

Semi-quantenmechanischer Variationsansatz zur Spindynamik in Quantenpunkten

Salem Rezik

September 2022

Contents

1	Motivation	2
2	Quantenpunkte	3
3	Time-Dependent Variational Principle	5
3.1	Wahl der Wellenfunktion	5
3.2	ein 1/2-Spin im konstanten Magnetfeld	6
4	Central-Spin-Modell	9
4.1	klassischer Ansatz	10
4.2	modifizierter Ansatz: Quantenkorrektur	12
4.3	quantenmechanischen Lösung	14

1 Motivation

Die Realisierung von Quantencomputer mit genügend hoher Anzahl an Qubits wird oft als „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 quantenmechanische Zustände, wodurch u.a. eine drastisch höhere Anzahl von Zuständen auf gleichem Raum ermöglicht wird, was in bestimmten schnellere Prozesse.

Um sich dieses Problem zu verdeutlichen, wird der Hilbertraum eines N-Teilchen-Systems bestehend aus $\frac{1}{2}$ -Teilchen betrachtet, welches eine Dimension von 2^N besitzt; so dass allein die Speicherung aller Freiheitsgrade eines 100 Teilchen Systems eine unmögliche Herausforderung derzeitig ist. Dieses Problem hat schon damalige Physiker zu der Annahme verleitet, dass wohl ein theoretisch ein Computer basierend auf quantenmechanischen Wirkungsmechanismen die wohl angebrachteste Lösung wäre. Und tatsächlich haben Bernstein and Vazirani den ersten Beweis veröffentlicht, dass ein Quantencomputer in der Lage ist, das exponentielle Wachstum der Rechendauer auf ein polynomiales Wachstum runterzuberechnen.

Darüber hinaus können viele Algorithmen implementiert werden, dazu gehört auch der bekannte Shor-Algorithmus; ein Faktorisierungsverfahren, welches unter anderem ein gewaltiges Sicherheitsrisiko für das übliche RSA-Kryptosystem darstellt.

Die zentralen Bausteine eines Quantencomputers sind die Quantencubits, kurz Qubits. Damit werden beliebige quantenmechanische zwei-Niveau-Systeme sammelbezeichnet. In der Vergangenheit wurden bereits einige Realisierungsmöglichkeiten des Qubits umgesetzt.

Die Realisierungsvorschlag mit der sich diese Arbeit beschäftigt, ist die des Spins eines in einem Quantenpunkt eingefangenen Elektrons (Loch). Um diesen Spin zu beschreiben wird das Central-Spin-Model zur Beschreibung der Elektroneindynamik verwendet und mit dem semi-klassischen Variationsverfahren "Time-Dependent Variational Principle" (TDVP) behandelt.

Die Hoffnung liegt darin, durch Modifikationen von Parametern μ einer zu variierenden Wellen $|\Psi\rangle = |\Psi(\mu_1, \dots, \mu_N)\rangle$ das Problem des exponentiell zu N anwachsenden Hilbertraumes zu umgehen und gegenüber herkömmlichen, vollkommen quantenmechanischen Ansätzen mit größeren N möglichst kleine Abweichungen von der exakten Lösung zu erhalten.

2 Quantenpunkte

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

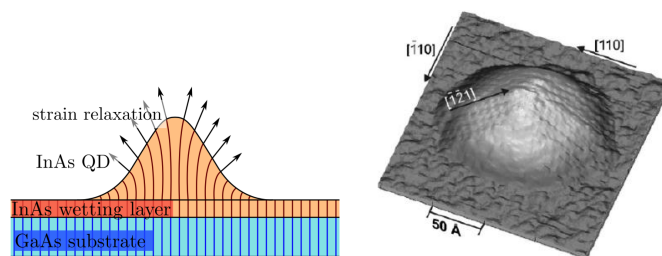


Figure 1: Links: Schematischer Aufbau vom Wachstum eines InAs-Quantenpunkt auf einem GaAs-Substrat. Rechts: Automatisch aufgelöstes Bild eines InAs-Quantenpunktes

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 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 Formationen von InAs-Inseln wie in Figure 1 links zu sehen, die nur wenige zehn Nanometer groß sind, und verändert selbst die elektronische Eigenschaften, hauptsächlich den elektrische Feldgradienten des Quantenpunktes. Nun wird eine weitere Monoschicht 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.

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 (Loch) räumlich eingefangen werden und die Wechselwirkung mit dem Substrat unterdrückt werden, wodurch die Dekohärenzzeit deutlich verlängert werden kann. Eine kurze Dekohärenzzeit ist seit Beginn ein Hauptprob-

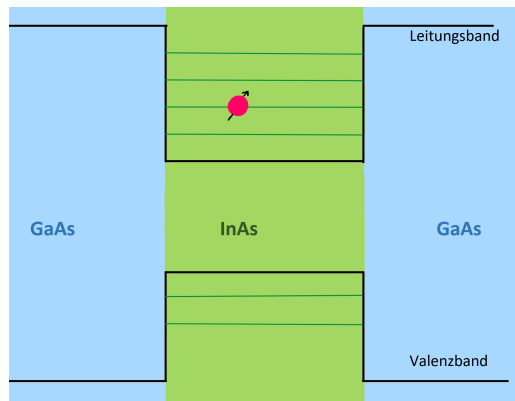


Figure 2: Schematische räumliche Bandstruktur eines In(Ga)As/GaAs-Quantenpunktes mit den relevanten Bändern und einem gefangenem Ladungsträger

lem bei der Realisierung des Quantencomputers. In Figure 2 ist zu erkennen, dass einzelne Ladungsträger im InAs auf bestimmte Energieniveaus gefangen sind.

Dabei ist die Hyperfeinstruktur die dominante Wechselwirkung. Quantenpunkte werden deshalb auch als "künstliche Atome" bezeichnet, da ganz in Analogie zu Atomen ihre diskreten Energieniveaus von den eingefangenen Teilchen besetzt werden können.

3 Time-Dependent Variational Principle

Das grundlegende Prinzip der Time-Dependent Variational Principle, kurz TDVP, ist die Äquivalenz der zeitabhängigen Schrödingergleichung zu einem Extremisierungsproblem einer Wirkungsfunktion $S = \int_{t_1}^{t_2} L dt$ mit der Lagrange-Funktion:

$$L(\bar{\Psi}(t), \Psi(t), t) = \frac{i}{2} \langle \Psi(t) | \dot{\Psi}(t) \rangle - \frac{i}{2} \langle \dot{\Psi}(t) | \Psi(t) \rangle - \langle \Psi(t) | \hat{H}(t) | \Psi(t) \rangle \quad (1)$$

Eine explizite Herleitung der Äquivalenz ist in (...) zu finden.

Für die Verwendung des Variationsverfahren ist es notwendig, dass der zu variierende Ansatz-Wellenfunktion $|\Psi(\mu_1, \dots, \mu_N)\rangle$ analytisch ist. Da die Normierungsfunktion $N = N(\mu, \bar{\mu})$ nicht analytisch ist, wird sie für den modifizierten Ansatz ausgelassen. Da ein normierter Ansatz in diesem semi-klassischen Minimierungsverfahren nicht von Notwendigkeit ist, lassen sich folgende Bewegungsgleichungen hinschreiben:

$$i\dot{\mu}_i = \sum_j (G_{ij})^{-1} \partial_{\mu_j} \mathcal{H} \quad (2)$$

mit

$$G_{ij} = \frac{\langle \partial_{\mu_i} \Psi | \partial_{\mu_j} \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - \frac{\langle \partial_{\mu_i} \Psi | \Psi \rangle \langle \Psi | \partial_{\mu_j} \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \quad (3)$$

$$\mathcal{H} = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (4)$$

mit der Konvention: $\langle \partial_{\mu_j} \Psi | = (| \partial_{\mu_j} \Psi \rangle)^\dagger$

Mit dieser modifizierten Gram-Matrix G_{ij} und dem modifizierten Hamiltonian \mathcal{H} , ist die Normierung wieder gesichert.

3.1 Wahl der Wellenfunktion

Zur Vereinfachung werden alle Kernspin (wie der Elektronenspin) als 1/2-Spins angenähert. 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

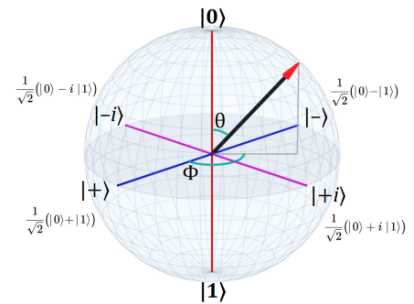


Figure 3: Schematischer Aufbau einer Bloch-Sphäre

Zahlenebene abbilden kann, ist es auch möglich, jeden Punkt auf einer Kugel zu beschreiben. Deshalb wählen wir folgenden Ansatz:

$$|\Psi(\mu_1(t), \dots, \mu_N(t))\rangle = \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{1 + \mu_i \bar{\mu}_i}} e^{\mu_i S_i^-} |\uparrow, \dots, \uparrow\rangle \quad (5)$$

3.2 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 **Central Spin Model** Wiederverwendung finden werden. Für den N=1 vereinfacht sich der Ansatz zu:

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

Im folgenden haben wir uns die Eigenschaft des 1/2-Spins $(S^-)^n |\uparrow\rangle = 0$ ($n = 2, 3, \dots$) verwendet.

Der Hamiltonian lautet:

$$\hat{H} = \gamma \vec{B} \hat{S} = \gamma \left(B_x \hat{S}_x + B_y \hat{S}_y + B_z \hat{S}_z \right) \quad (6)$$

$$= \gamma \frac{B_x}{2} \left(|\downarrow\rangle \langle \uparrow| + |\uparrow\rangle \langle \downarrow| \right) \quad (7)$$

$$+ \gamma \frac{i B_y}{2} \left(|\downarrow\rangle \langle \uparrow| - |\uparrow\rangle \langle \downarrow| \right) \quad (8)$$

$$+ \gamma \frac{B_z}{2} \left(|\uparrow\rangle \langle \uparrow| - |\downarrow\rangle \langle \downarrow| \right) \quad (9)$$

mit $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)^T$ und $\gamma = \mu_B g_e$, wobei μ_B das Bohrsche Magneton und g_e der Elektronen-g-Faktor ist. Der Spin-Vektoroperator $\hat{S} = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)^T$ mit den Pauli-Matrizen $\hat{\sigma}_i$.

und somit folgt für den **modifizierten Hamiltonian**:

$$\mathcal{H} = \frac{\gamma}{2} \frac{B_x(\mu + \bar{\mu}) + iB_y(\bar{\mu} - \mu) + B_z(1 - \mu\bar{\mu})}{1 + \mu\bar{\mu}} \quad (10)$$

$$\partial_{\bar{\mu}} \mathcal{H} = \frac{\gamma}{2} \frac{B_x(1 - \mu^2) + iB_y(1 + \mu^2) - 2\mu B_z}{(1 + \mu\bar{\mu})^2} \quad (11)$$

Im nächsten Schritt wird die von dem Hamiltonian unabhängigen **modifizierte Gram-Matrix** G_{ii} bestimmt, welche in diesem Fall eindimensional ist. Damit erhalten wir

$$G_{11} = \frac{1}{(1 + \mu\bar{\mu})^2} \quad \text{bzw.} \quad G_{11}^{-1} = (1 + \mu\bar{\mu})^2 \quad (12)$$

Nach einer weiteren Rechnung ergibt sich auch der modifizierte Hamiltonian und dessen Ableitung:

Einsetzen in die DGL liefert:

$$\begin{aligned} i\dot{\mu}_i &= \sum_j (G_{ij})^{-1} \partial_{\bar{\mu}_j} \mathcal{H} = (G_{ii})^{-1} \partial_{\bar{\mu}} \mathcal{H} \\ &= \frac{\gamma}{2} B_x(1 - \mu^2) + \frac{i\gamma}{2} B_y(1 + \mu^2) - \mu\gamma B_z \\ \Leftrightarrow \dot{\mu} &= \frac{1}{2}(B_y + iB_x)\mu^2 + \frac{1}{2}(B_y - iB_x) + i\mu B_z \end{aligned}$$

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

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} + \mu}{1 + \mu\bar{\mu}} = \frac{\text{Re}[\mu]}{1 + \mu\bar{\mu}} \quad (13)$$

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{i}{2} \frac{\bar{\mu} - \mu}{1 + \mu\bar{\mu}} = \frac{\text{Im}[\mu]}{1 + \mu\bar{\mu}} \quad (14)$$

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{1}{2} \frac{1 - \mu\bar{\mu}}{1 + \mu\bar{\mu}} \quad (15)$$

$$(16)$$

Bei dem Problem handelt es sich um die *Larmor-Präzession*, indes die Lösung bereits bekannt ist. Zur Überprüfung reicht es, zu zeigen:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = \gamma \vec{B} \times \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \quad (17)$$

$$\partial_\mu \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \dot{\mu} = \frac{1}{2} \frac{1 - \bar{\mu}^2}{(1 + \mu \bar{\mu})^2} \cdot \left[\frac{1}{2} (B_y + iB_x) \mu^2 + \frac{1}{2} (B_y - iB_x) + i\mu B_z \right] \quad (18)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = \partial_\mu \left[\frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] \dot{\mu} + \partial_{\bar{\mu}} \left[\frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] \dot{\bar{\mu}} \quad (19)$$

$$= B_y \frac{1}{2} \frac{1 - \mu \bar{\mu}}{(1 + \mu \bar{\mu})^2} - B_z \frac{i}{2} \frac{\bar{\mu} - \mu}{(1 + \mu \bar{\mu})^2} \quad (20)$$

$$= B_y \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) - B_z \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \quad (21)$$

analog wird berechnet:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = B_z \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) - B_x \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \quad (22)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = B_x \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) - B_y \left(\frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \quad (23)$$

Die Kreuzproduktstruktur lässt sich somit wiedererkennen.

4 Central-Spin-Modell

Im folgenden wir das **Central Spin Model** zur Beschreibung der Spindynamik des Quantenpunktes verwendet. Dabei werden zu dem vorherigen Hamiltonian, die legiglich die Interaktionen des Elektrones mit mit einem externem Magnetfeld \vec{B} berücksichtigt, fließen die Interaktionen der umliegenden Kernspins \hat{I}_k mit ein, d.h. die Wechselwirkung der Kernspins mit dem externen Magnetfeld und dem Elektronen-Spin über eine Heisenbergkopplung. Die Wechselwirkungen, der einzelnen Kernspins untereinander wird vernachlässigt.

$$\hat{H}_{CSM} = \gamma_e \vec{B} \hat{S} + \sum_{k=1}^N \gamma_k \vec{B} \hat{I}_k + \sum_{k=1}^N \alpha \hat{S} \hat{I}_k \quad (24)$$

Durch die Hinzunahme nur eines zusätzlich Kernspins \hat{I} erhalten wir den einfachsten Fall des Central Spin Models, der Hamiltonian vereinfacht sich somit zu:

$$\hat{H} = \underbrace{\gamma_e \vec{B} \hat{S}}_{\hat{H}_1} + \underbrace{\gamma_k \vec{B} \hat{I}}_{\hat{H}_2} + \underbrace{\alpha \hat{S} \hat{I}}_{\hat{H}_3} \quad (25)$$

$$(26)$$

mit $\gamma_e = \mu_B g_e$ und $\gamma_k = \mu_k g_k$, wobei die Kopplung γ_k zum Magnetfeld B deutlich schwächer als die des Elektrons γ_e ist. Bei α handelt es sich um die Kopplungskonstante beider Spins.

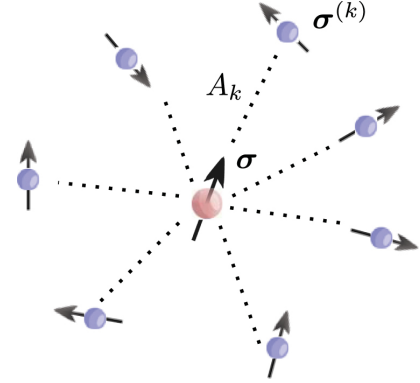


Figure 4: Schematischer Aufbau des Central-Spin-Modells mit dem Elektronenspins (Rot) und den in direkter Umgebung liegenden Kernspins (Blau) und einer Kopplungskonstante A_k

4.1 klassischer Ansatz

Im ersten Schritt wird der klassische nicht-normierte Produktansatz $|\Psi\rangle = |\Psi(\mu_1, \mu_2)\rangle$:

$$|\Psi\rangle = e^{\mu_1 S_1^-} e^{\mu_2 S_2^-} |\uparrow, \uparrow\rangle \quad (27)$$

$$= |\uparrow\uparrow\rangle + \mu_1 |\downarrow\uparrow\rangle + \mu_2 |\uparrow\downarrow\rangle + \mu_1\mu_2 |\downarrow\downarrow\rangle \quad (28)$$

$$= \underbrace{(|\uparrow\rangle_1 + \mu_1 |\downarrow\rangle_1)}_{|\Psi_1\rangle} \underbrace{(|\uparrow\rangle_2 + \mu_2 |\downarrow\rangle_2)}_{|\Psi_2\rangle} \quad (29)$$

$$(30)$$

Damit ergibt sich für den modifizierten Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = \frac{\langle\Psi|\hat{H}_1|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{H}_2|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{H}_3|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \quad (31)$$

$$(32)$$

Mit

$$\langle\Psi|\hat{H}_1|\Psi\rangle = \frac{\gamma_e}{2}(1 + \mu_2\bar{\mu}_2) (B_x(1 - \mu_1^2) + iB_y(1 + \mu_1^2) - 2\mu_1 B_z) \quad (33)$$

$$\langle\Psi|\hat{H}_2|\Psi\rangle = \frac{\gamma_k}{2}(1 + \mu_1\bar{\mu}_1) (B_x(1 - \mu_2^2) + iB_y(1 + \mu_2^2) - 2\mu_2 B_z) \quad (34)$$

$$\langle\Psi|\hat{H}_3|\Psi\rangle = \frac{\alpha}{4} [(\mu_1 + \bar{\mu}_1)(\mu_2 + \bar{\mu}_2) - (\mu_1 - \bar{\mu}_1)(\mu_2 - \bar{\mu}_2) + (1 - \mu_1\bar{\mu}_1)(1 - \mu_2\bar{\mu}_2)] \quad (35)$$

Und wir erhalten die partiellen Ableitungen:

$$\partial_{\mu_1} \mathcal{H} = \underbrace{\frac{\gamma_1}{2(1 + \mu_1\bar{\mu}_1)^2} [B_x(1 - \mu_1^2) + iB_y(1 + \mu_1^2) - B_z\mu_1]}_{= \partial_{\mu_1} \frac{\langle\Psi|\hat{H}_1+\hat{H}_2|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}} \quad (36)$$

$$+ \underbrace{\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(1 + \mu_1\bar{\mu}_2)}{(1 + \mu_1\bar{\mu}_1)^2(1 + \mu_2\bar{\mu}_2)}}_{= \partial_{\mu_1} \frac{\langle\Psi|\hat{H}_3|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}} \quad (37)$$

$$\partial_{\mu_2} \mathcal{H} = \underbrace{\frac{\gamma_2}{2(1 + \mu_2\bar{\mu}_2)^2} [B_x(1 - \mu_2^2) + iB_y(1 + \mu_2^2) - B_z\mu_2]}_{= \partial_{\mu_2} \frac{\langle\Psi|\hat{H}_1+\hat{H}_2|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}} \quad (38)$$

$$+ \underbrace{\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_1 - \mu_2)(1 + \mu_2\bar{\mu}_1)}{(1 + \mu_1\bar{\mu}_1)(1 + \mu_2\bar{\mu}_2)^2}}_{= \partial_{\mu_2} \frac{\langle\Psi|\hat{H}_3|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}} \quad (39)$$

Um nun die DGL aufzustellen, fehlt nur noch die Berechnung der modifizierten Gram-Matrix, die diesmal zweidimensional ist. Wir erhalten nach einer längeren Rechnung:

$$G = \begin{pmatrix} (1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 & 0 \\ 0 & (1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2 \end{pmatrix} \quad (40)$$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2} \end{pmatrix} \quad (41)$$

Nun können die Bewegungsgleichungen aufgestellt werden:

$$i\dot{\mu}_1 = \sum_j (G_{1j})^{-1} \partial_{\bar{\mu}_j} \mathcal{H} \quad (42)$$

$$= \underbrace{\frac{\gamma_1}{2} B_x (1 - \mu_1^2) + \frac{i\gamma_1}{2} B_y (1 + \mu_1^2) - \mu_1 \gamma_1 B_z}_{\text{Ein-Spin-Präzession im } \vec{B}} + \underbrace{\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(1 + \mu_1 \bar{\mu}_2)}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2}}_{\text{Ein-Spin-Präzession um } \frac{\langle \Psi | \hat{I} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \quad (43)$$

und analoger Weise

$$i\dot{\mu}_2 = \underbrace{\frac{\gamma_2}{2} B_x (1 - \mu_2^2) + \frac{i\gamma_2}{2} B_y (1 + \mu_2^2) - \mu_2 \gamma_2 B_z}_{\text{Ein-Spin-Präzession im } \vec{B}} + \underbrace{\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_1 - \mu_2)(1 + \mu_2 \bar{\mu}_1)}{1 + \mu_1 \bar{\mu}_1}}_{\text{Ein-Spin-Präzession um } \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \quad (44)$$

Aufgrund der Linearität der DGL ist die Lösung der ersten DGL aus dem Ein-Spin-Fall zu entlesen. Nun fehlt es noch zu beweisen, dass der letztere Summand die Präzession um den Spin-Erwartungswert des jeweilig anderen Spins.

$$\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(1 + \mu_1 \bar{\mu}_2)}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2} = \frac{\alpha}{2} \left[\underbrace{\frac{1}{2} \frac{\mu_2 + \bar{\mu}_2}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2} (1 - \mu_1^2)}_{\frac{\langle \Psi | \hat{I}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} + i \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\bar{\mu}_2 - \mu_2}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2} (1 + \mu_1^2)}_{\frac{\langle \Psi | \hat{I}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} - 2\mu_1 \underbrace{\frac{1}{2} \frac{1 - \mu_2 \bar{\mu}_2}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2}}_{\frac{\langle \Psi | \hat{I}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \right] \quad (45)$$

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

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] = \left(\gamma_1 \vec{B} + \alpha \frac{\langle \Psi | \hat{I} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \times \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (46)$$

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\langle \Psi | \hat{I} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] = \left(\gamma_2 \vec{B} + \alpha \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \times \frac{\langle \Psi | \hat{I} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (47)$$

dabei ist zu bemerken, dass γ_2 deutlich kleiner als γ_1 ist, und die Heisenbergkopplung stark dominiert.

Wir erkennen, dass mit diesem Ansatz wie zu erwarten eine klassische Lösung erhalten, wo zwei Spin um einander präzedieren. Dabei taucht quantenmechanische Verschränkung nicht auf, da beide Spin-Längen konstant bleiben zu jedem beliebigen Startzeitpunkt.

4.2 modifizierter Ansatz: Quantenkorrektur

Wir nehmen ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, dass das Magnetfeld \vec{B} in z-Richtung ausgerichtet ist. Somit vereinfacht sich die der Hamiltonian:

$$\hat{H} = \gamma_e \vec{B}_z \hat{S}_z + \gamma_k \vec{B}_z \hat{I}_z + \alpha \hat{S} \hat{I} \quad (48)$$

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:

$$|\Psi(\mu_1, \mu_2, \mu_{12})\rangle = e^{\mu_1 S_1^-} e^{\mu_2 S_2^-} e^{\mu_{12} S_1^- S_2^-} |\uparrow, \uparrow\rangle \quad (49)$$

$$= |\uparrow\uparrow\rangle + \mu_1 |\downarrow\uparrow\rangle + \mu_2 |\uparrow\downarrow\rangle + (\mu_1 \mu_2 + \mu_{12}) |\downarrow\downarrow\rangle \quad (50)$$

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

$$\mathcal{H} = \frac{\langle \Psi | \hat{H}_1 | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H}_2 | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (51)$$

mit

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \hat{H}_1 | \Psi \rangle &= \frac{\gamma_1 B_z}{2} [1 - \mu_1 \bar{\mu}_1 + \mu_2 \bar{\mu}_2 - (\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})(\overline{\mu_1 \mu_2} + \bar{\mu}_{12})] \\
\langle \Psi | \hat{H}_2 | \Psi \rangle &= \frac{\gamma_1 B_z}{2} [1 - \mu_2 \bar{\mu}_2 + \mu_1 \bar{\mu}_1 - (\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})(\overline{\mu_1 \mu_2} + \bar{\mu}_{12})] \\
\langle \Psi | \hat{H}_3 | \Psi \rangle &= \frac{\alpha}{4} [2(\bar{\mu}_1 \mu_2 + \mu_1 \bar{\mu}_2) + 1 - \mu_1 \bar{\mu}_1 - \mu_2 \bar{\mu}_2 + (\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})(\overline{\mu_1 \mu_2} + \bar{\mu}_{12})]
\end{aligned}$$

Damit folgen für die partiellen Ableitungen nach den konjugierten Parameter

$$\begin{aligned}
\partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} &= -B\gamma_1 \frac{\mu_1(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2 + \bar{\mu}_2 \mu_{12}}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\
&\quad + B\gamma_2 \frac{\bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\
&\quad + \frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(\mu_1 \bar{\mu}_2 + 1)(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2) + \bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12}) + \mu_{12} \bar{\mu}_2}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\
\partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} &= +B\gamma_1 \frac{\bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\
&\quad - B\gamma_2 \frac{\mu_2(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 + \bar{\mu}_1 \mu_{12}}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\
&\quad + \frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_1 - \mu_2)(\mu_2 \bar{\mu}_1 + 1)(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1) + \bar{\mu}_{12}(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12}) + \mu_{12} \bar{\mu}_1}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\
\partial_{\bar{\mu}_{12}} \mathcal{H} &= -B\gamma_1 \frac{(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\
&\quad - B\gamma_2 \frac{(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\
&\quad + \frac{\alpha}{2} \frac{(\bar{\mu}_1 - \bar{\mu}_2)(\mu_1 - \mu_2)(\mu_1 \mu_2 + \mu_{12})}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2}
\end{aligned}$$

Und für die Gram-Matrix erhalten wir:

$$G = \begin{pmatrix} (1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 + \mu_{12} \bar{\mu}_{12} & -\mu_1^2 \bar{\mu}_{12} - \bar{\mu}_2^2 \mu_{12} & \mu_2(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2) - \bar{\mu}_1 \mu_{12} \\ -\mu_2^2 \bar{\mu}_{12} - \bar{\mu}_1^2 \mu_{12} & (1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2 + \mu_{12} \bar{\mu}_{12} & \mu_1(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1) - \bar{\mu}_2 \mu_{12} \\ \bar{\mu}_2(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2) - \mu_1 \bar{\mu}_{12} & \bar{\mu}_1(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1) - \mu_2 \bar{\mu}_{12} & 1 + \mu_1 \bar{\mu}_1 + \mu_2 \bar{\mu}_2 \end{pmatrix} \frac{1}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \quad (52)$$

$$(53)$$

Somit lassen sich die Bewegungsgleichungen der Parameter explizit aufschreiben:

$$i\dot{\mu}_1 = G_{1,1}^{-1} \partial_{\mu_1} \mathcal{H} + G_{1,2}^{-1} \partial_{\mu_2} \mathcal{H} + G_{1,3}^{-1} \partial_{\mu_3} \mathcal{H} \quad (54)$$

$$i\dot{\mu}_2 = G_{2,1}^{-1} \partial_{\mu_1} \mathcal{H} + G_{2,2}^{-1} \partial_{\mu_2} \mathcal{H} + G_{2,3}^{-1} \partial_{\mu_3} \mathcal{H} \quad (55)$$

$$i\dot{\mu}_{12} = G_{3,1}^{-1} \partial_{\mu_1} \mathcal{H} + G_{3,2}^{-1} \partial_{\mu_2} \mathcal{H} + G_{3,3}^{-1} \partial_{\mu_3} \mathcal{H} \quad (56)$$

4.3 quantenmechanischen Lösung

Für die exakte quantenmechanische Lösung, wird der Hamiltonian diagonalisiert über die Basis:

$$|1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \quad (57)$$

$$|2\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad (58)$$

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}N_1} [(\epsilon_1 + 1) |\uparrow\downarrow\rangle + (\epsilon_1 - 1) |\downarrow\uparrow\rangle] \quad (59)$$

$$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}N_2} [(\epsilon_2 + 1) |\uparrow\downarrow\rangle + (\epsilon_2 - 1) |\downarrow\uparrow\rangle] \quad (60)$$

mit $\epsilon_{1,2} = \frac{\alpha \pm \sqrt{B^2(\gamma_1 - \gamma_2)^2 + \alpha^2}}{B(\gamma_1 - \gamma_2)}$ und $N_i = \sqrt{\epsilon_i^2 + 1}$. Die dazugehörigen Eigenenergien lauten:

$$E_1 = B(\gamma_1 + \gamma_2) + \frac{\alpha}{4} \quad (61)$$

$$E_2 = -B(\gamma_1 + \gamma_2) + \frac{\alpha}{4} \quad (62)$$

$$E_3 = -\frac{\alpha}{4} + \frac{\sqrt{\alpha^2 + B^2(\gamma_1 - \gamma_2)^2}}{2} \quad (63)$$

$$E_4 = -\frac{\alpha}{4} - \frac{\sqrt{\alpha^2 + B^2(\gamma_1 - \gamma_2)^2}}{2} \quad (64)$$

$$(65)$$

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

$$\langle \Psi | \hat{S}_i | \Psi \rangle = \sum_{i,j} e^{i(E_i - E_j)t} \langle i | \hat{S}_i | j \rangle \langle j | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | i \rangle \quad (66)$$