelne Elektronen (oder Löcher) im InAs auf bestimmte Energieniveaus gefangen sind, ähnlich wie in einem Potentialtopf. Quantenpunkte werden deshalb auch als „künstliche Atome“ bezeichnet, da ganz in Analogie zu Atomen diskrete Energieniveaus von den eingefangenen Elektronen besetzt werden können.

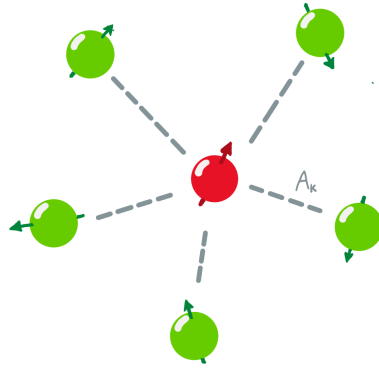


### 3 Zentralspinmodell

Im folgenden wird das **Zentralspinmodell** zur Beschreibung der Spindynamik des Quantenpunktes verwendet. Dabei werden die Interaktionen des Elektronenspins mit dem externen Magnetfeld  $\vec{B}$  und den umliegenden Kernspins  $\hat{I}_k$  über eine Heisenbergkopplung  $A_k$  berücksichtigt. Die Kernspins wechselwirken dabei auch mit dem äußeren Magnetfeld, aber die Wechselwirkung untereinander wird vernachlässigt.

$$\overline{\hat{H}}_{CSM} = \mu_B g_e \vec{B} \hat{S} + \sum_{k=1}^N \mu_k g_k \vec{B} \hat{I}_k + \sum_{k=1}^N A_k \hat{S} \hat{I}_k \quad (3.1)$$

Dabei entspricht anders als beim freien Elektron der g-Faktor eines Elektron im Quantenpunkt nicht mehr 2, sondern ca. 0,555[9]. Das Kernmagneton  $\mu_k = 5,05 \cdot 10^{27} \frac{J}{T}$  ist etwa 1800 Mal kleiner als das Bohrsche Magneton  $\mu_B = 9,27 \cdot 10^{24} \frac{J}{T}$ [5]. Die g-Faktoren  $g_k$  können für alle Kernspins der Einfachheit halber als gleich angenommen werden.



**Abbildung 3.1:** Schematischer Aufbau des Zentralspinmodells mit dem Elektronenspin (Rot) und den in direkter Umgebung liegenden Kernspins (Grün) und einer Kopplungskonstante  $A_k$ .

#### 3.1 Charakteristische Zeitskala

In der Realität relaxieren die Elektronenspins in Quantenpunkten über Kernspin-Wechselwirkungen. Diese Dephasierungszeit wurde in der Referenz [19] theoretisch ermittelt und wird hier eingeführt als charakteristische Zeitskala

$$T^* = \frac{1}{\sqrt{\sum_k A_k^2 \langle \hat{I}_k^2 \rangle}} \quad (3.2)$$

### 3 Zentralspinmodell

---

Nun kann der dimensionslose Hamiltonian  $\hat{H}_{CSM} = T^* \overline{\hat{H}_{CSM}}$  definiert werden als

$$\hat{H}_{CSM} = \vec{b} \hat{S} + \sum_{k=1}^N z_k \vec{b} \hat{I}_k + \sum_{k=1}^N \alpha_k \hat{S} \hat{I}_k \quad (3.3)$$

mit  $\vec{b} = T^* \mu_B g_e \vec{B}$  und  $\alpha_k = T^* A_k$ . Das Verhältnis zwischen Elektronen- und Kern-Zeemanspaltung ist durch  $z_k = T^* \frac{\mu_I g_k}{\mu_B g_e}$  definiert.

## 4 Variationsprinzip

Es gibt viele Ansätze den Hamiltonian des Zentralspinmodells zu lösen, die von der exakten Lösung über semiklassischen Ansätzen[19, 22, 7, 13] bishin zum Chebychev Expansionstheorem reichen[10], welche ihre eigenen Vor- und Nachteile beherbergen. Gerade bei einer großen Anzahl von Kernspins ist eine exakte quantenmechanische Lösung nicht anwendbar. Deshalb finden semiklassische Ansätze Verwendung, die eine Abweichung zur exakten Lösung in Kauf nehmen, um dafür mehr Spins behandeln zu können. In dieser Arbeit wird das Time-Dependent Variational Principle, kurz TDVP, zur Lösung verwendet. Im folgenden werden komplex konjugierte Variablen  $\bar{\mu}$  mit einem Oberbalken notiert.

### Historische Randnotiz

Dirac (1930) hat als Erster das Variationsprinzip zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung unter unkommentierten Annahmen vorgestellt; diese Annahmen sind in P. A. M. Dirac "Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society 26, 376 (1930)"[4] zu finden und werden im Rahmen dieser Bachelorarbeit nicht explizit erläutert.

Viele Physiker haben versucht Diracs Annahmen zu deuten, darunter P. Kramer, der Diracs Variationsprinzip als ein Wirkungsfunktional (siehe Gl. (4.1)) interpretiert (TDVP) [18] und dadurch wie unten skizziert die Euler-Lagrange-Gleichungen hergeleitet hat. Frenkel (1934) hat Diracs Ansatz demgegenüber als Minimierungsbedingung (siehe Gl. (4.5)) und dadurch Orthogonalprojektion interpretiert (Dirac-Frenkel Variational Principle, kurz DFVP) und bezieht sich dabei auf den Appendix der russischen Übersetzung von Diracs Buch als den Ursprung seines Argumentes[20]. Diese geometrische Interpretation wurde der Kürze halber vornehmlich unten in der Herleitung verwendet. Beide Interpretationen bzw. Ansätze sind äquivalent zueinander unter milden Bedingungen[3], die für gewöhnlich erfüllt sind.

Eine explizite Herleitung ist in Referenz [18] und [11] zu finden. Die zeitabhängige Schrödingergleichung kann durch Externalisierung des Wirkungsfunktionals

$$S\{\bar{\Psi}(t), \Psi(t)\} = \int_{t_1}^{t_2} dt L(\bar{\Psi}(t), \Psi(t), t) \quad (4.1)$$

mit der Lagrange-Funktion und der normierten Wellenfunktion  $|\Psi\rangle$ :

$$L(\bar{\Psi}(t), \Psi(t), t) = \frac{i}{2} \langle \Psi(t) | \dot{\Psi}(t) \rangle - \frac{i}{2} \langle \dot{\Psi}(t) | \Psi(t) \rangle - \langle \Psi(t) | \hat{H}(t) | \Psi(t) \rangle \quad (4.2)$$

hergeleitet werden. Der Kürze halber wird die explizite Zeitabhängigkeit von  $\hat{H}$  vernachlässigt und damit auch die von  $L$ . Stationarität der Wirkung  $\delta S \stackrel{!}{=} 0$  unter der unabhängigen Variation von  $|\Psi\rangle$  und  $\langle\Psi|$  im vollen Hilbertraum  $H$  reproduziert die zeitabhängige Schrödingergleichung (und ihr Konjugiertes).

Die Essenz des Variationsprinzips findet sich bei der Beschränkung auf einen Unterraum bzw. Mannigfaltigkeit  $M \subset H$ , wobei immer noch die Variation von  $|\Psi\rangle$  und  $\langle\Psi|$  eine stationäre Lösung liefert, wodurch die Zeitentwicklung des Zustandes  $|\Psi\rangle \in M$  definiert ist. Zusätzlich beschränken wir nun die Variation auf die Tangentialebene von  $M$  am Zustand  $|\Psi\rangle$ . Um die Tangentialebene ordentlich definieren zu können, kann die Mannigfaltigkeit  $M$  parametrisiert werden als

$$M = \{|\Psi(\vec{\mu})\rangle \mid \vec{\mu} \in \mathbb{C}^n\}, \quad (4.3)$$

wodurch die Zeitabhängigkeit auf die analytischen und komplexen Parameter  $\mu_i(t)$  ausgelagert wird; bzw. anti-analytischen Abhängigkeit für  $\langle\Psi(\vec{\mu})|$ . Somit kann die Tangentialebene am Zustand  $|\Psi\rangle$  definiert werden als

$$T_{\mu(t)}M = \text{span}\{|\partial_{\mu_i}\Psi\rangle, i = 1, \dots, n\}. \quad (4.4)$$

Anmerkung: Es wird die Konvention  $\langle\partial_{\vec{\mu}_j}\Psi| = (|\partial_{\mu_j}\Psi\rangle)^\dagger$  verwendet.

Nun kann durch die direkte Variation der Parameter  $\vec{\mu}(t) \rightarrow \vec{\mu}(t) + \delta\vec{\mu}$  und der Stationaritätsbedingung  $\delta S = 0$  die Euler-Lagrange-Gleichungen hergeleitet werden. Äquivalent zur Variation können die Parameter  $\mu_i$  geometrisch hergeleitet werden, indem das Residuum der Schrödingergleichung bzw. der Abstand zwischen der Schrödingergleichung und der Tangentialebene  $T_{\mu(t)}M$

$$\|i \underbrace{\sum_k \dot{\mu}_k |\partial_{\mu_k}\Psi\rangle}_{\frac{d}{dt}|\Psi\rangle} - \hat{H}|\Psi\rangle\| \quad (4.5)$$

minimiert wird. Dies gelingt durch eine Orthogonalprojektion von  $\hat{H}|\Psi\rangle$  auf die Tangentialebene  $T_{\mu(t)}M$ . Dafür definieren wir den Projektionsoperator

$$\hat{P}_{T_\mu M} = \sum_{i,j} |\partial_{\mu_i}\Psi\rangle (G_{i,j})^{-1} \langle\partial_{\mu_j}\Psi|. \quad (4.6)$$

Dabei taucht hier die inverse der Grammatrix

$$G_{ij} = \langle \partial_{\vec{\mu}_i} \Psi | \partial_{\vec{\mu}_j} \Psi \rangle. \quad (4.7)$$

auf, damit u.a. die Projektionsoperatoreigenschaft  $\hat{P}_{T_\mu M}^2 = \hat{P}_{T_\mu M}$  erfüllt ist. Über einen Koeffizientenvergleich zwischen

$$\hat{P}_{T_\mu M} \hat{H} |\Psi\rangle = \sum_{i,j} \left( (G_{ij})^{-1} \langle \partial_{\vec{\mu}_j} \Psi | \hat{H} |\Psi\rangle \right) |\partial_{\vec{\mu}_i} \Psi\rangle \quad (4.8)$$

und aus (4.5)

$$i \sum_k \dot{\mu}_k |\partial_{\vec{\mu}_k} \Psi\rangle \quad (4.9)$$

zu den Zustandsvektoren  $|\partial_{\vec{\mu}_i} \Psi\rangle$  ergeben sich schlussendlich die **Euler-Lagrange-Gleichungen** für den normierten Fall:

$$i\dot{\mu}_i = \sum_j (G_{ij})^{-1} \langle \partial_{\vec{\mu}_j} \Psi | \hat{H} |\Psi\rangle. \quad (4.10)$$

Da in dieser Arbeit ein nicht-normierter Wellenfunktionsansatz verwendet wird, ist der verallgemeinerte Fall von besonderem Interesse. Die Zeitentwicklung des Hamiltonian ist unitär und somit normerhaltend, was aber nicht mehr für die Projektion gilt. Wir können die modifizierte Lagrange-Funktion  $\tilde{L}(\vec{\Psi}(t), \Psi(t)) = \frac{L(\vec{\Psi}(t), \Psi(t))}{\langle \vec{\Psi}(t) | \Psi \rangle}$  definieren und unter Berücksichtigung der Parametrisierung erhalten wir

$$\tilde{L}(\vec{\mu}(t), \vec{\mu}(t)) = \frac{i}{2} \sum_j \left( \dot{\mu}_j(t) \partial_{\mu_j} + \vec{\mu}_j(t) \partial_{\vec{\mu}_j} \right) \ln (\langle \Psi(\vec{\mu}(t)) | \Psi(\vec{\mu}(t)) \rangle) - \mathcal{H}(\vec{\mu}(t), \vec{\mu}(t)) \quad (4.11)$$

mit der effektiven Hamilton-Funktion

$$\mathcal{H} = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (4.12)$$

Stationarität unter Variation  $\vec{\mu}(t) \rightarrow \vec{\mu}(t) + \delta \vec{\mu}$  ergeben die verallgemeinerten Euler-Lagrange-Gleichungen. Hier kann aber wieder eine geometrische Interpretation zur Herleitung verwendet werden. Unter einer infinitesimalen Verrückung in  $|\Psi\rangle$ -Richtung des Zustandes  $|\Psi\rangle$  ändern sich Phase und Norm, um Normerhaltung zu bewahren, wird von jedem Tangentenvektor  $|\partial_{\vec{\mu}_i} \Psi\rangle$  die Komponente entlang  $|\Psi(\vec{\mu})\rangle$  subtrahiert. Dieses Abziehen kann durch den Projektionsoperator

$$\hat{P}_0 = \hat{1} - \frac{|\Psi(\vec{\mu})\rangle \langle \Psi(\vec{\mu})|}{\langle \Psi(\vec{\mu}(t)) | \Psi(\vec{\mu}(t)) \rangle} \quad (4.13)$$

realisiert werden, wenn alle Tangentenvektoren  $|\partial_{\mu_i} \Psi\rangle$  mit  $\hat{P}_0 |\partial_{\mu_i} \Psi\rangle$  ausgetauscht werden. Dadurch ergibt sich unter Berücksichtigung der Normierung die **modifizierte Gram-Matrix**

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{ij} &= \frac{\langle \partial_{\bar{\mu}_i} \Psi | \hat{P}_0 | \partial_{\mu_j} \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \\ &= \frac{\langle \partial_{\bar{\mu}_i} \Psi | \partial_{\mu_j} \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - \frac{\langle \partial_{\bar{\mu}_i} \Psi | \Psi \rangle \langle \Psi | \partial_{\mu_j} \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \end{aligned} \quad (4.14)$$

und aus  $\langle \partial_{\bar{\mu}_j} \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$  unter Berücksichtigung der Normierung ergibt sich ebenfalls

$$\begin{aligned} \frac{\langle \partial_{\bar{\mu}_j} \Psi | \hat{P}_0 \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} &= \frac{\langle \partial_{\mu_j} \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - \frac{\langle \partial_{\mu_j} \Psi | \Psi \rangle \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ &= \partial_{\bar{\mu}_j} \mathcal{H}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Und damit erhalten wir wie beim direkten Ausrechnen der stationären Variation des Wirkungsfunctionals mit der modifizierten Lagrangefunktion  $\tilde{L}$ , die **verallgemeinerten Euler-Lagrange-Gleichungen**:

$$i\dot{\mu}_i = \sum_j \left( \tilde{G}_{ij} \right)^{-1} \partial_{\bar{\mu}_j} \mathcal{H}. \quad (4.16)$$

## 4.1 Wahl der Wellenfunktion für einen semiklassischen Ansatz

Zur Vereinfachung werden alle Kernspins (wie der Elektronenspin) als  $1/2$ -Spins angenommen. Wir nutzen die Geometrie des  $1/2$ -Spins aus und verwenden zur Darstellung die bekannte **Bloch-Sphäre**. Ähnlich wie die komplexe e-Funktion dank trigonometrischer Eigenschaften einen Kreis auf der Zahlenebene abbilden kann, ist es auch möglich, jeden Punkt auf einer Kugeloberfläche zu beschreiben. Die folgende Wellenfunktion

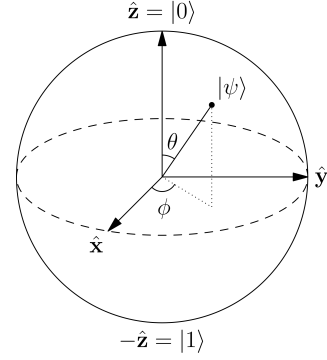
$$|\Psi(\mu_1(t), \dots, \mu_n(t))\rangle = \frac{1}{N} \prod_{i=1}^n e^{\mu_i S_i^-} |\uparrow, \dots, \uparrow\rangle \quad (4.17)$$

mit dem Normierungsfaktor

$$N = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{1 + \mu_i \bar{\mu}_i}}. \quad (4.18)$$

beschreibt gerade einen Produktzustand aus  $n$  Bloch-Sphären und wird mit den komplexen Parametern  $\mu_i(t)$  parametrisiert. Dabei beschreibt der Betrag  $|\mu|$  die Anteile von  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  in der Wellenfunktion jeweils. Der Zustand  $|\uparrow\rangle$  kann durch  $\mu = 0$  und der Zustand  $|\downarrow\rangle$  als Grenzwert für  $|\mu| \rightarrow \infty$  erreicht werden; dadurch steht der Betrag  $|\mu|$  in Beziehung mit dem Winkel  $\theta$  in Abbildung 4.1 über  $\theta = 2 \tan^{-1}(|\mu|)$ . Das komplexe Argument von  $\mu$  beschreibt dabei die Phase der Zustände und steht deshalb ebenfalls in Beziehung mit dem Winkel  $\phi$  in Abbildung 4.1.

Dieser Ansatz ist die Basis für weitere Korrekturen, die im späteren Verlauf verwendet werden können, um quantenmechanische Effekte berücksichtigen zu können. Es wird der Ansatz aus Gl. (4.17) ohne den Normierungsfaktor verwendet, da das TDVP nur eine analytische Wellenfunktion variieren kann, der Normierungsfaktor ist aber durch das Auftauchen von  $\mu_i$  und dem konjugierten  $\bar{\mu}_i$  nicht analytisch. Es kann aber immer noch auf die verallgemeinerte Euler-Lagrange-Gleichungen Gl. (4.16) zurückgegriffen werden.



**Abbildung 4.1:** Schematischer Aufbau einer Bloch-Sphäre. Dabei entspricht  $|0\rangle$  gerade  $|\uparrow\rangle$  und  $|1\rangle$  gerade  $|\downarrow\rangle$  [21].

## 4.2 Spin-1/2 im konstanten Magnetfeld

Zum besseren Verständnis des TDVPs ist die beispielhafte Betrachtung des vereinfachten Falles sehr aufschlussreich. Zudem lassen sich Identitäten herleiten, die

in die Erweiterung zum **Zentralspinmodell** Wiederverwendung finden werden. Hierfür wird nur der erste Summand des Zentralspinmodells betrachtet bzw. der Hamilton-Operator für einen Spin in einem Magnetfeld:

$$\hat{H}_1 = \vec{b} \cdot \hat{\vec{S}} = (b_x \hat{S}_x + b_y \hat{S}_y + b_z \hat{S}_z) \quad (4.19)$$

$$= \frac{b_x}{2} (|\downarrow\rangle\langle\uparrow| + |\uparrow\rangle\langle\downarrow|) \quad (4.20)$$

$$+ \frac{ib_y}{2} (|\downarrow\rangle\langle\uparrow| - |\uparrow\rangle\langle\downarrow|) \quad (4.21)$$

$$+ \frac{b_z}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|), \quad (4.22)$$

wobei der Lande-Faktor des freien Elektrones  $g_e \approx 2$  ist. Der Spin-Vektoroperator hat die Form  $\hat{\vec{S}} = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)^T$  mit den Pauli-Matrizen  $\hat{\sigma}_i$ . Aus dem klassischen Ansatz Gl. (4.17) ergibt sich

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= e^{\mu S^-} |\uparrow\rangle \\ &= (1 + \frac{\mu S^-}{1!} + \frac{(\mu S^-)^2}{2!} + \dots) |\uparrow\rangle \\ &= |\uparrow\rangle + \mu |\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

Dabei haben wurde die Eigenschaft des 1/2-Spins  $(S^-)^n |\uparrow\rangle = 0$  ( $n = 2, 3, \dots$ ) verwendet. Dieser Ansatz deckt unter Berücksichtigung der Normierung und der Phasenfreiheit den gesamten Hilbertraum des 1/2-Spins ab

$$|\mu\rangle = e^{i\phi} \frac{1}{\sqrt{1 + \mu\bar{\mu}}} |\uparrow\rangle + e^{i\phi} \frac{\mu}{\sqrt{1 + \mu\bar{\mu}}} |\downarrow\rangle. \quad (4.23)$$

Somit ergibt sich der effektive Hamilton-Funktion und seine partielle Ableitung nach  $\bar{\mu}$ :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \frac{b_x(\mu + \bar{\mu}) + ib_y(\bar{\mu} - \mu) + b_z(1 - \mu\bar{\mu})}{1 + \mu\bar{\mu}} \quad (4.24)$$

$$\partial_{\bar{\mu}} \mathcal{H} = \frac{1}{2} \frac{b_x(1 - \mu^2) + ib_y(1 + \mu^2) - 2\mu b_z}{(1 + \mu\bar{\mu})^2}. \quad (4.25)$$

Im nächsten Schritt wird die von dem Hamiltonian unabhängige modifizierte Gram-Matrix  $G_{ij}$  bestimmt, welche in diesem Fall eindimesnional ist. Damit erhalten wir

$$G_{11} = \frac{1}{(1 + \mu\bar{\mu})^2} \quad \text{bzw.} \quad G_{11}^{-1} = (1 + \mu\bar{\mu})^2. \quad (4.26)$$



Einsetzen in die verallgemeinerte Euler-Lagrange-Gleichung Gl. (4.16) liefert:

$$i\dot{\mu} = (G_{11})^{-1} \partial_{\bar{\mu}} \mathcal{H} = \frac{b_x}{2}(1 - \mu^2) + \frac{ib_y}{2}(1 + \mu^2) - \mu b_z \quad (4.27)$$

$$\leftrightarrow \dot{\mu} = \frac{b_y}{2}(1 + \mu^2) - \frac{ib_x}{2}(1 - \mu^2) + i\mu b_z. \quad (4.28)$$

Die normierten **Spin-Erwartungswerte**  $\frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$  lauten:

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} + \mu}{1 + \mu\bar{\mu}} = \frac{Re[\mu]}{1 + \mu\bar{\mu}} \quad (4.29)$$

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{i}{2} \frac{\bar{\mu} - \mu}{1 + \mu\bar{\mu}} = \frac{Im[\mu]}{1 + \mu\bar{\mu}} \quad (4.30)$$

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{1}{2} \frac{1 - \mu\bar{\mu}}{1 + \mu\bar{\mu}}. \quad (4.31)$$

Unter Verwendung der Kettenregel

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_\alpha | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = \partial_\mu \left[ \frac{\langle \Psi | \hat{S}_\alpha | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] \dot{\mu} + \partial_{\bar{\mu}} \left[ \frac{\langle \Psi | \hat{S}_\alpha | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] \dot{\bar{\mu}} \quad (4.32)$$

lassen sich die Bewegungsgleichungen der Spinerwartungswerte berechnen. Für  $\hat{S}_x$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) &= \frac{1}{2} \frac{1 - \bar{\mu}^2}{(1 + \mu\bar{\mu})^2} \cdot \left[ \frac{b_y}{2}(1 + \mu^2) - \frac{ib_x}{2}(1 - \mu^2) + i\mu b_z \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{1 - \mu^2}{(1 + \mu\bar{\mu})^2} \cdot \left[ \frac{b_y}{2}(1 + \bar{\mu}^2) + \frac{ib_x}{2}(1 - \bar{\mu}^2) - i\bar{\mu} b_z \right] \\ &= \frac{1}{2(1 + \mu\bar{\mu})^2} \left( \frac{b_y}{2} \underbrace{[(1 - \bar{\mu}^2)(1 + \mu^2) + (1 - \mu^2)(1 + \bar{\mu}^2)]}_{=2(1 - \mu\bar{\mu})(1 + \mu\bar{\mu})} \right. \\ &\quad \left. - \frac{ib_x}{2} \underbrace{[(1 - \bar{\mu}^2)(1 - \mu^2) - (1 - \mu^2)(1 - \bar{\mu}^2)]}_{=0} \right. \\ &\quad \left. + ib_z \underbrace{[\mu(1 - \bar{\mu}^2) - \bar{\mu}(1 - \mu^2)]}_{=-(\bar{\mu} - \mu)(1 + \mu\bar{\mu})} \right) \\ &= b_y \frac{1}{2} \frac{1 - \mu\bar{\mu}}{(1 + \mu\bar{\mu})} - b_z \frac{i}{2} \frac{\bar{\mu} - \mu}{(1 + \mu\bar{\mu})} \\ &= b_y \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) - b_z \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right), \end{aligned} \quad (4.33)$$

für  $\hat{S}_y$ :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) &= -\frac{i}{2} \frac{1 + \bar{\mu}^2}{(1 + \mu \bar{\mu})^2} \cdot \left[ \frac{b_y}{2} (1 + \mu^2) - \frac{ib_x}{2} (1 - \mu^2) + i\mu b_z \right] \\
&\quad + \frac{i}{2} \frac{1 + \mu^2}{(1 + \mu \bar{\mu})^2} \cdot \left[ \frac{b_y}{2} (1 + \bar{\mu}^2) + \frac{ib_x}{2} (1 - \bar{\mu}^2) - i\bar{\mu} b_z \right] \\
&= \frac{i}{2(1 + \mu \bar{\mu})^2} \left( \frac{b_y}{2} \underbrace{[(1 + \bar{\mu}^2)(1 + \mu^2) - (1 + \mu^2)(1 + \bar{\mu}^2)]}_{=0} \right. \\
&\quad \left. + \frac{ib_x}{2} \underbrace{[(1 + \bar{\mu}^2)(1 - \mu^2) + (1 - \mu^2)(1 + \bar{\mu}^2)]}_{=2(1 - \mu \bar{\mu})(1 + \mu \bar{\mu})} \right. \\
&\quad \left. + ib_z \underbrace{[\mu(1 - \bar{\mu}^2) - \bar{\mu}(1 - \mu^2)]}_{=-(\bar{\mu} + \mu)(1 + \mu \bar{\mu})} \right) \\
&= -b_x \frac{1}{2} \frac{1 - \mu \bar{\mu}}{(1 + \mu \bar{\mu})} + b_z \frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} + \mu}{(1 + \mu \bar{\mu})} \\
&= b_z \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) - b_x \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \tag{4.34}
\end{aligned}$$

und schlussendlich für  $\hat{S}_z$ :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) &= -\frac{\bar{\mu}}{(1 + \mu \bar{\mu})^2} \cdot \left[ \frac{b_y}{2} (1 + \mu^2) - \frac{ib_x}{2} (1 - \mu^2) + i\mu b_z \right] \\
&\quad - \frac{\mu}{(1 + \mu \bar{\mu})^2} \cdot \left[ \frac{b_y}{2} (1 + \bar{\mu}^2) + \frac{ib_x}{2} (1 - \bar{\mu}^2) - i\bar{\mu} b_z \right] \\
&= \frac{1}{(1 + \mu \bar{\mu})^2} \left( \frac{b_y}{2} \underbrace{[\bar{\mu}(1 + \mu^2) + \mu(1 + \bar{\mu}^2)]}_{=(\mu + \bar{\mu})(1 + \mu \bar{\mu})} \right. \\
&\quad \left. + \frac{ib_x}{2} \underbrace{[\mu(1 - \bar{\mu}^2) - \bar{\mu}(1 - \mu^2)]}_{=-(\bar{\mu} - \mu)(1 + \mu \bar{\mu})} \right. \\
&\quad \left. + ib_z \underbrace{[\bar{\mu}\mu - \mu\bar{\mu}]}_{=0} \right) \\
&= b_x \frac{i}{2} \frac{\bar{\mu} - \mu}{(1 + \mu \bar{\mu})} - b_y \frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} + \mu}{(1 + \mu \bar{\mu})} \\
&= b_x \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) - b_y \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right). \tag{4.35}
\end{aligned}$$

Zusammenfassend ergibt sich:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = \vec{b} \times \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right). \quad (4.36)$$

Dies entspricht wie zu erwarten der *Larmor-Präzession*.

### 4.3 Zwei Spins: Klassischer Ansatz

Der vollständige zwei 1/2-Spin-Hilbertraum wird aufgespannt durch

$$|\Psi\rangle = \alpha_1 |\uparrow\uparrow\rangle + \alpha_2 |\downarrow\uparrow\rangle + \alpha_3 |\uparrow\downarrow\rangle + \alpha_4 |\downarrow\downarrow\rangle \quad (4.37)$$

mit den unabhängigen, komplexen Parametern  $\alpha_i$ . Mit dem klassischen Ansatz  $|\Psi\rangle = |\Psi(\mu_1, \mu_2)\rangle$  aus Gl. (4.17) ergibt sich:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= e^{\mu_1 \hat{S}^-} e^{\mu_2 \hat{I}^-} |\uparrow, \uparrow\rangle \\ &= |\uparrow\uparrow\rangle + \mu_1 |\downarrow\uparrow\rangle + \mu_2 |\uparrow\downarrow\rangle + \mu_1 \mu_2 |\downarrow\downarrow\rangle \\ &= \underbrace{(|\uparrow\rangle_1 + \mu_1 |\downarrow\rangle_1)}_{|\Psi_1\rangle} \underbrace{(|\uparrow\rangle_2 + \mu_2 |\downarrow\rangle_2)}_{|\Psi_2\rangle}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Dabei wurde  $\hat{S}_1^- = \hat{S}^-$  und  $\hat{S}_2^- = \hat{I}^-$  gesetzt, um die Unterscheidung zwischen Elektronen- und Kernspin hervorzuheben. Wird die Phasenfreiheit und die Normierung berücksichtigt und unter einem komplexen Parameter  $\mu_0$  zusammengefasst

$$\underbrace{N e^{i\phi}}_{=\mu_0} |\Psi\rangle = \underbrace{\mu_0}_{\alpha_1} |\uparrow\uparrow\rangle + \underbrace{\mu_0 \mu_1}_{\alpha_2} |\downarrow\uparrow\rangle + \underbrace{\mu_0 \mu_2}_{\alpha_3} |\uparrow\downarrow\rangle + \underbrace{\mu_0 \mu_1 \mu_2}_{\alpha_4} |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (4.39)$$

lässt sich erkennen, dass  $\alpha_1, \alpha_2$  und  $\alpha_3$  unabhängig sind, aber  $\alpha_4$  gerade von  $\alpha_1, \alpha_2$  und  $\alpha_3$  abhängig ist. Dadurch wird der Hilbertraum auf einen Unterraum beschränkt. Der Hamiltonoperator des Zentralspinmodells für den zwei 1/2-Spin Fall lautet

$$\hat{H}_{CSM} = \vec{b} \hat{S} + z \vec{b} \hat{I} + \alpha \hat{S} \hat{I}. \quad (4.40)$$

Damit ergibt sich für die effektive Hamilton-Funktion:

$$\mathcal{H} = \frac{\langle \Psi | \hat{H}_1 | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H}_2 | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (4.41)$$

mit

$$\langle \Psi | \hat{H}_1 | \Psi \rangle = \frac{1}{2} (1 + \mu_2 \bar{\mu}_2) (b_x (1 - \mu_1^2) + i b_y (1 + \mu_1^2) - 2 \mu_1 b_z) \quad (4.42)$$

$$\langle \Psi | \hat{H}_2 | \Psi \rangle = \frac{z}{2} (1 + \mu_1 \bar{\mu}_1) (b_x (1 - \mu_2^2) + i b_y (1 + \mu_2^2) - 2 \mu_2 b_z) \quad (4.43)$$

$$\langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle = \frac{\alpha}{4} [(\mu_1 + \bar{\mu}_1)(\mu_2 + \bar{\mu}_2) - (\mu_1 - \bar{\mu}_1)(\mu_2 - \bar{\mu}_2) + (1 - \mu_1 \bar{\mu}_1)(1 - \mu_2 \bar{\mu}_2)] \quad (4.44)$$

Und wir erhalten die partiellen Ableitungen:

$$\begin{aligned} \partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} &= \frac{1}{2(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2} [b_x (1 - \mu_1^2) + i b_y (1 + \mu_1^2) - b_z \mu_1] \\ &\quad \underbrace{= \partial_{\bar{\mu}_1} \frac{\langle \Psi | \hat{H}_1 + \hat{H}_2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}}_{= \partial_{\bar{\mu}_1} \frac{\langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \\ &\quad + \frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(1 + \mu_1 \bar{\mu}_2)}{(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 (1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)} \end{aligned} \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned} \partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} &= \frac{z}{2(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2} [b_x (1 - \mu_2^2) + i B_y (1 + \mu_2^2) - B_z \mu_2] \\ &\quad \underbrace{= \partial_{\bar{\mu}_2} \frac{\langle \Psi | \hat{H}_1 + \hat{H}_2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}}_{= \partial_{\bar{\mu}_2} \frac{\langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \\ &\quad + \frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_1 - \mu_2)(1 + \mu_2 \bar{\mu}_1)}{(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Zudem ergibt sich die modifizierte Gram-Matrix

$$G = \begin{pmatrix} (1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 & 0 \\ 0 & (1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2 \end{pmatrix} \quad (4.47)$$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2} \end{pmatrix}, \quad (4.48)$$

die diesmal zweidimensional ist. Nun können die Euler-Lagrange-Gleichungen aufgestellt werden:

$$i \dot{\mu}_1 = \sum_j (G_{1j})^{-1} \partial_{\bar{\mu}_j} \mathcal{H} \quad (4.49)$$

$$\begin{aligned} &= \underbrace{\frac{1}{2} b_x (1 - \mu_1^2) + \frac{i}{2} b_y (1 + \mu_1^2) - \mu_1 b_z}_{\text{Ein-Spin-Präzession um } \vec{b}} + \underbrace{\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(1 + \mu_1 \bar{\mu}_2)}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2}}_{\text{Ein-Spin-Präzession um } \frac{\langle \Psi | \hat{I} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \end{aligned} \quad (4.50)$$

und in analoger Weise

$$i\dot{\mu}_2 = \underbrace{\frac{z}{2}b_x(1 - \mu_2^2) + \frac{iz}{2}b_y(1 + \mu_2^2) - \mu_2 z b_z}_{\text{Ein-Spin-Präzession um } \vec{b}} + \underbrace{\frac{\alpha(\mu_1 - \mu_2)(1 + \mu_2\bar{\mu}_1)}{2(1 + \mu_1\bar{\mu}_1)}}_{\text{Ein-Spin-Präzession um } \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}}. \quad (4.51)$$

Aufgrund der Linearität der Differentialgleichungen ist beim Vergleich mit Gl. (4.27) zu erkennen, dass es sich bei den ersten beiden Summanden um die Lösung aus dem Ein-Spin-Fall im Magnetfeld handelt. Nun fehlt es noch zu beweisen, dass der letztere Summand tatsächlich die Präzession um den Spin-Erwartungswert des jeweilig anderen Spins beschreibt bzw. das Overhauser-Feld. Dies kann gezeigt werden, wenn in der Gl. (4.27) die  $b_{x,y,z}$  durch  $\alpha \frac{\langle \Psi | \hat{I}_{x,y,z} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$  ausgetauscht werden

$$\frac{\alpha}{2} \left[ \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\mu_2 + \bar{\mu}_2}{1 + \mu_2\bar{\mu}_2}}_{\frac{\langle \Psi | \hat{I}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} (1 - \mu_1^2) + i \underbrace{\frac{\bar{\mu}_2 - \mu_2}{2} \frac{1 + \mu_2^2}{1 + \mu_2\bar{\mu}_2}}_{\frac{\langle \Psi | \hat{I}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} - 2\mu_1 \underbrace{\frac{1}{2} \frac{1 - \mu_2\bar{\mu}_2}{1 + \mu_2\bar{\mu}_2}}_{\frac{\langle \Psi | \hat{I}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \right], \quad (4.52)$$

denn einfaches Auflösen führt ebenfalls zu

$$\frac{\alpha(\mu_2 - \mu_1)(1 + \mu_1\bar{\mu}_2)}{2(1 + \mu_2\bar{\mu}_2)}. \quad (4.53)$$

Hier lässt sich erkennen, dass die  $\alpha \frac{\langle \Psi | \hat{I}_i | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$  die Rolle des Magnetfeldes  $\vec{b}$  in der Ein-Spin-Lösung übernehmen. Wir erhalten dann aus Symmetriegründen:

$$\frac{d}{dt} \left[ \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] = \left( \vec{b} + \alpha \frac{\langle \Psi | \hat{I} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \times \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (4.54)$$

$$\frac{d}{dt} \left[ \frac{\langle \Psi | \hat{I} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] = \left( z\vec{b} + \alpha \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \times \frac{\langle \Psi | \hat{I} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (4.55)$$

## 4.4 Modifizierter Ansatz: Quantenkorrektur

Wie im vorherigen Abschnitt zu sehen, erhalten wir eine klassische Lösung. Um eine genauere Lösung zu erhalten, führen wir einen weiteren Korrekturparameter  $\mu_{12}$  ein, wodurch ein größerer Unterraum des zwei 1/2-Spin-Hilbertraumes aufgespannt

wird, mit der Hoffnung im Gegensatz zum klassischen Ansatz die Verschränkung zu berücksichtigen. Der modifizierte Ansatz lautet:

$$|\Psi(\mu_1, \mu_2, \mu_{12})\rangle = e^{\mu_1 S_1^-} e^{\mu_2 S_2^-} e^{\mu_{12} S_1^- S_2^-} |\uparrow, \uparrow\rangle \quad (4.56)$$

$$= |\uparrow\uparrow\rangle + \mu_1 |\downarrow\uparrow\rangle + \mu_2 |\uparrow\downarrow\rangle + (\mu_1\mu_2 + \mu_{12}) |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (4.57)$$

Wird die Phasenfreiheit und die Normierung berücksichtigt und unter einem komplexen Parameter  $\mu_0$  zusammengefasst, ergibt sich

$$\underbrace{Ne^{i\phi}}_{=\mu_0} |\Psi\rangle = \underbrace{\mu_0}_{\alpha_1} |\uparrow\uparrow\rangle + \underbrace{\mu_0\mu_1}_{\alpha_2} |\downarrow\uparrow\rangle + \underbrace{\mu_0\mu_2}_{\alpha_3} |\uparrow\downarrow\rangle + \underbrace{\mu_0(\mu_1\mu_2 + \mu_{12})}_{\alpha_4} |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (4.58)$$

Im Gegensatz zum klassischen Ansatz lässt sich erkennen, dass alle Parameter  $\alpha_i$ , einschließlich  $\alpha_4$ , unabhängig sind. Somit ist der gesamte Hilbertraumabgedeckt und die exakte Lösung zu erwarten.

Aufgrund der Tatsache, dass bei einem  $\vec{b}$ -Feld in beliebiger Richtung, sich die Rechnung und Ergebnisse außerordentlich verkomplizieren, ohne wirklich neue Erkenntnis zu bringen, wird das Magnetfeld in z-Richtung ausgerichtet. Somit vereinfacht sich der Hamiltonian (4.40) zu:

$$\hat{H} = \vec{b}\hat{S}_z + z\vec{b}\hat{I}_z + \alpha\hat{S}\hat{I} \quad (4.59)$$

Mit diesem Ansatz erhalten wir nach längerer Rechnung die effektive Hamiltonfunktion:

$$\mathcal{H} = \frac{\langle\Psi|\hat{H}_1|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{H}_2|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{H}_3|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \quad (4.60)$$

mit

$$\langle\Psi|\hat{H}_1|\Psi\rangle = \frac{b}{2} [1 - \mu_1\bar{\mu}_1 + \mu_2\bar{\mu}_2 - (\mu_1\mu_2 + \mu_{12})(\bar{\mu}_1\bar{\mu}_2 + \bar{\mu}_{12})] \quad (4.61)$$

$$\langle\Psi|\hat{H}_2|\Psi\rangle = \frac{zb}{2} [1 - \mu_2\bar{\mu}_2 + \mu_1\bar{\mu}_1 - (\mu_1\mu_2 + \mu_{12})(\bar{\mu}_1\bar{\mu}_2 + \bar{\mu}_{12})] \quad (4.62)$$

$$\langle\Psi|\hat{H}_3|\Psi\rangle = \frac{\alpha}{4} [2(\bar{\mu}_1\mu_2 + \mu_1\bar{\mu}_2) + 1 - \mu_1\bar{\mu}_1 - \mu_2\bar{\mu}_2 + (\mu_1\mu_2 + \mu_{12})(\bar{\mu}_1\bar{\mu}_2 + \bar{\mu}_{12})]. \quad (4.63)$$

Damit folgen für die partiellen Ableitungen nach den konjugierten Parameter

$$\begin{aligned}\partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} = & -b \frac{\mu_1(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2 + \bar{\mu}_2 \mu_{12}}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ & + zb \frac{\bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ & + \frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(\mu_1 \bar{\mu}_2 + 1)(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2) + \bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12}) + \mu_{12} \bar{\mu}_2}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2}\end{aligned}\quad (4.64)$$

$$\begin{aligned}\partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} = & +b \frac{\bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ & - zb \frac{\mu_2(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 + \bar{\mu}_1 \mu_{12}}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ & + \frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_1 - \mu_2)(\mu_2 \bar{\mu}_1 + 1)(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1) + \bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12}) + \mu_{12} \bar{\mu}_1}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2}\end{aligned}\quad (4.65)$$

$$\begin{aligned}\partial_{\bar{\mu}_{12}} \mathcal{H} = & -b \frac{(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ & - zb \frac{(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ & + \frac{\alpha}{2} \frac{(\bar{\mu}_1 - \bar{\mu}_2)(\mu_1 - \mu_2)(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2}\end{aligned}\quad (4.66)$$

und für die Gram-Matrix erhalten wir:

$$G = \begin{pmatrix} (1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 + \mu_{12} \bar{\mu}_{12} & -\mu_1^2 \bar{\mu}_{12} - \bar{\mu}_2^2 \mu_{12} & \mu_2(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2) - \bar{\mu}_1 \mu_{12} \\ -\mu_2^2 \bar{\mu}_{12} - \bar{\mu}_1^2 \mu_{12} & (1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2 + \mu_{12} \bar{\mu}_{12} & \mu_1(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1) - \bar{\mu}_2 \mu_{12} \\ \bar{\mu}_2(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2) - \mu_1 \bar{\mu}_{12} & \bar{\mu}_1(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1) - \mu_2 \bar{\mu}_{12} & 1 + \mu_1 \bar{\mu}_1 + \mu_2 \bar{\mu}_2 \end{pmatrix} \frac{1}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2}.$$
(4.67)

Somit lassen sich die Bewegungsgleichungen der Parameter explizit aufschreiben:

$$i\dot{\mu}_1 = G_{1,1}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} + G_{1,2}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} + G_{1,3}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_{12}} \mathcal{H} \quad (4.68)$$

$$i\dot{\mu}_2 = G_{2,1}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} + G_{2,2}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} + G_{2,3}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_{12}} \mathcal{H} \quad (4.69)$$

$$i\dot{\mu}_{12} = G_{3,1}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} + G_{3,2}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} + G_{3,3}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_{12}} \mathcal{H}. \quad (4.70)$$

Die Ergebnisse sind deutlich komplexer als für den klassischen Ansatz. Zur Herleitung der Spindynamik würden sich deshalb numerische Methoden zur Lösung der Differentialgleichung ergeben, wobei die modifizierte Gram-Matrix Gl. (4.67) der Kürze halber auch numerisch invertiert werden kann, da eine direkte Inversion einen noch kompliziertere Matrix ergeben würde mit wenig neuer Erkenntnis.

## 5 Diskussion

Hier wird nun die klassische Lösung für den Zwei-Spin-Fall mit der exakten quantenmechanischen Lösung verglichen.

### 5.1 Quantenmechanische Lösung

Für die exakte quantenmechanische Lösung des Hamiltonoperators Gl. (4.59) wird der Hamiltonian diagonalisiert über die Basis:

$$|1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \quad (5.1)$$

$$|2\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad (5.2)$$

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}N_1} [(\epsilon_1 + 1) |\uparrow\downarrow\rangle + (\epsilon_1 - 1) |\downarrow\uparrow\rangle] \quad (5.3)$$

$$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}N_2} [(\epsilon_2 + 1) |\uparrow\downarrow\rangle + (\epsilon_2 - 1) |\downarrow\uparrow\rangle] \quad (5.4)$$

mit  $\epsilon_{1,2} = \frac{\alpha \pm \sqrt{b^2(1-z)^2 + \alpha^2}}{b(z-1)}$  und  $N_i = \sqrt{\epsilon_i^2 + 1}$ . Die dazugehörigen Eigenenergien lauten:

$$E_1 = \frac{b(1+z)}{2} + \frac{\alpha}{4} \quad (5.5)$$

$$E_2 = -\frac{b(1+z)}{2} + \frac{\alpha}{4} \quad (5.6)$$

$$E_3 = -\frac{\alpha}{4} + \frac{\sqrt{\alpha^2 + b^2(1-z)^2}}{2} \quad (5.7)$$

$$E_4 = -\frac{\alpha}{4} - \frac{\sqrt{\alpha^2 + b^2(1-z)^2}}{2}. \quad (5.8)$$

Über den Zeitentwicklungsoperator und einem beliebigen Startzustand  $|\Psi_0\rangle$ , lässt sich die zeitabhängige Wellenfunktion  $|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\Psi_0\rangle = \sum_j e^{-iE_j t} |j\rangle \langle j|\Psi_0\rangle$  definieren. Somit ist die Spindynamik beschrieben über

$$\langle \Psi | \hat{S}_\alpha | \Psi \rangle (t) = \sum_{i,j} e^{i(E_i - E_j)t} \langle i | \hat{S}_\alpha | j \rangle \langle j | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | i \rangle. \quad (5.9)$$



## 5.2 Exemplarischer Vergleich

Es wird der Produkt-Startzustand

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle_S + |\downarrow\rangle_S)(|\uparrow\rangle_I + i|\downarrow\rangle_I) \quad (5.10)$$

verwendet, welcher Äquivalent zu einem Elektronenspin Erwartungswert  $\langle\vec{S}\rangle$  entlang der X-Achse und orthogonal dazu einem Kernspin Erwartungswert  $\langle\vec{I}\rangle$  entlang der Y-Achse ist, beide auf der X-Y-Ebene liegend wie in Abbildung 5.1 zu sehen. Dieser Startzustand wurde unter all den möglichen Startzuständen gewählt, da dieser einen sehr einfachen und anschaulichen Fall darstellt, denn das Magnetfeld und beide Spinvektoren bilden ein Dreiein und gleich zu Beginn ist die Wirkung der Kopplungen untereinander durch die Orthogonalität am stärksten.

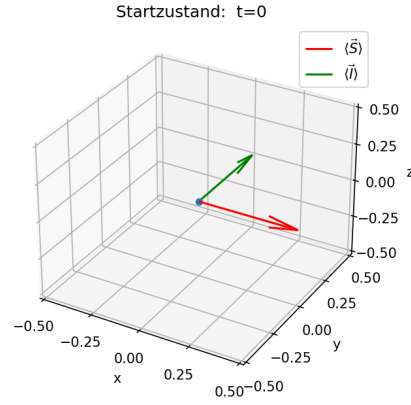
Dabei wird zur Lösung der Differentialgleichungen Gl. (4.54) und Gl. (4.55) das Runge-Kutta-Verfahren verwendet, da die Bewegungsgleichungen die Form besitzen:

$$\frac{d}{dt}\vec{f} = \vec{f}(\vec{t}). \quad (5.11)$$

In vorherigen Vergleichen zwischen Experiment und Theorie ergab sich für die charakteristische Zeit  $T^* \approx 1 \text{ ns}$ [10], woraus über Gl. (3.2) für die Heisenbergkopplungskonstante  $A = \sqrt{\frac{4}{3}} \cdot 10^9 \frac{1}{s}$  folgt. Des weiteren wird  $z = \frac{1}{800}$  und ein Magnetfeld mit  $B = 0.5 \text{ T}$  gewählt. Darüber hinaus wird die Zeitspanne so lang gewählt, dass die Umhüllende der summierten Spinlänge  $|\langle(\vec{S} + \vec{I})\rangle|$  der exakten Lösung in Abbildung 5.4 Panel (b) ihr erstes Minimum überschreitet.

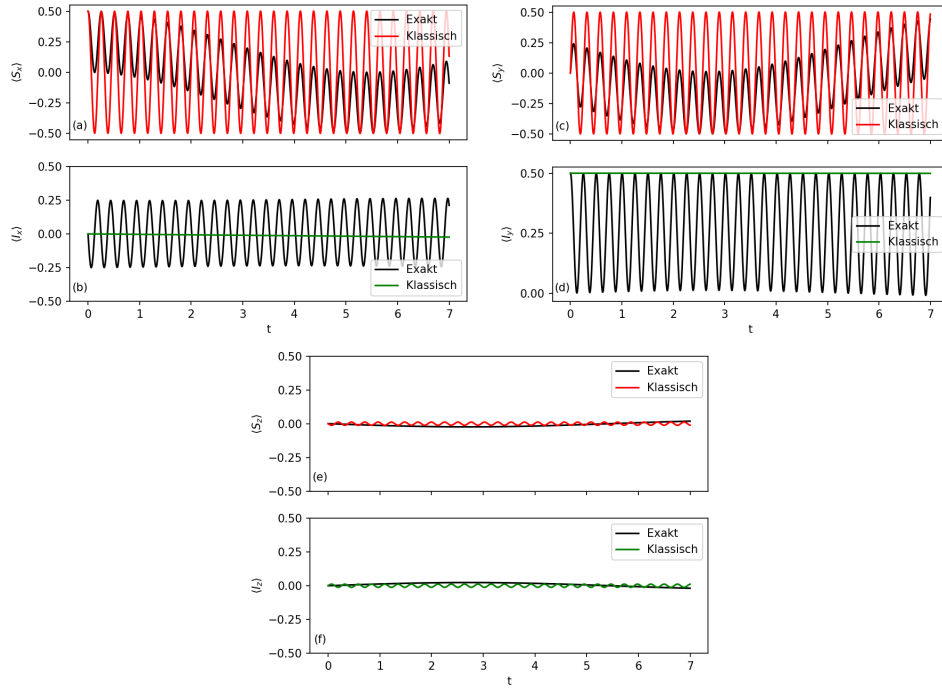
Aus Abbildung 5.2 Panel (e) und (f) ist sehr gut zu erkennen, dass durch die Heisenbergkopplung die Spin Erwartungswerte  $\langle\hat{S}_z\rangle$  und  $\langle\hat{I}_z\rangle$  um den Nullpunkt oszillieren und sehr kleine Amplituden besitzen, worauf geschlossen werden kann, dass die Spins einigermaßen auf der X-Y-Ebene verweilen und die Frequenz der klassischen Lösung deutlich größer ist als bei der Exakten.

Wie für die klassische Lösung zu erwarten, präzedieren Elektronen- und Kernspin um das in z-Achse ausgerichtete Magnetfeld, wobei durch die stärkere Kopplung die Larmorfrequenz für das Elektron deutlich größer ist. Dies macht sich besonders



**Abbildung 5.1:** gewählter Startzustand in einem 3D-Plot mit rotem Elektronenspin Erwartungswert und grünem Kernspin Erwartungswert als Vektoren dargestellt

## 5 Diskussion

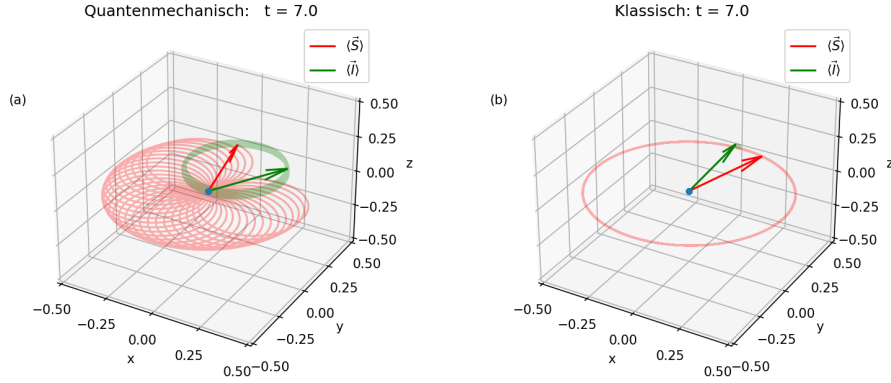


**Abbildung 5.2:** Spin-Erwartungswerte des Elektronenspins  $S$  (Rot) und des Kernspins (Grün) und der jeweils exakten quantenmechanischen Lösung (Schwarz) gegen die Zeit  $t$  aufgetragen für die Parameter:  $B = 0.5 \text{ T}$ ,  $T^* = 1 \text{ ns}$ ,  $A_k = \sqrt{\frac{4}{3}} \cdot 10^9 \frac{1}{s}$ ,  $z = \frac{1}{800}$ .

deutlich in Abbildung 5.2 Panel (b) und (d), wo die grüne Kurve (Kernspin) einer Geraden gleicht und zeitlich in Panel (a) und (c) im selben Zeitintervall die rote Kurve (Elektron) mehrere Oszillationen vollführt; oder wie in Abbildung 5.3 Panel (b), wo der grüne Spurverlauf (Kernspin) marginal kurz ist im Vergleich zur roten Kreisspur (Elektron), in der der Elektronenspin schon mindestens eine Kreisbahn abgefahren ist.

Die exakte Lösung berücksichtigt die Verschränkung beider Spins, welches sich hauptaugenscheinlich durch Veränderungen der Einzelspinlängen ausdrückt wie in Abbildung 5.4 Panel (a) und (b) zu sehen. Dabei sind beide Spinlängen in den Panels (a) zu jedem Zeitpunkt identisch, was am totalen Überlappen beider Plots zu sehen ist; dasselbe gilt auch für den klassischen Fall in Panel (c), wobei die Spinlängen konstant bei 0.5 bleiben.

In Abbildung 5.3 ist sehr gut zu erkennen, dass anders als im klassischen Fall (Panel (b)) die Spins im quantenmechanischem Fall (Panel (a)) Kreisbahnen abfahren, dessen Mittelpunkte nicht im Ursprung liegen, sondern gerade mittig zwischen Ur-



**Abbildung 5.3:** Spinerwartungswerte als Vektoren zum Endzeitpunkt des betrachteten Zeitraums zum genannten Startzustand samt abgefahrener Spur der quantenmechanischen Lösung (Links) und der klassischen Lösung (Rechts) für die Parameter:  $B = 0.5 \text{ T}$ ,  $T^* = 1 \text{ ns}$ ,  $A_k = \sqrt{\frac{4}{3}} \cdot 10^9 \frac{1}{s}$ ,  $z = \frac{1}{800}$ .

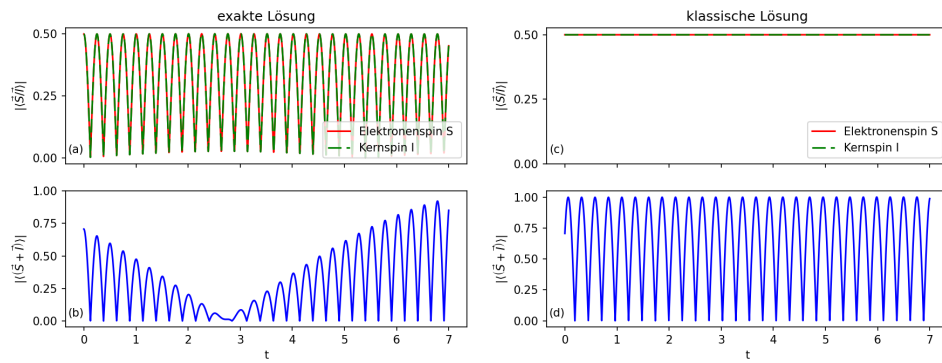
sprung und maximaler Spinlänge. Trotzdem ist eine Larmor-Präzessionsbewegung wie im Klassischen zu beobachten, in der nicht die Spinerwartungswerte präzedieren, sondern die jeweiligen Kreismittelpunkte, was zu den charakteristischen Schlaufen führt.

Dabei präzediert der Elektronenspin wie zu erwarten um einiges schneller als der schwachgekoppelte Kernspin um das Magnetfeld, welches gut in der ausgeprägten Schlaufenbildung in Abbildung 5.3 Panel (a) zu sehen ist.

Über Abbildung 5.3 Panel (a) lässt sich anschaulich erklären, wie sich der zeitliche Verlauf der Spinlängen  $|\langle \vec{S} + \vec{I} \rangle|$  der exakten Lösung in Abbildung 5.4 in Panel (b) zu Stande kommt. Die addierten Spinlängen oszillieren und sind von einer umhüllenden umschlossen, die ihr Minimum bei etwa  $t = 3$  besitzt. Dies entspricht in etwa der halben Zeitdauer des betrachteten Intervalls, woraus sich abschätzen lässt, dass in Abbildung 5.3 Panel (a) der Elektronenspin den halben Schlaufenverlauf erst abgefahren ist.

Dort liegen die Kreiszentren des Elektronenspin- und Kernspinerwartungswert gegenüber, wodurch sie nur antiparallele und keine parallelen Komponenten teilen und sich in der Vektorsumme kürzen. Eine analoge Betrachtung erklärt, deshalb warum die addierte Spinlänge jeweils an den beiden Enden des Zeitintervall über die Einzel-Spinlänge von 0.5 wächst.

In Abbildung 5.4 Panel (c) wird nochmal verdeutlicht, dass die Einzeispinlängen in der klassischen Lösung konstant bleiben, aber es in Panel (d) bei der addierten Spinlänge zu Oszillationen kommt, die von der Larmor-Frequenzdifferenz abhängen.



**Abbildung 5.4:** Spinlängen-Erwartungswert der Einzelspins und addierten Spins des Kern- und Elektronenspins der exakten Lösung(links) und der klassischen Lösung(rechts) gegen die Zeit aufgetragen für die Parameter:  $B = 0.5 \text{ T}$ ,  $T^* = 1 \text{ ns}$ ,  $A_k = \sqrt{\frac{4}{3}} \cdot 10^9 \frac{1}{s}$ ,  $z = \frac{1}{800}$ .

## 6 Zusammenfassung

Zusammenfassend konnte nachgewiesen werden, dass das TDVP mit dem klassischen Ansatz Gl. (4.17) die klassischen Lösungen reproduzieren konnte, in der die Spinlängen konstant bleiben. Dadurch ist zu erkennen, dass der vom klassischen Ansatz beschränkte Unterraum des Hilbertraumes zu klein ist, um die exakte Dynamik wiedergeben zu können. Die Erweiterung auf  $n$  1/2-Spins folgt durch den Produktansatz immer in analogen Schritten.

Wird bei den Ergebnissen des modifizierten Ansatzes der Korrekturparameter  $\mu_{12} = 0$  gesetzt, zerfallen wie zu erwarten die Gram-Matrix Gl. (4.67) und partiellen Ableitungen des modifizierten Hamiltonians Gl. (4.64) bis Gl. (4.66) in die klassischen Lösungen.

Im Rahmen dieser Bachelorarbeit wurde die Lösung der Differentialgleichungen Gl. (4.68) bis Gl. (4.70) nicht behandelt. Es ist aber naheliegend, da der modifizierte Ansatz den ganzen Hilbertraum abdeckt, sich die exakte Lösung reproduzieren lässt. Dadurch würde sich mit Ausblick zukünftiger Arbeiten, die sich mit diesem Thema beschäftigen, die Überprüfung der Exaktheit dieser Lösung als zentrale Aufgabenstellung ergeben.

Für den Fall, dass die Exaktheit erfolgreich nachgewiesen wurde, wäre die Erweiterung auf 1/2-Spin-Systeme mit auf  $n$  Spins die zentrale Aufgabe, denn dann dürften diese Korrekturparameter nicht mehr den gesamte Hilbertraum abdecken und Fehler sind höchstwahrscheinlich unvermeidbar. Da aber das zentrale Ziel den Rechenaufwand eines zu  $n$  exponentiell anwachsenden Hilbertraumes zu umgehen ist, ist ein gewisser Fehler tolerierbar und eventuell durch eine besondere Wahl von Quantenkorrekturparameter minimierbar. Anknüpfend würde ein Vergleich mit anderen semiklassischen Ansätzen sinnvoll sein.

## Literatur

- [1] Ethan Bernstein und Umesh Vazirani. „Quantum Complexity Theory“. In: *Proceedings of the Twenty-Fifth Annual ACM Symposium on Theory of Computing*. STOC '93. San Diego, California, USA: Association for Computing Machinery, 1993, S. 11–20. ISBN: 0897915917. DOI: 10.1145/167088.167097. URL: <https://doi.org/10.1145/167088.167097>.
- [2] N H Bonadeo et al. „Coherent optical control of the quantum state of a single quantum Dot“. en. In: *Science* 282.5393 (Nov. 1998), S. 1473–1476.
- [3] J. Broeckhove et al. „On the equivalence of time-dependent variational principles“. In: *Chemical Physics Letters* 149.5 (1988), S. 547–550. ISSN: 0009-2614. DOI: [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(88\)80380-4](https://doi.org/10.1016/0009-2614(88)80380-4). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009261488803804>.
- [4] P A M Dirac. „Note on exchange phenomena in the Thomas atom“. en. In: *Math. proc. Camb. Philos. Soc.* 26.3 (Juli 1930), S. 376–385.
- [5] Mikhail I Dyakonov, Hrsg. *Spin physics in semiconductors*. en. 2008. Aufl. Springer Series in Solid-State Sciences. Berlin, Germany: Springer, Aug. 2008.
- [6] J M Elzerman et al. „Single-shot read-out of an individual electron spin in a quantum dot“. en. In: *Nature* 430.6998 (Juli 2004), S. 431–435.
- [7] Sigurdur I. Erlingsson und Yuli V. Nazarov. „Evolution of localized electron spin in a nuclear spin environment“. In: *Phys. Rev. B* 70 (20 Nov. 2004), S. 205327. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.205327. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.70.205327>.
- [8] L. V. Fokina et al. „Spin dynamics of electrons and holes in InGaAs/GaAs quantum wells at millikelvin temperatures“. In: *Phys. Rev. B* 81 (19 Mai 2010), S. 195304. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.195304. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.195304>.
- [9] A Grelich et al. „Nuclei-induced frequency focusing of electron spin coherence“. In: *Science (New York, N.Y.)* 317.5846 (Sep. 2007), S. 1896–1899. ISSN: 0036-8075. DOI: 10.1126/science.1146850. URL: <https://doi.org/10.1126/science.1146850>.

- 
- [10] Johannes Hackmann und Frithjof B. Anders. „Spin noise in the anisotropic central spin model“. In: *Phys. Rev. B* 89 (4 Jan. 2014), S. 045317. DOI: 10.1103/PhysRevB.89.045317. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.045317>.
- [11] Jutho Haegeman et al. „Time-Dependent Variational Principle for Quantum Lattices“. In: *Physical Review Letters* 107.7 (Aug. 2011). DOI: 10.1103/physrevlett.107.070601. URL: <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevlett.107.070601>.
- [12] R Hanson et al. „Coherent dynamics of a single spin interacting with an adjustable spin bath“. en. In: *Science* 320.5874 (März 2008), S. 352–355.
- [13] Natalie Jäschke. „A Semiclassical Approach to the Spin Dynamics in a Singly Charged Semiconductor Quantum Dot“. Dissertation. TU Dortmund, 2019. URL: <http://dx.doi.org/10.17877/DE290R-20248>.
- [14] F. Jelezko et al. „Observation of Coherent Oscillation of a Single Nuclear Spin and Realization of a Two-Qubit Conditional Quantum Gate“. In: *Phys. Rev. Lett.* 93 (13 Sep. 2004), S. 130501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.130501. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.130501>.
- [15] B E Kane. „A silicon-based nuclear spin quantum computer“. In: *Nature* 393.6681 (Mai 1998), S. 133–137.
- [16] Magnunor. *Atomic resolution scanning transmission electron microscopy image of indium gallium arsenide quantum dot in gallium arsenide*. 2019. URL: [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Gaas\\_inas\\_quantum\\_dot.jpg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Gaas_inas_quantum_dot.jpg).
- [17] Yuriy Makhlin, Gerd Schön und Alexander Shnirman. „Quantum-state engineering with Josephson-junction devices“. In: *Rev. Mod. Phys.* 73 (2 Mai 2001), S. 357–400. DOI: 10.1103/RevModPhys.73.357. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.73.357>.
- [18] Peter Kramer und Marcos Saraceno. *Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1981. ISBN: 978-3-540-10579-4.
- [19] I. A. Merkulov, Al. L. Efros und M. Rosen. „Electron spin relaxation by nuclei in semiconductor quantum dots“. In: *Phys. Rev. B* 65 (20 Apr. 2002), S. 205309. DOI: 10.1103/PhysRevB.65.205309. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.205309>.
- [20] N F Mott und J Frenkel. „Waves mechanics: Advanced general theory. By J. frenkel pp. Viii, 525. 35s. 1934. (oxford)“. en. In: *Math. Gaz.* 18.229 (Juli 1934), S. 208–209.

- [21] Rayhem. *Bloch sphere; a geometrical representation of a two-level quantum system. Rendered with Asymptote*. 2012. URL: [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Bloch\\_Sphere.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Bloch_Sphere.svg).
- [22] Urban Seifert et al. „Persisting correlations of a central spin coupled to large spin baths“. In: *Phys. Rev. B* 94 (9 Sep. 2016), S. 094308. DOI: 10.1103/PhysRevB.94.094308. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.094308>.
- [23] P.W. Shor. „Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring“. In: *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*. 1994, S. 124–134. DOI: 10.1109/SFCS.1994.365700.
- [24] Peter W. Shor. „Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer“. In: *SIAM J. Comput.* 26.5 (Okt. 1997), S. 1484–1509. ISSN: 0097-5397. DOI: 10.1137/S0097539795293172. URL: <https://doi.org/10.1137/S0097539795293172>.
- [25] S Spatzek et al. „Optical control of coherent interactions between electron spins in InGaAs quantum dots“. en. In: *Phys Rev Lett* 107.13 (Sep. 2011), S. 137402.
- [26] Bernhard Urbaszek et al. „Nuclear spin physics in quantum dots: An optical investigation“. In: *Rev. Mod. Phys.* 85 (1 Jan. 2013), S. 79–133. DOI: 10.1103/RevModPhys.85.79. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.85.79>.
- [27] L. M. K. Vandersypen und I. L. Chuang. „NMR techniques for quantum control and computation“. In: *Rev. Mod. Phys.* 76 (4 Jan. 2005), S. 1037–1069. DOI: 10.1103/RevModPhys.76.1037. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.76.1037>.



# Eidesstattliche Versicherung

(Affidavit)

Rezik, Salem Bassit

Name, Vorname  
(surname, first name)

221238

Matrikelnummer  
(student ID number)

☒ Bachelorarbeit  
(Bachelor's thesis)

☐ Masterarbeit  
(Master's thesis)

Titel  
(Title)

Variationeller Ansatz zur Spindynamik in Quantenpunkten

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Abschlussarbeit mit dem oben genannten Titel selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

I declare in lieu of oath that I have completed the present thesis with the above-mentioned title independently and without any unauthorized assistance. I have not used any other sources or aids than the ones listed and have documented quotations and paraphrases as such. The thesis in its current or similar version has not been submitted to an auditing institution before.

Berlin, 23.10.22

Ort, Datum  
(place, date)



Unterschrift  
(signature)

## Belehrung:

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt, handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 € geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden. (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG - ).

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird ggf. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software „turnitin“) zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen:

## Official notification:

Any person who intentionally breaches any regulation of university examination regulations relating to deception in examination performance is acting improperly. This offense can be punished with a fine of up to EUR 50,000.00. The competent administrative authority for the pursuit and prosecution of offenses of this type is the Chancellor of TU Dortmund University. In the case of multiple or other serious attempts at deception, the examinee can also be unenrolled, Section 63 (5) North Rhine-Westphalia Higher Education Act (*Hochschulgesetz, HG*).

The submission of a false affidavit will be punished with a prison sentence of up to three years or a fine.

As may be necessary, TU Dortmund University will make use of electronic plagiarism-prevention tools (e.g. the "turnitin" service) in order to monitor violations during the examination procedures.

I have taken note of the above official notification:\*

Berlin, 23.10.22

Ort, Datum  
(place, date)



Unterschrift  
(signature)

\*Please be aware that solely the German version of the affidavit ("Eidesstattliche Versicherung") for the Bachelor's/ Master's thesis is the official and legally binding version.