

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades  
Bachelor of Science

## **Semi-klassischer 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 Anders  
Zweitgutachter: Prof. Dr. Götz Uhrich  
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

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Quantenpunkte</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Central Spin Model</b>	<b>5</b>
<b>4</b>	<b>Time Dependent Variational Principle</b>	<b>7</b>
4.1	Wahl der Wellenfunktion für einen semi-klassischen Ansatz . . . . .	9
4.2	ein 1/2-Spin im konstanten Magnetfeld . . . . .	9
4.3	klassischer Ansatz: Zwei Spins . . . . .	12
4.4	modifizierter Ansatz: Quantenkorrektur . . . . .	15
<b>5</b>	<b>Vergleich</b>	<b>18</b>
5.1	quantenmechanische Lösung . . . . .	18
5.2	exemplarischer Vergleich . . . . .	19

# 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, 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 Feynman zu der Annahme verleitet, dass wohl 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 runterzubrechen. 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.

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.

Der Realisierungsvorschlag, mit der sich diese Arbeit beschäftigt, ist den Spin eines in einem Quantenpunkt eingefangenen Elektrons zu verwenden. Um die Elektronenspindynamik zu beschreiben, wird das Central-Spin-Model verwendet und mit dem Variationsverfahren "Time-Dependent Variational Principle"(TDVP) behandelt.

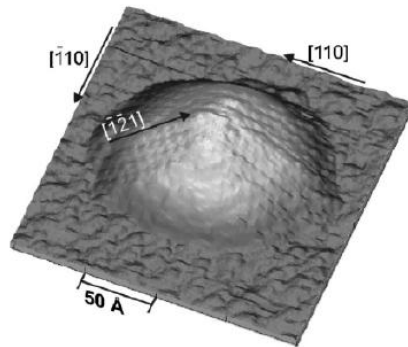
## 1 *Einleitung*

---

Dabei wird durch Modifikationen einer zu variierenden klassischen bzw. semi-klassischen Wellenfunktion  $|\Psi\rangle = |\Psi(\mu_1, \dots, \mu_N)\rangle$ , das Problem in ein semi-klassisches Problem überführt. Dadurch soll die Problematik des exponentiell anwachsenden Hilbertraumes umgangen werden.

## 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

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

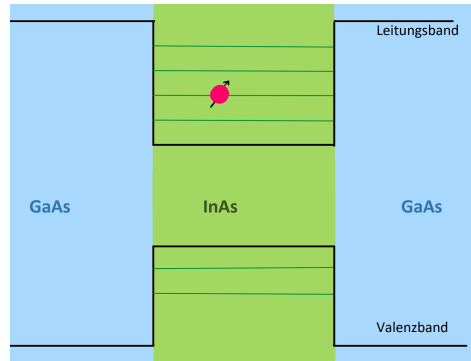
Die Stranski-Krastnov-Methode ist eine weitverbreitete Methode um Quantenpunkte zu erzeugen, dabei ist die Idee zwei Materialien mit unterschiedlicher Gitterkonstante mittels Molekularstrahlepitaxie aufeinander wachsen zu lassen. Der Kürze halber lässt es sich beispielhaft an den beiden Materialien InAs 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 Abbildung 2.1 zu sehen, die nur wenige zehn Nanometer groß sind, und verändert selbst die elektronischen Eigenschaften, hauptsächlich den elektrischen 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

## 2 Quantenpunkte

---

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 seit Beginn ein Hauptproblem bei der Realisierung des Quantencomputers ist.

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 Central Spin Model

Im folgenden wird das **Central Spin Model** 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.

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

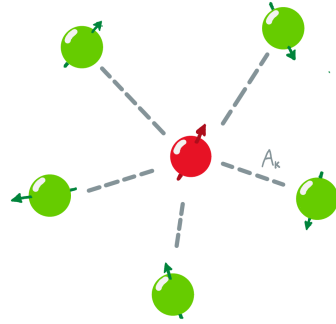
Dabei entspricht anders als beim freien Elektron der g-Faktor eines Elektron im Quantenpunkt nicht mehr 2, sondern ca. 0,555. Das Kernmagneton  $\mu_k = 5,05 \cdot 10^{27} \frac{J}{T}$  ist etwa 1800 Mal kleiner als das Bohrsche Magneton. Die g-Faktoren  $g_k$  können für alle Kernspins der Einfachheit Halber als gleich angenommen werden. Zudem lässt sich eine charakterische Zeit definieren:

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

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

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

mit  $\vec{b} = T^* \mu_B g_e \vec{B}$ ,  $z_k = T^* \frac{\mu_k g_k}{\mu_B g_e}$  und  $\alpha_k = T^* A_k$ . Durch die Hinzunahme nur eines zusätzlich Kernspinors  $\hat{I}$  erhalten wir den einfachsten Fall des Central Spin Models,



**Abbildung 3.1:** Schematischer Aufbau des Central-Spin-Modells mit dem Elektronenspins (Rot) und den in direkter Umgebung liegenden Kernspins (Grün) und einer Kopplungskonstante  $A_k$

### 3 Central Spin Model

---

der Hamiltonian vereinfacht sich somit zu:

$$\hat{H} = \underbrace{\vec{b}\hat{S}}_{\hat{H}_1} + \underbrace{z\vec{b}\hat{I}}_{\hat{H}_2} + \underbrace{\alpha\hat{S}\hat{I}}_{\hat{H}_3} \quad (3.4)$$

(3.5)

mit der charakteristischen Zeit:

$$T^* = \sqrt{\frac{4}{3}} \frac{1}{A} \quad (3.6)$$

## 4 Time Dependent Variational Principle

Es gibt viele Ansätze den Hamiltonian des Central Spin Modells zu lösen, die von der exakten Lösung bishin zu semi-klassischen Ansätzen reichen, welche ihre eigenen Vor- und Nachteile beherbergen. Gerade bei einer großen Anzahl von Kernspins ist eine exakte quantenmechanische Lösung unpraktisch. Deshalb finden Semi-klassische 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. Das grundlegende Prinzip der TDVP ist die Äquivalenz der zeit-abhängigen Schrödingergleichung zu einem Extremisierungsproblem einer Wirkungs-funktion  $S = \int_{t_1}^{t_2} L dt$  zu nutzen. Dies kann durch die folgende Lagrange-Funktion:

$$L(\bar{\Psi}(t), \Psi(t), t) = \frac{i}{2} \langle \Psi(t) | \dot{\Psi}(t) \rangle - \frac{i}{2} \langle \dot{\Psi}(t) | \Psi(t) \rangle - \langle \Psi(t) | \hat{H}(t) | \Psi(t) \rangle \quad (4.1)$$

mit einer Wellenfunktion  $|\Psi\rangle$ , die den ganzen Hilbertraum  $H$  abdeckt, erreicht werden.

Um das ganze Potential des Variationsverfahren auszuschöpfen, wird sich nur auf ein Unterraum  $\mathcal{M} \subset H$  des Hilbertraumes beschränkt. Dabei kann immer noch dasselbe Verfahren für die Zeitentwicklung der Zustände  $|\Psi(t)\rangle \in \mathcal{M}$  verwendet werden. Dies hat zur Folge, dass die Variation sich auf die Tangentialebene von  $\mathcal{M}$  am Zustandvektor  $|\Psi\rangle$  beschränkt.

Die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion  $|\Psi(t)\rangle$  kann auf ein Satz von  $N$  analytischen, komplexen Parametern  $\mu_i(t)$  ausgelagert werden, so dass  $|\Psi(t)\rangle = |\Psi(\mu_1(t), \dots, \mu_N(t))\rangle$  gilt, wodurch auch äquivalent der Unterraum  $\mathcal{M}$  definiert werden kann als:

$$\mathcal{M} = \{|\Psi(\vec{\mu})\rangle | \vec{\mu} \in \mathbb{C}^N\} \quad (4.2)$$

Wird nun diese Parameterwellenfunktion, die nicht normiert sein muss, in der Lagrange-Funktion Gleichung 4.1 verwendet, ergeben sich für die Parameter die **fundamentalen Bewegungsgleichungen**:

$$i\dot{\mu}_i = \sum_j (G_{ij})^{-1} \partial_{\bar{\mu}_j} \mathcal{H} \quad (4.3)$$

mit

$$G_{ij} = \frac{\langle \partial_{\mu_i} \Psi | \partial_{\mu_j} \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - \frac{\langle \partial_{\mu_i} \Psi | \Psi \rangle \langle \Psi | \partial_{\mu_j} \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \quad (4.4)$$

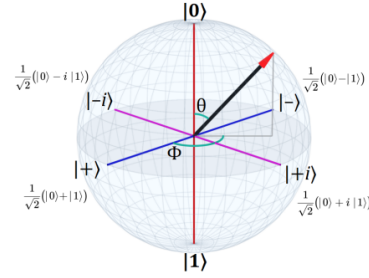
$$\mathcal{H} = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (4.5)$$

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

Dabei entspricht die **modifizierte Gram-Matrix**  $G_{ij}$  oder Überlappmatrix der tangentialvektoren auf  $\mathcal{M}$  anschaulich einer Metrik, wenn die Tangentialvektoren linear unabhängig wären. Der **modifizierte Hamiltonian**  $\mathcal{H}$ , übernimmt die Rolle des eigentlichen Hamiltonians, wobei dieser auch die Normierung sicher stellt. Eine explizite Herleitung ist in (...) zu finden.

## 4.1 Wahl der Wellenfunktion für einen semi-klassischen Ansatz

Zur Vereinfachung werden alle Kernspins (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 Zahlenebene abbilden kann, ist es auch möglich, jeden Punkt auf einer Kugel zu beschreiben. Deshalb wählen wir folgenden unnormierten Ansatz, der in den folgenden Abschnitten Verwendung findet:



**Abbildung 4.1:** Schematischer Aufbau einer Bloch-Sphäre

$$|\Psi(\mu_1(t), \dots, \mu_N(t))\rangle = \prod_{i=1}^N e^{\mu_i S_i^-} |\uparrow, \dots, \uparrow\rangle \quad (4.6)$$

Dabei lässt sich diese Wellenfunktion durch diesen Normierungsfaktor normieren:

$$N = \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{1 + \mu_i \bar{\mu}_i}} \quad (4.7)$$

## 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 **Central Spin Model** Wiederverwendung finden werden.

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

#### 4 Time Dependent Variational Principle

---

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

$$\hat{H} = \gamma \vec{B} \hat{S} = \gamma (B_x \hat{S}_x + B_y \hat{S}_y + B_z \hat{S}_z) \quad (4.8)$$

$$= \gamma \frac{B_x}{2} (|\downarrow\rangle\langle\uparrow| + |\uparrow\rangle\langle\downarrow|) \quad (4.9)$$

$$+ \gamma \frac{iB_y}{2} (|\downarrow\rangle\langle\uparrow| - |\uparrow\rangle\langle\downarrow|) \quad (4.10)$$

$$+ \gamma \frac{B_z}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) \quad (4.11)$$

mit  $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)^T$  und  $\gamma = \mu_B g_e$ , wobei  $\mu_B = 9.27 \cdot 10^{24} \frac{J}{T}$  das Bohrsche Elektronenmagneton und  $g_e$  der Lande-Faktor des freien Elektrones  $g_e \approx 2$  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 ergibt sich der **modifizierte Hamiltonian** und seine partielle Ableitung:

$$\mathcal{H} = \frac{\gamma}{2} \frac{B_x(\mu + \bar{\mu}) + iB_y(\bar{\mu} - \mu) + B_z(1 - \mu\bar{\mu})}{1 + \mu\bar{\mu}} \quad (4.12)$$

$$\partial_{\bar{\mu}} \mathcal{H} = \frac{\gamma}{2} \frac{B_x(1 - \mu^2) + iB_y(1 + \mu^2) - 2\mu B_z}{(1 + \mu\bar{\mu})^2} \quad (4.13)$$

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

$$G_{11} = \frac{1}{(1 + \mu\bar{\mu})^2} \quad \text{bzw.} \quad G_{11}^{-1} = (1 + \mu\bar{\mu})^2 \quad (4.14)$$

Einsetzen in die Bewegungsgleichung Gleichung 4.3 liefert:

$$i\dot{\mu}_i = \sum_j (G_{ij})^{-1} \partial_{\bar{\mu}_j} \mathcal{H} = (G_{ii})^{-1} \partial_{\bar{\mu}} \mathcal{H} \quad (4.15)$$

$$= \frac{\gamma}{2} B_x (1 - \mu^2) + \frac{i\gamma}{2} B_y (1 + \mu^2) - \mu\gamma B_z \quad (4.16)$$

$$\leftrightarrow \dot{\mu} = \frac{1}{2} (B_y + iB_x) \mu^2 + \frac{1}{2} (B_y - iB_x) + i\mu\gamma B_z \quad (4.17)$$

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

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} + \mu}{1 + \mu \bar{\mu}} = \frac{\text{Re}[\mu]}{1 + \mu \bar{\mu}} \quad (4.18)$$

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{i}{2} \frac{\bar{\mu} - \mu}{1 + \mu \bar{\mu}} = \frac{\text{Im}[\mu]}{1 + \mu \bar{\mu}} \quad (4.19)$$

$$\frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{1}{2} \frac{1 - \mu \bar{\mu}}{1 + \mu \bar{\mu}} \quad (4.20)$$

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

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = \gamma \vec{B} \times \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \quad (4.21)$$

$$\partial_\mu \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \dot{\mu} = \frac{1}{2} \frac{1 - \bar{\mu}^2}{(1 + \mu \bar{\mu})^2} \cdot \left[ \frac{1}{2} (B_y + i B_x) \mu^2 + \frac{1}{2} (B_y - i B_x) + i \mu B_z \right] \quad (4.22)$$

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = \partial_\mu \left[ \frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] \dot{\mu} + \partial_{\bar{\mu}} \left[ \frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] \dot{\bar{\mu}} \quad (4.23)$$

$$= B_y \frac{1}{2} \frac{1 - \mu \bar{\mu}}{(1 + \mu \bar{\mu})^2} - B_z \frac{i}{2} \frac{\bar{\mu} - \mu}{(1 + \mu \bar{\mu})^2} \quad (4.24)$$

$$= B_y \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) - B_z \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \quad (4.25)$$

analog wird berechnet:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = B_z \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) - B_x \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \quad (4.26)$$

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_z | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = B_x \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_y | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) - B_y \left( \frac{\langle \Psi | \hat{S}_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) \quad (4.27)$$

Die Kreuzproduktstruktur lässt sich somit wiedererkennen.

### 4.3 klassischer Ansatz: Zwei Spins

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

$$|\Psi\rangle = e^{\mu_1 S_1^-} e^{\mu_2 S_2^-} |\uparrow, \uparrow\rangle \quad (4.28)$$

$$= |\uparrow\uparrow\rangle + \mu_1 |\downarrow\uparrow\rangle + \mu_2 |\uparrow\downarrow\rangle + \mu_1 \mu_2 |\downarrow\downarrow\rangle \quad (4.29)$$

$$= \underbrace{(|\uparrow\rangle_1 + \mu_1 |\downarrow\rangle_1)}_{|\Psi_1\rangle} \underbrace{(|\uparrow\rangle_2 + \mu_2 |\downarrow\rangle_2)}_{|\Psi_2\rangle} \quad (4.30)$$

$$(4.31)$$

Mit diesem Produktansatz ergeben sich die Spin-Erwartungswerte:

$$\frac{\langle\Psi|\hat{S}_x|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{1}{2} \frac{\bar{\mu}_1 + \mu_1}{1 + \mu_1 \bar{\mu}_1} = \frac{Re[\mu_1]}{1 + \mu_1 \bar{\mu}_1} \quad (4.32)$$

$$\frac{\langle\Psi|\hat{S}_y|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{i}{2} \frac{\bar{\mu}_1 - \mu_1}{1 + \mu_1 \bar{\mu}_1} = \frac{Im[\mu_1]}{1 + \mu_1 \bar{\mu}_1} \quad (4.33)$$

$$\frac{\langle\Psi|\hat{S}_z|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{1}{2} \frac{1 - \mu_1 \bar{\mu}_1}{1 + \mu_1 \bar{\mu}_1} \quad (4.34)$$

und

$$\frac{\langle\Psi|\hat{I}_x|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{1}{2} \frac{\bar{\mu}_2 + \mu_2}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2} = \frac{Re[\mu_2]}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2} \quad (4.35)$$

$$\frac{\langle\Psi|\hat{I}_y|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{i}{2} \frac{\bar{\mu}_2 - \mu_2}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2} = \frac{Im[\mu_2]}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2} \quad (4.36)$$

$$\frac{\langle\Psi|\hat{I}_z|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{1}{2} \frac{1 - \mu_2 \bar{\mu}_2}{1 + \mu_2 \bar{\mu}_2} \quad (4.37)$$

Damit ergibt sich für den modifizierten Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = \frac{\langle\Psi|\hat{H}_1|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{H}_2|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{H}_3|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \quad (4.38)$$

$$(4.39)$$

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:

$$\partial_{\bar{\mu}_1} \mathcal{H} = \frac{1}{2(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2} [b_x (1 - \mu_1^2) + i b_y (1 + \mu_1^2) - b_z \mu_1] \quad (4.43)$$

$$+ \underbrace{\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_2 - \mu_1)(1 + \mu_1 \bar{\mu}_2)}{(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)^2 (1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)}}_{= \partial_{\bar{\mu}_1} \frac{\langle \Psi | \hat{H}_1 + \hat{H}_2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \quad (4.44)$$

$$\partial_{\bar{\mu}_2} \mathcal{H} = \frac{z}{2(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2} [B_x (1 - \mu_2^2) + i B_y (1 + \mu_2^2) - B_z \mu_2] \quad (4.45)$$

$$+ \underbrace{\frac{\alpha}{2} \frac{(\mu_1 - \mu_2)(1 + \mu_2 \bar{\mu}_1)}{(1 + \mu_1 \bar{\mu}_1)(1 + \mu_2 \bar{\mu}_2)^2}}_{= \partial_{\bar{\mu}_2} \frac{\langle \Psi | \hat{H}_1 + \hat{H}_2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}} \quad (4.46)$$

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

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

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

Nun können die Bewegungsgleichungen aufgestellt werden:

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

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

und analoger Weise

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

Aufgrund der Linearität der Differentialgleichungen ist dank Gleichung 4.16 die Lösung der ersten beiden Summanden 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 beschreibt. Wenn dieser Ansatz angenommen wird, kann dies durch Auflösen jener gezeigt werden:

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

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:

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

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

dabei ist zu bemerken, dass  $z \approx \frac{1}{800}$  klein ist, so dass im Falle des Kernspins die Heisenbergkopplung stark dominiert.

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

## 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:

$$|\Psi(\mu_1, \mu_2, \mu_{12})\rangle = e^{\mu_1 S_1^-} e^{\mu_2 S_2^-} e^{\mu_{12} S_1^- S_2^-} |\uparrow, \uparrow\rangle \quad (4.55)$$

$$= |\uparrow\uparrow\rangle + \mu_1 |\downarrow\uparrow\rangle + \mu_2 |\uparrow\downarrow\rangle + (\mu_1\mu_2 + \mu_{12}) |\downarrow\downarrow\rangle \quad (4.56)$$

mit den Spinerwartungswerten:

$$\frac{\langle\Psi|\hat{S}_x|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{1}{2} \frac{\bar{\mu}_1 + \mu_1 + \bar{\mu}_2(\mu_1\mu_2 + \mu_{12}) + \mu_2(\bar{\mu}_1\bar{\mu}_2 + \bar{\mu}_{12})}{1 + \mu_1\bar{\mu}_1 + \mu_2\bar{\mu}_2 + (\mu_1\mu_2 + \mu_{12})(\bar{\mu}_1\bar{\mu}_2 + \bar{\mu}_{12})} \quad (4.57)$$

$$\frac{\langle\Psi|\hat{S}_y|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{i}{2} \frac{\bar{\mu}_1 - \mu_1 + \bar{\mu}_2(\mu_1\mu_2 + \mu_{12}) + \mu_2(\bar{\mu}_1\bar{\mu}_2 + \bar{\mu}_{12})}{1 + \mu_1\bar{\mu}_1 + \mu_2\bar{\mu}_2 + (\mu_1\mu_2 + \mu_{12})(\bar{\mu}_1\bar{\mu}_2 + \bar{\mu}_{12})} \quad (4.58)$$

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

und

$$\frac{\langle\Psi|\hat{I}_x|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{1}{2} \frac{\bar{\mu}_2 + \mu_2 + \bar{\mu}_1(\mu_1\mu_2 + \mu_{12}) + \mu_1(\bar{\mu}_1\bar{\mu}_2 + \bar{\mu}_{12})}{1 + \mu_1\bar{\mu}_1 + \mu_2\bar{\mu}_2 + (\mu_1\mu_2 + \mu_{12})(\bar{\mu}_1\bar{\mu}_2 + \bar{\mu}_{12})} \quad (4.60)$$

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

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

Aufgrund der Tatsache, dass bei einem freiliegenden  $\vec{B}$ -Feld, sich die Rechnung und Ergebnisse außerordentlich verkomplizieren ohne wirklich neue Physik zu bringen, wird der Einfachheit Halber das Magnetfeld in z-Richtung ausgerichtet, somit vereinfacht sich der Hamiltonian zu:

$$\hat{H} = \vec{b}\hat{S}_z + z\vec{b}\hat{I}_z + \alpha\hat{S}\hat{I} \quad (4.63)$$

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

$$\mathcal{H} = \frac{\langle\Psi|\hat{H}_1|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{H}_2|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{H}_3|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \quad (4.64)$$

mit

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

Damit folgen für die partiellen Ableitungen nach den konjugierten Parameter

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

Und für die Gram-Matrix erhalten wir:

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

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

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

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

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

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

$$(5.9)$$

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

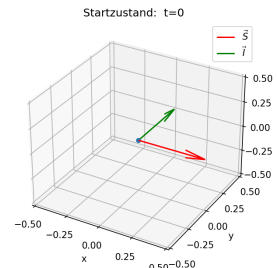
$$\langle\Psi|\hat{S}_i|\Psi\rangle = \sum_{i,j} e^{i(E_i - E_j)t} \langle i|\hat{S}_i|j\rangle \langle j|\Psi_0\rangle \langle\Psi_0|i\rangle \quad (5.10)$$

## 5.2 exemplarischer Vergleich

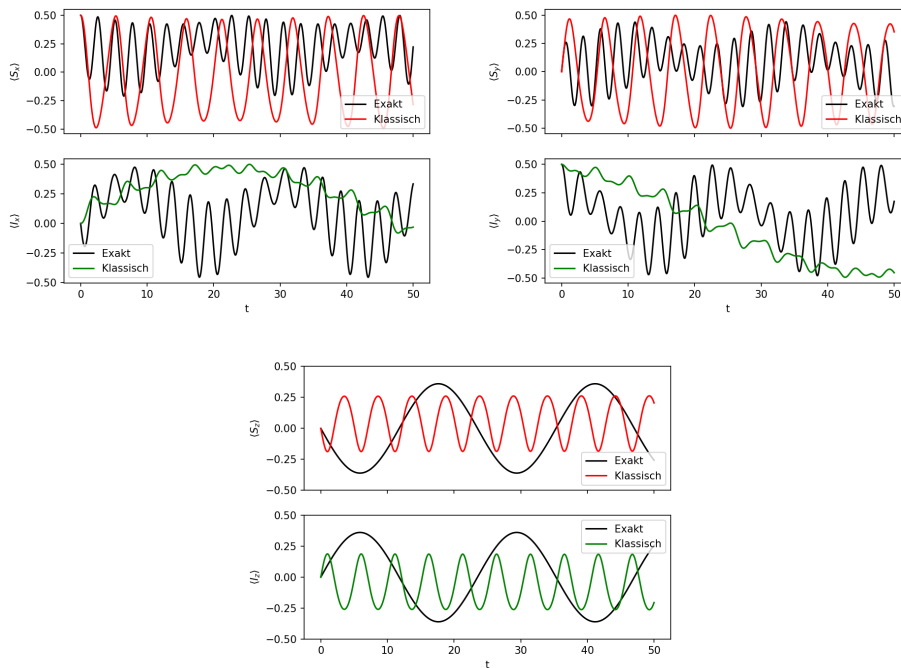
Es wird der Startzustand

$$|\Psi_0\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle + i|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + i|\downarrow\downarrow\rangle \quad (5.11)$$

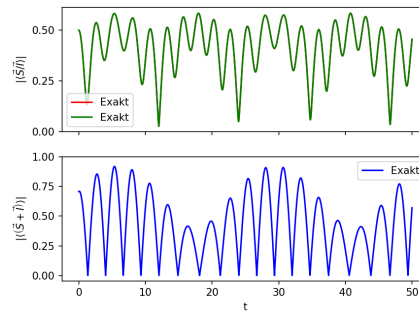
verwendet, welcher Äquivalent zu eine Elektronenspinerwartungswert entlang der X-Achse und orthogonal dazu dem Kernspinerwartungswert entlang der Y-Achse, beide auf der X-Y-Ebene liegend wie in Abbildung 5.1 zu sehen. Unter all den möglichen Startzuständen gewählt, da dies ein sehr einfachen und anschaulichen Fall darstellt, da das Magnetfeld und beide Spinvektoren ein Dreiein bilden und gleich zu Beginn die Kopplungen unter einander durch die Orthogonalität am stärksten ist.



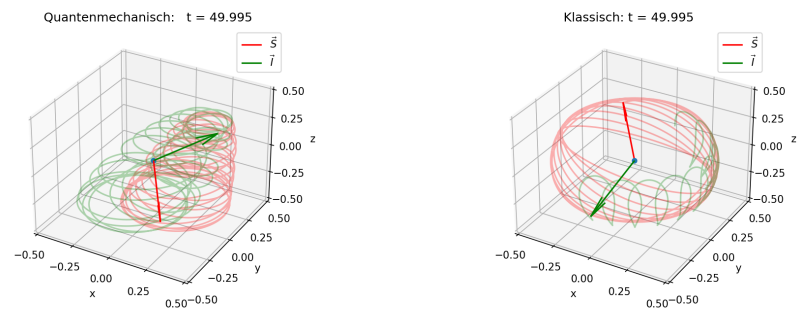
**Abbildung 5.1:** gewählter Startzustand in einem 3D-Plot mit rotem Elektronenspinerwartungswert und grünem Kernspinerwartungswert als Vektoren dargestellt



**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: ...



**Abbildung 5.3:** oben: Spinlänge-Erwartungswert des Kernspin und Elektronenspin gegen die Zeit aufgetragen. unten: Spinlänge der addierten Spins gegen die Zeit aufgetragen



**Abbildung 5.4:** Spin Erwartungswerte als Vektoren zum Endzeitpunkt des betrachteten Zeitraums zum genannten Startzustand samt abgefahrener Spur der quantenmechanischen Lösung (Links) und der klassischen Lösung (Rechts)



# 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.**