Nachtrag

$$H = H_0 + \hat V(t)$$

$$_0\langle \Psi_m | \Psi_n\rangle_1 = {}_0\langle m| -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\, \hat V_I(t') |n\rangle_0 = -\frac{1}{\hbar}\,{}_0\langle m|\hat V|n\rangle_0 \frac{\exp[i(\omega_{nm}-\omega)-\varepsilon)t]}{\omega_{nm}-\omega - i\varepsilon}$$

$$\Rightarrow W_{f\leftarrow i} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|\hat V|i\rangle|^2 \delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)} - \hbar\omega)$$

2. Version der Herleitung

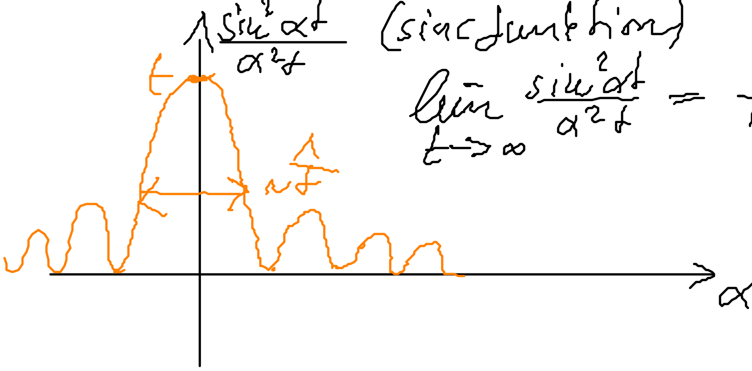
ab $t=0$ wirkt die Störung $\hat V(t) = \hat V e^{-i\omega t}$

$$_0\langle \Psi_m|\Psi_n\rangle_1 = {}_0\langle m| -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, \hat V_I(t')|n\rangle_0 = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, e^{i\omega_{nm}t' - i\omega t'}\, {}_0\langle m|\hat V|n\rangle_0$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\,{}_0\langle m|\hat V|n\rangle_0 \frac{e^{i(\omega_{nm}-\omega)t}-1}{i(\omega_{nm}-\omega)}$$

Übergangswahrscheinlichkeit

$$\hookrightarrow P^{(1)}_{m\leftarrow n} = |\dots|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|{}_0\langle m|\hat V|n\rangle_0|^2\, t\, \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{nm}-\omega}{2}t\right)}{\left[\frac{(\omega_{nm}-\omega)}{2}\right]^2 t}$$



(sinc function)

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2\alpha t}{\alpha^2 t} = \pi\,\delta(\alpha) \qquad \text{mit } \delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x)$$

$$\omega_{nm}-\omega = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$$

$$\frac{1}{t}P^{(1)}_{m\leftarrow n} = W_{m\leftarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar^2}|{}_0\langle m|\hat V|n\rangle_0|^2\,\delta(\omega_{nm}-\omega)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar}|{}_0\langle m|\hat V|n\rangle_0|^2\,\delta(E_m - E_n - \hbar\omega)$$

3.2 Spin Dynamik

Rabi-Oszillation

Spin in statischem Feld $B_0\hat e_z$ + geeignete zirkular polarisiertes Wechselfeld in x-,y-Richtung $\vec B(t) = B_0\hat e_z + B_1(\hat e_x\cos\omega t - \hat e_y \sin\omega t)$

$$\Rightarrow \boxed{H = -g\frac{\mu}{2}\vec B\hat{\vec\sigma} = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z - \frac{\hbar\Omega_R^{(0)}}{2}(\sigma_x\cos\omega t - \sigma_y\sin\omega t)}$$

$\hbar\omega_0 = g\mu B_0$, $\hbar\Omega_R^{(0)} = g\mu B_1$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle}$$

transformiere ins mitrotierende Bezugssystem

unitäre Transformation $\boxed{|\Psi'(t)\rangle = U^\dagger(t)|\Psi(t)\rangle \text{ mit } U^\dagger(t) = e^{-\frac{i\omega t}{2}\sigma_z}}$

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi'\rangle = \left(i\hbar \frac{d}{dt} U^\dagger\right)|\psi\rangle + U^\dagger i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle$$
$$= \quad -''- \quad + U^\dagger H|\psi\rangle$$
$$= \left(i\hbar\frac{d}{dt}U^\dagger\right)UU^\dagger|\psi\rangle + U^\dagger H U U^\dagger|\psi\rangle$$
$$= H'|\psi'\rangle$$

mit $H' = U^\dagger H U + i\hbar\left(\frac{d}{dt}U^\dagger\right)U$ und $e^{-\frac{i\omega t}{2}\sigma_z}\sigma_x e^{\frac{i\omega t}{2}\sigma_z} = \cos(\omega t)\sigma_x + \sin(\omega t)\sigma_y$

$\qquad -''- \quad y \quad -''- \qquad y - \quad x$

$\omega = \left(\frac{d}{dt}U^\dagger\right)U$

$$H' = -\frac{\hbar}{2}(\omega_0-\omega)\sigma_z - \hbar\frac{\Omega_R^{(0)}}{2}\left[\cos^2(\omega t)\sigma_x + \sin(\omega t)\cos(\omega t)\sigma_y - \sin(\omega t)\cos(\omega t)\sigma_y + \sin^2(\omega t)\sigma_x\right]$$

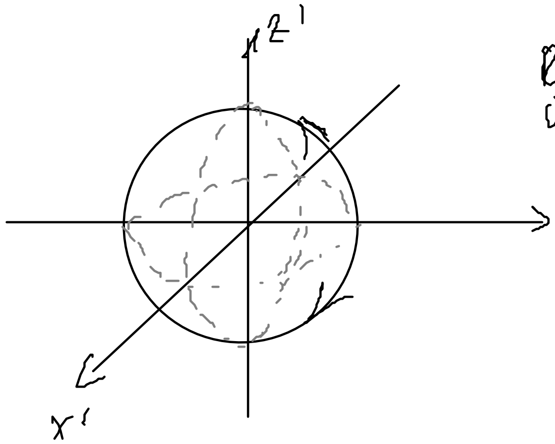
$$\boxed{H' = -\frac{\hbar}{2}(\omega_0-\omega)\sigma_z - \hbar\frac{\Omega_R^{(0)}}{2}\sigma_x}$$

- ganze Zeitabhängigkeit ist wegtransformiert

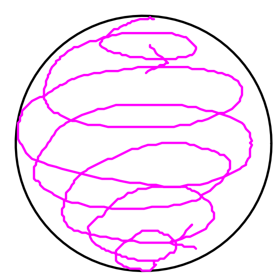
In Resonanz $\omega = \omega_0$ (Information über Frequenz von Atomen)

$\Rightarrow H' = -\frac{\hbar\Omega_R^{(0)}}{2}\sigma_x$, Drehung um x'-Achse mit **„Rabi-Frequenz"**

$\Omega_R^{(0)} = g\frac{\mu}{2}B_1$



Rücktransformation ins ursprüngliche System rotierend



Bemerkungen

① Detuning (Verstimmung) $\Delta = \omega_0 - \omega \neq 0$

$\Rightarrow H' = -\frac{\hbar}{2}\Delta\sigma_z - \hbar\frac{\Omega_R^{(0)}}{2}\sigma_x$ zeitunabhängig

Diagonalisieren ≙ unitäre Transformation $H'' = \tilde{U}^\dagger H' \tilde{U}$

$\tilde{U} = \begin{pmatrix}\cos\frac{\alpha}{2} & \sin\frac{\alpha}{2}\\ -\sin\frac{\alpha}{2} & \cos\frac{\alpha}{2}\end{pmatrix}$ $\qquad H'' = -\frac{\hbar\Omega_R}{2}\sigma_z \qquad \Omega_R = \sqrt{\Omega_R^{(0)2}+\Delta^2}$

also im ''-System wieder einfache Dynamik

2 Rücktrafo nötig um ins Laborsystem zurück zu kommen

② Angenommen Wechselfeld ist linear polarisiert

$$H = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z - g\frac{\mu}{2}B_1\sigma_x\cos(\omega t)$$

selbe Transformation: $H' = -\frac{\hbar}{2}\Delta\sigma_z - g\frac{\mu}{2}B_1\left[\cos^2(\omega t)\sigma_x + \sin(\omega t)\cos(\omega t)\sigma_y\right]$

Rotating Wave Approximation (RWA)

$$H' = \underbrace{-\frac{\hbar}{2}\Delta\sigma_z - g\frac{\mu}{4}B_1\sigma_x}_{\text{statischer Term im '-System}} - g\frac{\mu}{4}B_1\left[\underbrace{(2\cos^2(\omega t)-1)}_{\cos(2\omega t)}\sigma_x + \underbrace{2\sin(\omega t)\cos(\omega t)}_{\sin(2\omega t)}\sigma_y\right]$$

mit Rabi Fr. $\Omega_R^{(0)} = g\frac{\mu B_1}{2\hbar}$

oszilliert schnell, keine Ressonanz

$\Rightarrow$ kleiner Effekt in RWA zuvernachlässigen

③ Drehung um y-Achse? (Übungsaufgabe außerhalb Übung)

Bloch Gleichungen

Übergang zur klassischen Beschreibung $\hat{\vec{M}} = \gamma\hat{\vec{S}}$ $\quad\gamma = \frac{g\mu}{\hbar}$

$\langle\hat{\vec{M}}\rangle_t = ?$ $\quad H = -\gamma\hat{\vec{S}}\cdot\vec{B}$

es gilt: $\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}\langle\hat{S}\rangle = \langle[\hat{S},\hat{H}]\rangle}$ für beliebige Observablen

$$[S_x, H] = -\gamma[S_x, S_xB_x + S_yB_y + S_zB_z] = i\hbar\gamma[S_yB_z - S_zB_y] = i\hbar\gamma(\hat{\vec{S}}\times\vec{B})_x$$

$[S_x, S_y] = i\hbar S_z$ (zykl. Vert.)

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\langle\hat{\vec{S}}\rangle = \gamma\langle\hat{\vec{S}}\rangle\times\vec{B}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\langle\hat{\vec{M}}\rangle = \gamma\langle\hat{\vec{M}}\rangle\times\vec{B} \Rightarrow \text{Larmorpräzession mit } \omega_0 = \gamma|\vec{B}|$$

Ausblick Für $\vec{B} = B_0\hat{e}_z$, Paramagnetismus

$H = -\hat{\vec{M}}\vec{B} \Rightarrow$ quanten + statistisch: $\langle\hat{\vec{M}}\rangle = M_0(T)\hat{e}_z$

$M_0(T) = \gamma\frac{\hbar}{2}\tanh\left(\frac{\hbar\omega_0}{2k_BT}\right)$

Relaxation: $\frac{d}{dt}\langle\hat{\vec{M}}\rangle = \underbrace{\gamma\langle\hat{\vec{M}}\rangle\times\vec{B}}_{\text{kohärente Dynamik}} - \underbrace{\overset{\text{Relaxationsrate}}{\Gamma}(\langle\hat{\vec{M}}\rangle - M_0(T)\hat{e}_z)}_{\text{inkohärente Relaxation}}$

- Relaxation bis zum thermischen Mittelwert
- Es stellt sich raus, dass z-Komponente und x, y-Komp. verschieden schnell relaxier

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\langle\hat{\vec{M}}\rangle = \gamma\langle\hat{\vec{M}}\rangle\times B\hat{e}_z - \frac{1}{T_1}(\langle M_z\rangle - M_0)\hat{e}_z - \frac{1}{T_2}(\langle M_x\rangle\hat{e}_x + \langle M_y\rangle\hat{e}_y)$$