

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science

Semiklassischer Variationsansatz 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 Uhrig
Abgabedatum: 25.10.2022

Kurzfassung

Hier steht eine Kurzfassung der Arbeit in deutscher Sprache inklusive der Zusammenfassung der Ergebnisse. Zusammen mit der englischen Zusammenfassung muss sie auf diese Seite passen.

Abstract

The abstract is a short summary of the thesis in English, together with the German summary it has to fit on this page.

Inhaltsverzeichnis

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[10.1145/167088.167097].

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[365700, 10.1137/S0097539795293172].

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[PhysRevLett.93.130501, Hanson2008-tn], Kernspin von Molekülen in Flüssigkeiten[RevModPhys.76.1037], Supraleitende Schaltkreise[RevModPhys.73.357] und Phosphorunreinheiten im Silikon[Kane1998-pc].

Der Realisierungsvorschlag, mit der sich diese Arbeit beschäftigt, ist den Spin eines

in einem Quantenpunkt eingefangenen Elektrons zu verwenden[**Elzerman2004-wu**, **Bonadeo1998-nr**, **PMID:17901328**, **Fokina__2010**, **Spatzek2011-rn**]. Um die 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.

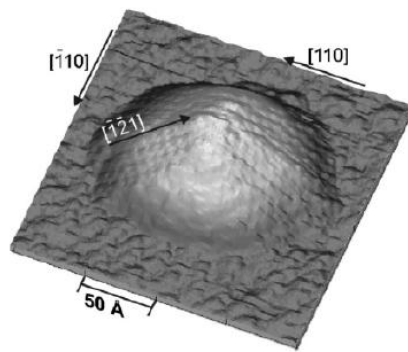


Abbildung 2.1: Automatisch aufgelöstes Bild eines InAs-Quantenpunktes[doi:10.1063/1.1365101]

Die hier betrachteten 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, wodurch Spannung zwischen beiden Materialien entsteht.

Diese Spannung bewirkt eine Formationen von InAs-Inseln wie in ?? zu sehen, die nur wenige zehn Nanometer groß sind, und verändert selbst die elektronische Eigenschaften, hauptsächlich den elektrischen Feldgradienten des Quantenpunktes. Nun wird GaAs auf das ganze Substrat gewachsen, so dass die InAs-Inseln vollständig

2 Quantenpunkte

von dem GaAs umschlossen sind. Diese umschlossenen InAs-Inseln bilden dann explizit den Quantenpunkt.

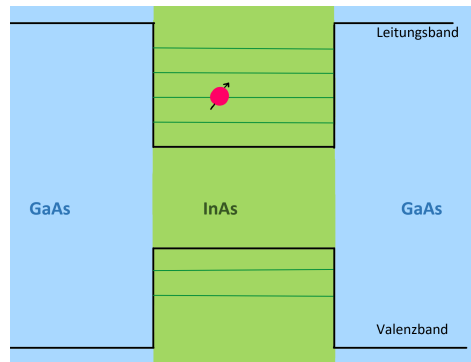


Abbildung 2.2: Schematische räumliche Bandstruktur eines In(Ga)As/GaAs-Quantenpunktes mit den relevanten Bändern und einem gefangenen Ladungsträger

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 eingefangen werden 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. Dies ist vorteilhaft, da eine kurze Dekohärenzzeit ein Hauptproblem bei der Realisierung des Quantencomputers ist.

In ?? 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.

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

Dabei entspricht anders als beim freien Elektron der g-Faktor eines Elektron im Quantenpunkt nicht mehr 2, sondern ca. 0,555. [PMID:17901328] Das Kernmagneton $\mu_k = 5,05 \cdot 10^{27} \frac{J}{T}$ ist etwa 1800 Mal kleiner als das Bohrsche Magneton $\mu_B = 9,27 \cdot 10^{24} \frac{J}{T}$ [Dyakonov2008-ub]. Die g-Faktoren g_k können für alle Kernspins der Einfachheit halber als gleich angenommen werden.

Im folgenden wird die charakteristische Zeitskala T^* verwendet, welcher den Einfluss der führenden Ordnung des Materials, mit der ein einzelnes Elektron in eine , that describes the leading order impact of the material, which forms the confinement potential to trap a single electron or hole, on the central spin dynamics

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

Nun kann der dimensionslose Hamiltonian $\hat{H}_{CSM} = T^* \hat{H}_{CSM}$ hingeschrieben werden:

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

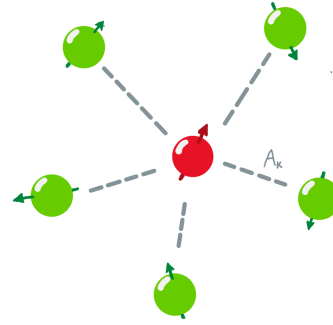


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau des Zentralspinmodell mit dem Elektronenspins (Rot) und den in direkter Umgebung liegenden Kernspins (Grün) und einer Kopplungskonstante A_k

3 Zentralspinmodell

mit $\vec{b} = T^* \mu_B g_e \vec{B}$, der Zeeman-Konstante $z_k = T^* \frac{\mu_I g_k}{\mu_B g_e}$ und $\alpha_k = T^* A_k$.

4 Variationsprinzip

Es gibt viele Ansätze den Hamiltonian des Central Spin Modells zu lösen, die von der exakten Lösung über semiklassischen Ansätzen[**PhysRevB.65.205309**, **PhysRevB.94.094308**, **PhysRevB.70.205327**, **NatalieJaeschke**] bishin zum Chebychev Expansionstheorem reichen[**PhysRevB.89.045317**], 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 immer öfter 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 konjugierte Variablen $\vec{\mu}$ mit einem Oberbalken notiert.

Die zeitabhängige Schrödingergleichung kann durch Extermisierung des Wirkungsfunktional

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

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

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

hergeleitet werden. Der Kürze halber wird die explizite Zeitabhängigkeit von 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. Eleganter ist die geometrische Interpretation zur Herleitung der Euler-Lagrange-Gleichungen zu verwenden, in der 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 Grammatrix $(G_{i,j})^{-1}$ auf, damit u.a. die Projektionsoperatoreigenschaft $\hat{P}_{T_\mu M}^2 = \hat{P}_{T_\mu M}$ erfüllt ist. Über einen Koeffizientenvergleich zwischen

$$\hat{P}_{T_\mu M} \hat{H}|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \left((G_{i,j})^{-1} \langle \partial_{\mu_j}\Psi | \hat{H}|\Psi\rangle \right) |\partial_{\mu_i}\Psi\rangle \quad (4.7)$$

und aus (??)

$$i \sum_k \dot{\mu}_k |\partial_{\mu_k}\Psi\rangle \quad (4.8)$$

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

$$i\dot{\mu}_i = \sum_j (G_{ij})^{-1} \langle \partial_{\mu_j}\Psi | \hat{H}|\Psi\rangle \quad (4.9)$$

mit

$$G_{ij} = \langle \partial_{\mu_i}\Psi | \partial_{\mu_j}\Psi \rangle. \quad (4.10)$$

Da in dieser Arbeit ein nicht-normierter Wellenfunktionsansatz verwendet wird, ist der verallgemeinerte Fall von besonderem Interesse. Der 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

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

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 $|\partial_{\mu_i} \Psi\rangle$ 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

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

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

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

Eine explizite Herleitung ist in [P. Kramer and M. Saraceno, Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics (Springer-Verlag, Berlin) (1981)][noauthor_2008-dn] und subsequent in Jutho Haegeman et al. „Time-Dependent Variational Principle for Quantum Lattices“[Haegeman_2011] zu finden.

4.1 Wahl der Wellenfunktion für einen klassischen Ansatz

Zur Vereinfachung werden alle Kernspins (wie der Elektronenspin) als 1/2-Spins angenommen. Die Wellenfunktion $|\Psi\rangle = |\Psi(\mu_1(t), \dots, \mu_n(t))\rangle$ enthält die zeitabhängigen Parameter $\mu_i(t)$ und realisiert einen kohärenten Zustand. Wir nutzen die Geometrie des 1/2-Spins aus und verwenden zur Darstellung die bekannte **Bloch-Sphäre**. Ähnlich wie die komplexe e-Funktion dank trigonometrische Eigenschaften einen Kreis auf der Zahlenebene abbilden kann, ist es auch möglich, jeden Punkt auf einer Kugel zu beschreiben. Die folgende unnormierte Wellenfunktion

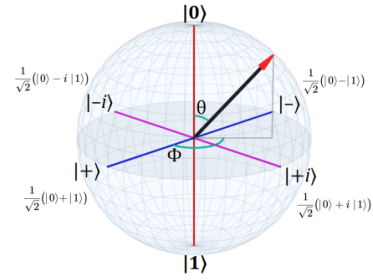


Abbildung 4.1: Schematischer Aufbau einer Bloch-Sphäre

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

wird in den folgenden Abschnitten Verwendung finden mit dem Normierungsfaktor

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

Es wird der Ansatz aus Gl. (??) verwendet ohne den Normierungsfaktor, da das TDVP nur eine analytische Wellenfunktion variieren kann, der Normierungsfaktor ist durch das Auftauchen von μ_i und dem konjugierten $\bar{\mu}_i$ nicht analytisch. Es kann aber immer noch auf die verallgemeinerte Euler-Lagrange-Gleichungen Gl. (??) zurückgegriffen werden.

4.2 ein 1/2-Spin 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:

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

Im folgenden haben wir uns 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

$$|\mu\rangle = e^{i\phi} \frac{1}{\sqrt{1 + \mu\bar{\mu}}} |\uparrow\rangle + e^{i\phi} \frac{\mu}{\sqrt{1 + \mu\bar{\mu}}} |\downarrow\rangle \quad (4.19)$$

wobei der Zustand $e^{i\phi} |\uparrow\rangle$ durch $\mu = 0$ und der Zustand $e^{i\phi} |\downarrow\rangle$ als Grenzwert für $|\mu| \rightarrow \infty$ erreicht werden können. Der Hamilton-Operator für einen Spin in einem Magnetfeld \vec{B} lautet

$$\hat{H}_1 = \vec{b} \hat{S} = (b_x \hat{S}_x + b_y \hat{S}_y + b_z \hat{S}_z) \quad (4.20)$$

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

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

$$+ \frac{b_z}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|), \quad (4.23)$$

wobei der Lande-Faktor des freien Elektrones $g_e \approx 2$ ist. Der Spin-Vektoroperator hat die Form $\hat{S} = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)^T$ mit den Pauli-Matrizen $\hat{\sigma}_i$. und 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 unabhängigen modifizierte Gram-Matrix G_{ii} bestimmt, welche in diesem Fall eindimensional 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 ?? liefert:

$$i\dot{\mu}_i = \sum_j (G_{ij})^{-1} \partial_{\mu_j} \mathcal{H} = (G_{11})^{-1} \partial_{\bar{\mu}} \mathcal{H} \quad (4.27)$$

$$= \frac{b_x}{2}(1 - \mu^2) + \frac{ib_y}{2}(1 + \mu^2) - \mu b_z \quad (4.28)$$

$$\Leftrightarrow \dot{\mu} = \frac{1}{2}(b_y + ib_x)\mu^2 + \frac{1}{2}(b_y - ib_x) + i\mu b_z. \quad (4.29)$$

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

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} + \mu}{1 + \mu\bar{\mu}} = \frac{\text{Re}[\mu]}{1 + \mu\bar{\mu}} \quad (4.30)$$

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{i}{2} \frac{\bar{\mu} - \mu}{1 + \mu\bar{\mu}} = \frac{\text{Im}[\mu]}{1 + \mu\bar{\mu}} \quad (4.31)$$

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{1}{2} \frac{1 - \mu\bar{\mu}}{1 + \mu\bar{\mu}}. \quad (4.32)$$

Unter Verwendung der Identität

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S}_\alpha | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = \partial_\mu \left[\frac{\langle \Psi | \hat{S}_\alpha | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] \dot{\mu} + \partial_{\bar{\mu}} \left[\frac{\langle \Psi | \hat{S}_\alpha | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] \dot{\bar{\mu}} \quad (4.33)$$

ergeben sich die Bewegungsgleichungen der Form

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = \vec{b} \times \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right). \quad (4.34)$$

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

4.3 Zwei Spins: Klassischer Ansatz

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

$$|\Psi\rangle = \alpha_1 |\uparrow\uparrow\rangle + \alpha_2 |\downarrow\uparrow\rangle + \alpha_3 |\uparrow\downarrow\rangle + \alpha_4 |\downarrow\downarrow\rangle \quad (4.35)$$

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

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= e^{\mu_1 \hat{S}^-} e^{\mu_2 \hat{I}^-} |\uparrow, \uparrow\rangle \\ &= |\uparrow\uparrow\rangle + \mu_1 |\downarrow\uparrow\rangle + \mu_2 |\uparrow\downarrow\rangle + \mu_1 \mu_2 |\downarrow\downarrow\rangle \\ &= \underbrace{(|\uparrow\rangle_1 + \mu_1 |\downarrow\rangle_1)}_{|\Psi_1\rangle} \underbrace{(|\uparrow\rangle_2 + \mu_2 |\downarrow\rangle_2)}_{|\Psi_2\rangle}. \end{aligned} \quad (4.36)$$

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 μ_0 zusammengefasst

$$\underbrace{N e^{i\phi}}_{=\mu_0} |\Psi\rangle = \underbrace{\mu_0}_{\alpha_1} |\uparrow\uparrow\rangle + \underbrace{\mu_0 \mu_1}_{\alpha_2} |\downarrow\uparrow\rangle + \underbrace{\mu_0 \mu_2}_{\alpha_3} |\uparrow\downarrow\rangle + \underbrace{\mu_0 \mu_1 \mu_2}_{\alpha_4} |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (4.37)$$

lässt sich erkennen, dass α_1, α_2 und α_3 unabhängig sind, aber α_4 gerade von α_1, α_2 und α_3 abhängig ist. Dadurch wird der Hilbertraum auf einen Unterraum beschränkt. Der Hamiltonoperator des Zentralspinmodells für den zwei 1/2-Spin Fall lautet

$$\hat{H}_{CSM} = \vec{b} \hat{S} + z \vec{b} \hat{I} + \alpha \hat{S} \hat{I}. \quad (4.38)$$

Damit ergibt sich für die effektive Hamilton-Funktion:

$$\mathcal{H} = \frac{\langle \Psi | \hat{H}_1 | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H}_2 | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (4.39)$$

mit

$$\langle \Psi | \hat{H}_1 | \Psi \rangle = \frac{1}{2} (1 + \mu_2 \bar{\mu}_2) (b_x (1 - \mu_1^2) + i b_y (1 + \mu_1^2) - 2 \mu_1 b_z) \quad (4.40)$$

$$\langle \Psi | \hat{H}_2 | \Psi \rangle = \frac{z}{2} (1 + \mu_1 \bar{\mu}_1) (b_x (1 - \mu_2^2) + i b_y (1 + \mu_2^2) - 2 \mu_2 b_z) \quad (4.41)$$

$$\langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle = \frac{\alpha}{4} [(\mu_1 + \bar{\mu}_1)(\mu_2 + \bar{\mu}_2) - (\mu_1 - \bar{\mu}_1)(\mu_2 - \bar{\mu}_2) + (1 - \mu_1 \bar{\mu}_1)(1 - \mu_2 \bar{\mu}_2)] \quad (4.42)$$

Und wir erhalten die partiellen Ableitungen:

$$\begin{aligned} \partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} &= \underbrace{\frac{1}{2(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2} [b_x(1 - \mu_1^2) + i b_y(1 + \mu_1^2) - b_z \mu_1]}_{=\partial_{\bar{\mu}_1} \frac{\langle \Psi | \hat{H}_1 + \hat{H}_2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \\ &\quad + \underbrace{\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(1 + \mu_1 \bar{\mu}_2)}{(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 (1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)}}_{=\partial_{\bar{\mu}_1} \frac{\langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \end{aligned} \quad (4.43)$$

$$\begin{aligned} \partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} &= \underbrace{\frac{z}{2(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2} [b_x(1 - \mu_2^2) + i B_y(1 + \mu_2^2) - B_z \mu_2]}_{=\partial_{\bar{\mu}_2} \frac{\langle \Psi | \hat{H}_1 + \hat{H}_2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \\ &\quad + \underbrace{\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_1 - \mu_2)(1 + \mu_2 \bar{\mu}_1)}{(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2}}_{=\partial_{\bar{\mu}_2} \frac{\langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Zudem ergibt sich die modifizierte Gram-Matrix

$$G = \begin{pmatrix} (1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 & 0 \\ 0 & (1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2 \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2} \end{pmatrix}, \quad (4.46)$$

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

$$i\dot{\mu}_1 = \sum_j (G_{1j})^{-1} \partial_{\bar{\mu}_j} \mathcal{H} \quad (4.47)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2} b_x(1 - \mu_1^2) + \frac{i}{2} b_y(1 + \mu_1^2) - \mu_1 b_z}_{\text{Ein-Spin-Präzession um } \vec{b}} + \underbrace{\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(1 + \mu_1 \bar{\mu}_2)}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2}}_{\text{Ein-Spin-Präzession um } \frac{\langle \Psi | \hat{I} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \quad (4.48)$$

und in analoger Weise

$$i\dot{\mu}_2 = \underbrace{\frac{z}{2} b_x(1 - \mu_2^2) + \frac{iz}{2} b_y(1 + \mu_2^2) - \mu_2 z b_z}_{\text{Ein-Spin-Präzession um } \vec{b}} + \underbrace{\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_1 - \mu_2)(1 + \mu_2 \bar{\mu}_1)}{1 + \mu_1 \bar{\mu}_1}}_{\text{Ein-Spin-Präzession um } \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}}. \quad (4.49)$$

Aufgrund der Linearität der Differentialgleichungen ist dank Gl. (??) 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. (??) die $b_{x,y,z}$ durch $\alpha \frac{\langle \Psi | \hat{I}_{x,y,z} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$ ausgetauscht werden

$$\frac{\alpha}{2} \left[\underbrace{\frac{1}{2} \frac{\mu_2 + \bar{\mu}_2}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2}}_{\frac{\langle \Psi | \hat{I}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} (1 - \mu_1^2) + i \underbrace{\frac{\bar{\mu}_2 - \mu_2}{2} \frac{1 - \mu_1^2}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2}}_{\frac{\langle \Psi | \hat{I}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} - 2\mu_1 \underbrace{\frac{1}{2} \frac{1 - \mu_2 \bar{\mu}_2}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2}}_{\frac{\langle \Psi | \hat{I}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \right], \quad (4.50)$$

denn einfaches Auflösen führt ebenfalls zu

$$\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(1 + \mu_1 \bar{\mu}_2)}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2}. \quad (4.51)$$

Dies entspricht gerade dem zweiten Summanden in Gl. (??) und (??). 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:

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\langle \Psi | \hat{S}_i | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] = \left(\vec{b} + \alpha \frac{\langle \Psi | \hat{I}_i | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \times \frac{\langle \Psi | \hat{S}_i | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (4.52)$$

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\langle \Psi | \hat{I}_i | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] = \left(z\vec{b} + \alpha \frac{\langle \Psi | \hat{S}_i | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \times \frac{\langle \Psi | \hat{I}_i | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (4.53)$$

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 μ_{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:

$$|\Psi(\mu_1, \mu_2, \mu_{12})\rangle = e^{\mu_1 S_1^-} e^{\mu_2 S_2^-} e^{\mu_{12} S_1^- S_2^-} |\uparrow, \uparrow\rangle \quad (4.54)$$

$$= |\uparrow\uparrow\rangle + \mu_1 |\downarrow\uparrow\rangle + \mu_2 |\uparrow\downarrow\rangle + (\mu_1 \mu_2 + \mu_{12}) |\downarrow\downarrow\rangle \quad (4.55)$$

Wird die Phasenfreiheit und die Normierung berücksichtigt und unter einem komplexen Parameter μ_0 zusammengefasst

$$\underbrace{N e^{i\phi}}_{=\mu_0} |\Psi\rangle = \underbrace{\mu_0}_{\alpha_1} |\uparrow\uparrow\rangle + \underbrace{\mu_0 \mu_1}_{\alpha_2} |\downarrow\uparrow\rangle + \underbrace{\mu_0 \mu_2}_{\alpha_3} |\uparrow\downarrow\rangle + \underbrace{\mu_0 (\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})}_{\alpha_4} |\downarrow\downarrow\rangle \quad (4.56)$$

wie in ?? lässt sich erkennen, dass die Parameter voneinander wieder nicht unabhängig sind bzw. dass die Hyperebene für den $\alpha_1 = \mu_0 = 0$ nicht erreicht werden kann. Dementgegen sind dafür die α_4 -Werte durch den zusätzlichen Parameter μ_{12} weitestgehend unabhängig, wodurch bis auf die Hyperebene alle Zustände erreicht werden sollten.

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 zu:

$$\hat{H} = \vec{b}\hat{S}_z + z\vec{b}\hat{I}_z + \alpha\hat{S}\hat{I} \quad (4.57)$$

Mit diesem Ansatz erhalten wir nach längerer Rechnung den modifizierten Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = \frac{\langle \Psi | \hat{H}_1 | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H}_2 | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (4.58)$$

mit

$$\langle \Psi | \hat{H}_1 | \Psi \rangle = \frac{b}{2} [1 - \mu_1 \bar{\mu}_1 + \mu_2 \bar{\mu}_2 - (\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})(\overline{\mu_1 \mu_2} + \bar{\mu}_{12})] \quad (4.59)$$

$$\langle \Psi | \hat{H}_2 | \Psi \rangle = \frac{zb}{2} [1 - \mu_2 \bar{\mu}_2 + \mu_1 \bar{\mu}_1 - (\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})(\overline{\mu_1 \mu_2} + \bar{\mu}_{12})] \quad (4.60)$$

$$\langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle = \frac{\alpha}{4} [2(\bar{\mu}_1 \mu_2 + \mu_1 \bar{\mu}_2) + 1 - \mu_1 \bar{\mu}_1 - \mu_2 \bar{\mu}_2 + (\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})(\overline{\mu_1 \mu_2} + \bar{\mu}_{12})] \quad (4.61)$$

Damit folgen für die partiellen Ableitungen nach den konjugierten Parameter

$$\begin{aligned}\partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} = & -b \frac{\mu_1(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2 + \bar{\mu}_2 \mu_{12}}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ & + zb \frac{\bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ & + \frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(\mu_1 \bar{\mu}_2 + 1)(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2) + \bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12}) + \mu_{12} \bar{\mu}_2}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2}\end{aligned}\quad (4.62)$$

$$\begin{aligned}\partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} = & +b \frac{\bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ & - zb \frac{\mu_2(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 + \bar{\mu}_1 \mu_{12}}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ & + \frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_1 - \mu_2)(\mu_2 \bar{\mu}_1 + 1)(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1) + \bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12}) + \mu_{12} \bar{\mu}_1}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2}\end{aligned}\quad (4.63)$$

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

Und für die Gram-Matrix erhalten wir:

$$G = \begin{pmatrix} (1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 + \mu_{12} \bar{\mu}_{12} & -\mu_1^2 \bar{\mu}_{12} - \bar{\mu}_2^2 \mu_{12} & \mu_2(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2) - \bar{\mu}_1 \mu_{12} \\ -\mu_2^2 \bar{\mu}_{12} - \bar{\mu}_1^2 \mu_{12} & (1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2 + \mu_{12} \bar{\mu}_{12} & \mu_1(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1) - \bar{\mu}_2 \mu_{12} \\ \bar{\mu}_2(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2) - \mu_1 \bar{\mu}_{12} & \bar{\mu}_1(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1) - \mu_2 \bar{\mu}_{12} & 1 + \mu_1 \bar{\mu}_1 + \mu_2 \bar{\mu}_2 \end{pmatrix} \frac{1}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2}\quad (4.65)$$

Somit lassen sich die Bewegungsgleichungen der Parameter explizit aufschreiben:

$$i\dot{\mu}_1 = G_{1,1}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} + G_{1,2}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} + G_{1,3}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_3} \mathcal{H}\quad (4.66)$$

$$i\dot{\mu}_2 = G_{2,1}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} + G_{2,2}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} + G_{2,3}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_3} \mathcal{H}\quad (4.67)$$

$$i\dot{\mu}_{12} = G_{3,1}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} + G_{3,2}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} + G_{3,3}^{-1} \partial_{\bar{\mu}_3} \mathcal{H}\quad (4.68)$$

5 Vergleich

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, 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:

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

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

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

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

$$(5.9)$$

Über den Zeitentwicklungsoperator und einem beliebigen Startzustand $|\Psi_0\rangle$, lässt sich die Spindynamik hinschreiben als:

$$\langle \Psi | \hat{S}_\alpha | \Psi \rangle = \sum_{i,j} e^{i(E_i - E_j)t} \langle i | \hat{S}_\alpha | j \rangle \langle j | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | i \rangle \quad (5.10)$$

5.2 exemplarischer Vergleich

Es wird der Startzustand

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle_S + |\downarrow\rangle_S)(|\uparrow\rangle_I + i|\downarrow\rangle_I) \quad (5.11)$$

verwendet, welcher Äquivalent zu eine Elektronenspinerwartungswert $\langle \vec{S} \rangle$ entlang der X-Achse und orthogonal dazu dem Kernspinerwartungswert $\langle \vec{I} \rangle$ entlang der Y-Achse, beide auf der X-Y-Ebene liegend wie in ?? zu sehen. Unter all den möglichen Startzuständen gewählt, da dies ein sehr einfachen und anschaulichen Fall darstellt, da das Magnetfeld und beide Spinvektoren ein Dreiein bilden und gleich zu Beginn die Wirkung der Kopplungen unter einander durch die Orthogonalität am stärksten ist.

Dabei wird zur Lösung der Differentialgleichungen ?? und ?? zu lösen, wird das Runge-Kutta-Verfahren verwendet, da die Bewegungsgleichungen die Form besitzen:

$$\frac{d}{dt}\vec{f} = \vec{f}(\vec{t}) \quad (5.12)$$

In vorherigen Vergleichen zwischen Experiment und Theorie ergab sich für die charakteristische Zeit $T^* \approx 1 \text{ ns}$ [PhysRevB.89.045317], woraus für die Heisenbergkopplungskonstante $A_k = \sqrt{\frac{4}{3}} \cdot 10^9 \frac{1}{s}$ folgt. Die Zeeman-Konstante beträgt hier $z \approx \frac{1}{800}$. Es wird ein Magnetfeld mit $B = 0.5 \text{ T}$ gewählt, darüber hinaus wird die Zeitspanne so lang gewählt, dass die die Umhüllende der summierten Spinlänge $|\langle (\vec{S} + \vec{I}) \rangle|$ der exakten Lösung in ?? ihr erstes Minimum überschreitet.

Aus ?? ist sehr gut zu erkennen, dass durch die Heisenbergkopplung die Spinerwartungswerte $\langle \hat{S}_z \rangle$ 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

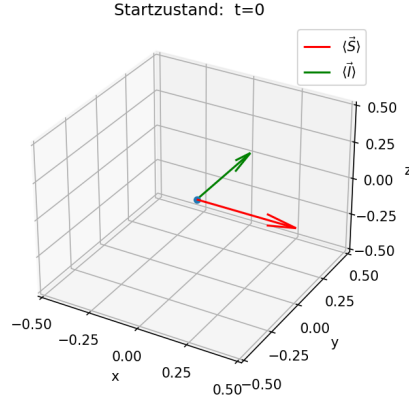


Abbildung 5.1: gewählter Startzustand in einem 3D-Plot mit rotem Elektronenspinerwartungswert und grünem Kernspinerwartungswert als Vektoren dargestellt

5 Vergleich

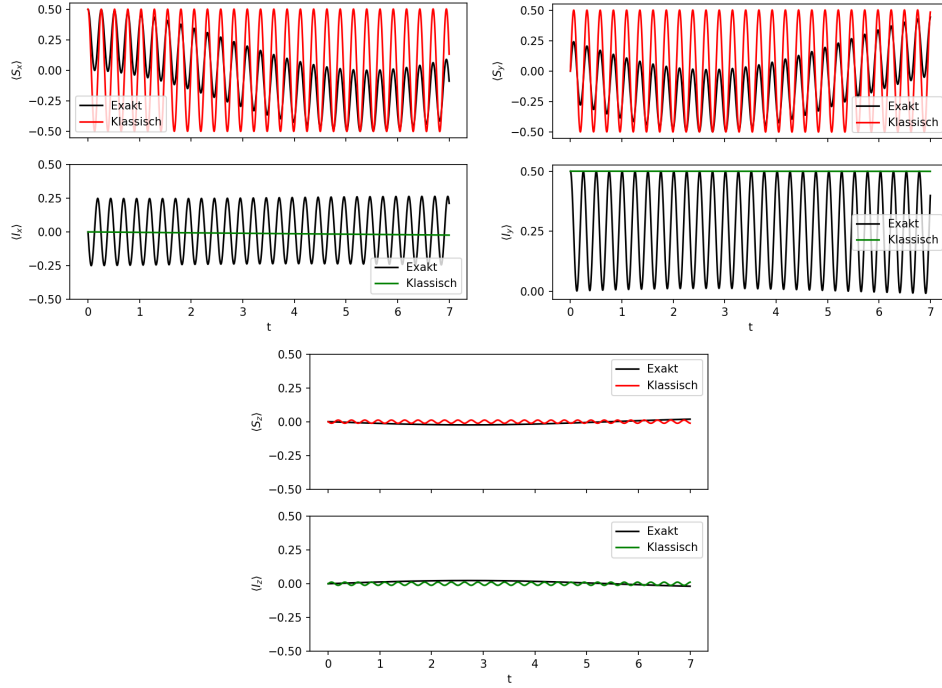


Abbildung 5.2: Spin-Erwartungswerte des Elektronenspins S (Rot) und des Kernspins (Grün) und der jeweils exakten quantenmechanischen Lösung (Schwarz) gegen die Zeit t aufgetragen für die Parameter: $B = 0.5 \text{ T}$, $T^* = 1 \text{ ns}$, $A_k = \sqrt{\frac{4}{3}} \cdot 10^9 \frac{1}{s}$, $z = \frac{1}{800}$

deutlich in ??, wo die grüne Kurve (Kernspin) wie eine Gerade mit leichter Steigung bzw. Senkung aussieht und zeitlich im selben Zeitintervall die rote Kurve (Elektron) mehrere Oszillationen vollführt; oder wie in ??, wo der grüne Spurverlauf (Kernspin) marginal kurz ist im Vergleich zur roten Kreisspur (Elektron), wo 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 ?? zu sehen. Dabei sind beide Spinlängen zu jedem Zeitpunkt identisch, was am totalen Überlappen beider Plots zu sehen ist; dasselbe gilt auch für den klassischen Fall, wobei die Spinlängen konstant bei 0.5 bleiben.

In ?? ist sehr gut zu erkennen, dass anders als im klassischen Fall die Spins Kreisbahnen abfahren, dessen Mittelpunkte nicht im Ursprung liegen, sondern gerade mittig zwischen Ursprung und maximaler Spinlänge. Trotzdem ist eine Larmor-Präzessionsbewegung wie im Klassischen zu beobachten, in der nicht die

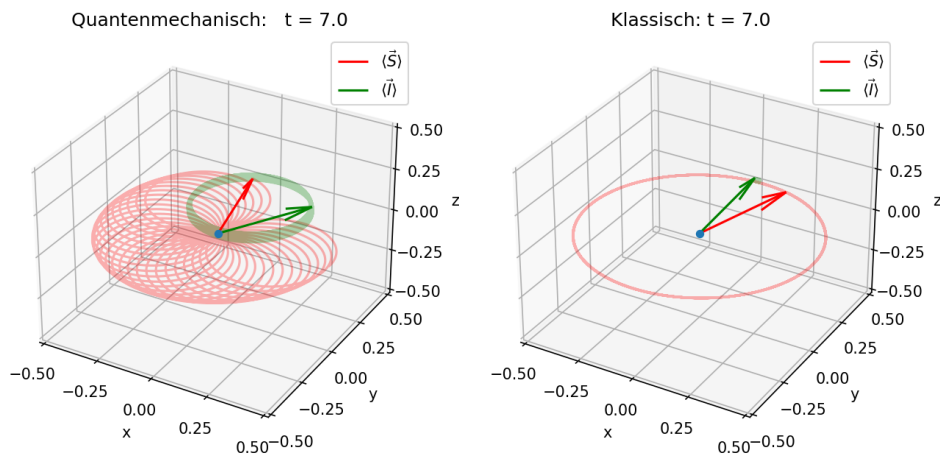


Abbildung 5.3: Spinerwartungswerte als Vektoren zum Endzeitpunkt des betrachteten Zeitraums zum genannten Startzustand samt abgefahrener Spur der quantenmechanischen Lösung (Links) und der klassischen Lösung (Rechts) für die Parameter: $B = 0.5 \text{ T}$, $T^* = 1 \text{ ns}$, $A_k = \sqrt{\frac{4}{3}}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

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. Damit lässt sich auch erklären, warum die addierte Spinlänge $|\langle \vec{S} + \vec{I} \rangle|$ in ?? eine Umhüllende mit Maximum und Minimum besitzt. Denn genau beim Minimum liegen die Kreiszentren genau gegenüber und schließen einen Winkel von π , wodurch sie nur antiparallele und keine parallelen Komponenten teilen bzw. im Umkehrschluss ein Maximum beim Überlapp beider Zentren.

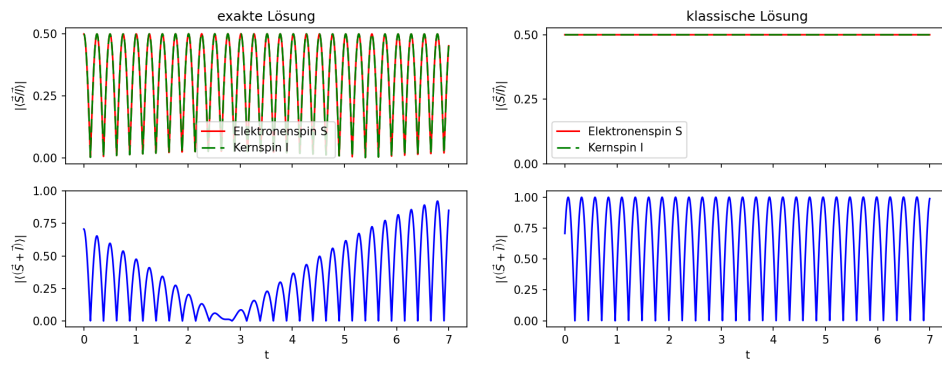


Abbildung 5.4: Spinlängen-Erwartungswert der Einzelspins und addierten Spins des Kern- und Elektronenspins der exakten Lösung(links) und der klassischen Lösung(rechts) gegen die Zeit aufgetragen für die Parameter: $B = 0.5 \text{ T}$, $T^* = 1 \text{ ns}$, $A_k = \sqrt{\frac{4}{3}} \cdot 10^9 \frac{1}{s}$,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

6 Zusammenfassung

Zusammenfassend konnte nachgewiesen werden, dass das TDVP mit dem klassischen Ansatz ?? die klassischen Lösungen reproduzieren konnte. Und es ist zu erkennen, dass eine Erweiterung auf N 1/2-Spins immer analoge Schritte zu Folge hat.

Wird bei dem Ergebnissen des modifizierten Ansatzes der Korrekturparameter $\mu_{12} = 0$ gesetzt, zerfallen wie zu erwarten die Gram-Matrix ?? und partiellen Ableitungen des modifizierten Hamiltonians ?? bis ?? in die klassische Lösungen.

Im Rahmen dieser Bachelorarbeit wurde die Lösung der Differentialgleichungen ?? bis ?? nicht behandelt. Es ist aber naheliegend, da der modifizierte Ansatz bis auf eine Hyperebene, die in einem entsprechenden Integral kein Gewicht findet, den gesamten 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 mehr als zwei Spins die zentrale Aufgabe, denn dann dürften diese Korrekturparameter nicht mehr den gesamten 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 semi-Klassischen Ansätzen sinnvoll sein.

Eidesstattliche Versicherung

(Affidavit)

Name, Vorname
(surname, first name)

Matrikelnummer
(student ID number)

☐ Bachelorarbeit
(Bachelor's thesis)

☐ Masterarbeit
(Master's thesis)

Titel
(Title)

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.

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:*

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.**