9a) $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ wobei $\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$

In der Basis $\left\{ |\uparrow\rangle = |S_z = +\frac{\hbar}{2}\rangle ; \ |\downarrow\rangle = |S_z = -\frac{\hbar}{2}\rangle \right\}$

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}(t) = \underbrace{-\mu_z B_z^0}_{H_0} \underbrace{-\mu_x B_x^r(t) - \mu_y B_y^r(t)}_{V(t)}$$

$$\begin{cases} H_0 = -\gamma \frac{\hbar}{2} \sigma_z B_z^0 = -\underbrace{\frac{\gamma\hbar}{2} B_z^0}_{\epsilon_0} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\epsilon_0 & 0 \\ 0 & +\epsilon_0 \end{pmatrix} \\ V(t) = -\gamma \frac{\hbar}{2} \left[\sigma_x B_r \cos\omega t + \sigma_y B_r \sin\omega t) \right] \quad \text{für } t > 0 \end{cases}$$

$$= -\underbrace{\frac{\gamma\hbar}{2} B_r}_{G} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i} \right]$$

$$= -G \begin{pmatrix} 0 & \frac{\cancel{e^{i\omega t}} + e^{-i\omega t} - \cancel{e^{i\omega t}} + e^{-i\omega t}}{2} \\ \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} + e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2} & 0 \end{pmatrix} = -G \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}$$

9b) $$P_\downarrow(t) = |a_{\downarrow\uparrow}|^2(t), \text{ wobei } a_{\downarrow\uparrow}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle \downarrow | V(t') | \uparrow \rangle e^{i\omega_{\downarrow\uparrow} t'} dt'$$

in I. Ordnung Störungstheorie Gl. 2.69 wobei $\omega_{\downarrow\uparrow} = 2\epsilon_0$

$$a_{\downarrow\uparrow}(t) = -\frac{1}{i\hbar} G \int_0^t dt' \, e^{i[\omega + \omega_{\downarrow\uparrow}]t'} = -\frac{1}{i\hbar} G \frac{1}{i(\omega + \omega_{\downarrow\uparrow})} \left[e^{i(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t} - 1 \right]$$

$$= \frac{G \, e^{i\frac{(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t}{2}}}{\hbar(\omega + \omega_{\downarrow\uparrow})} \left[e^{i\frac{(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t}{2}} - e^{-i\frac{(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t}{2}} \right]$$

$$= 2i \, e^{i\frac{(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t}{2}} \frac{G}{\hbar(\omega + \omega_{\downarrow\uparrow})} \sin\left(\frac{\omega + \omega_{\downarrow\uparrow}}{2} t \right)$$

$$a_{\downarrow\uparrow}(t) = e^{i\frac{(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t}{2}} \frac{G}{\hbar} \frac{\sin\left(\frac{\omega+\omega_{\downarrow\uparrow}}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega+\omega_{\downarrow\uparrow}}{2}\right)} \Rightarrow P_\downarrow(t) = \frac{G^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega+\omega_{\downarrow\uparrow}}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega+\omega_{\downarrow\uparrow}}{2}\right)^2}$$

9c) Exakte Lösung

Im WW-Bild hat man

[illegible]

$$\|$$

$$\sum_{n=\uparrow,\downarrow} b_n(t)\, U_0^\dagger |n\rangle = U_0^\dagger |\uparrow\rangle + \sum_n \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt'\, U_0^\dagger(t') V(t')\, \cancel{U_0(t)\, U^\dagger(t')}\, |n\rangle$$

$$\sum_{n=\uparrow,\downarrow} b_n(t)\, |n\rangle = |\uparrow\rangle +$$

9c) Exakte Lösung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = V_I(t) |\psi_I(t)\rangle \quad \text{mit} \quad |\psi_I(t)\rangle = \sum_{n=\uparrow,\downarrow} b_n(t) |n\rangle$$

$$\left(H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \right)$$

$$V_I(t) = U_0^\dagger V(t) U_0 = e^{+\frac{iH_0 t}{\hbar}} V(t)\, e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}$$

$$\langle k| \sum_n i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b_n(t) \, |n\rangle = \langle k| e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} V(t)\, e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} |n\rangle \, b_n(t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b_k(t) = \sum_{n=\uparrow,\downarrow} e^{i\frac{E_k - E_n}{\hbar}t} V_{kn}(t) \, b_n(t) = \sum_{n=\uparrow,\downarrow} e^{i\omega_{kn}t} V_{kn}(t) \, b_n(t)$$

In unserem Fall

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b_\downarrow(t) = e^{i\omega_{\downarrow\uparrow}t} V_{\downarrow\uparrow}(t)\, b_\uparrow(t) = -\Gamma e^{i(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t} b_\uparrow(t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b_\uparrow(t) = e^{-i\omega_{\downarrow\uparrow}t} V_{\uparrow\downarrow}(t)\, b_\downarrow(t) = -\Gamma e^{-i(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t} b_\downarrow(t) \end{cases}$$

× System mit gekoppelten linearen Differentialgleichungen

Man kann lösen z.B. so...

$$\begin{cases} i\hbar \ddot{b}_\downarrow(t) = -i\Gamma(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow}) e^{+i(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t} b_\uparrow(t) - \Gamma e^{i(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t} \dot{b}_\uparrow(t) \\ b_\uparrow(t) = -\frac{i\hbar}{\Gamma} e^{-i(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t} \dot{b}_\downarrow(t) \\ \dot{b}_\uparrow(t) = -\frac{\Gamma}{i\hbar} e^{-i(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t} b_\downarrow(t) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \ddot{b}_\downarrow(t) = -\hbar(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow}) \dot{b}_\downarrow(t) + \frac{\Gamma^2}{i\hbar} b_\downarrow(t)$$

$$\ddot{b}_\downarrow(t) - i(\omega_{\downarrow\uparrow}+\omega) \dot{b}_\downarrow(t) + \frac{\Gamma^2}{\hbar^2} b_\downarrow(t) = 0$$

$$\begin{cases} \ddot{b}_\downarrow(t) - i(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})\,\dot{b}_\downarrow(t) + \frac{G^2}{\hbar^2}\, b_\downarrow(t) = 0 \\ b_\downarrow(0) = 0 \\ \dot{b}_\downarrow(0) = -\frac{G}{i\hbar}\, b_\uparrow(0) = \frac{iG}{\hbar} \end{cases} \iff \quad a\ddot{x} + b\dot{x} + cx = 0$$

$$a = 1 \quad b = -i(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})$$

$$c = \frac{G^2}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \quad x(t) = e^{-\frac{b}{2a}t}\left[A\cos\mu t + B\sin\mu t\right] \qquad \mu = \frac{1}{2a}\sqrt{4ac-b^2}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{cases} b_\downarrow(t) = e^{+\frac{i(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t}{2}}\left[A\cos\mu t + B\sin\mu t\right], \quad \mu = \frac{1}{2}\sqrt{4\frac{G^2}{\hbar^2} + (\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})^2} \\ b_\downarrow(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad A = 0 \\ \dot{b}_\downarrow(0) = \underbrace{\ldots}_{\cancel{\left(\frac{d}{dt}\exp\right) \times B\sin\mu t}} + \mu B \underbrace{\cos\mu t}_{=1} = \frac{iG}{\hbar} \Rightarrow B = \frac{iG}{\mu\hbar} \end{cases}$$

$$b_\downarrow(t) = e^{\frac{i(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})t}{2}}\, \frac{iG}{\hbar\mu}\, \sin\mu t$$

$$P_\downarrow(t) = |b_\downarrow(t)|^2 = \frac{G^2}{\hbar^2\mu^2}\sin^2\mu t = \frac{G^2}{\hbar^2}\, \frac{\sin^2\left[\frac{1}{2\hbar}\sqrt{G^2+\hbar^2(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})^2}\,t\right]}{\left[\frac{1}{2\hbar}\sqrt{G^2+\hbar^2(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})^2}\right]^2}$$

für $G \ll \hbar(\omega+\omega_{\downarrow\uparrow})$

man hat wieder

$$P_\downarrow(t) = \frac{G^2}{\hbar^2}\, \frac{\sin^2\left[\left(\frac{\omega+\omega_{\downarrow\uparrow}}{2}\right)t\right]}{\left(\frac{\omega+\omega_{\downarrow\uparrow}}{2}\right)^2}$$

d.h. genau wie in $9b$

Auf der andere Seite, divergiert jetzt nicht mehr $P_\downarrow(t)$, wenn $G \to \infty$

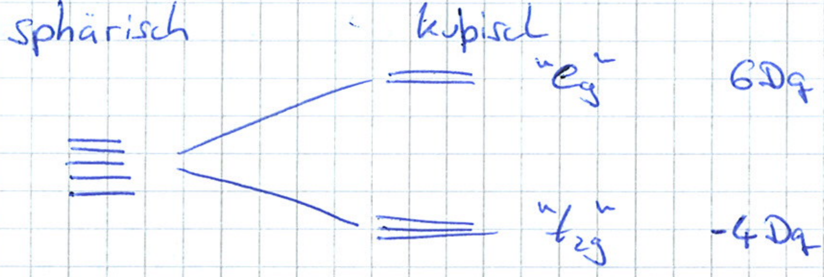
Musterlösung Aufgabe 10

a) Da der Kristallfeldoperator nicht die Spin Unterräume "up ↑" und "down ↓" mischt reduziert sich das Problem auf eine 5×5 Matrix, die größtenteils schon diagonal ist. Die Eigenzustände sind:

$$\left.\begin{array}{l} |t_{2g}^1 \uparrow\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,\uparrow\rangle - |-2,\uparrow\rangle\right) \\ |t_{2g}^2 \uparrow\rangle := \quad |1,\uparrow\rangle \;,\; |t_{2g}^3 \uparrow\rangle := |-1,\uparrow\rangle \end{array}\right\} \text{zum Eigenwert } -4Dq$$

$$\left.\begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,\uparrow\rangle + |-2,\uparrow\rangle\right) \\ |0,\uparrow\rangle \end{array}\right\} \text{zum Eigenwert } 6Dq$$

für Spin "down ↓" equivalente Zustände



b) Da nun der Operator $\hat{H}_{SO} = \zeta \hat{L}\hat{S}$ sehr wohl Spin-Unterräume mischt ⊛ schreiben wir in der Basis $|t_{2g}^1 \uparrow\rangle\, |t_{2g}^1 \downarrow\rangle\, |t_{2g}^2 \uparrow\rangle\, |t_{2g}^2 \downarrow\rangle\, |t_{2g}^3 \uparrow\rangle\, |t_{2g}^3 \downarrow\rangle$

$$\underline{\underline{H_{SO}}} = \zeta \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Auch hier müssen wir eigentlich nur zwei 2×2 Matrizen diagonalisieren

(*) der spin-orbit operator schreibt sich in der L_z S_z Basis

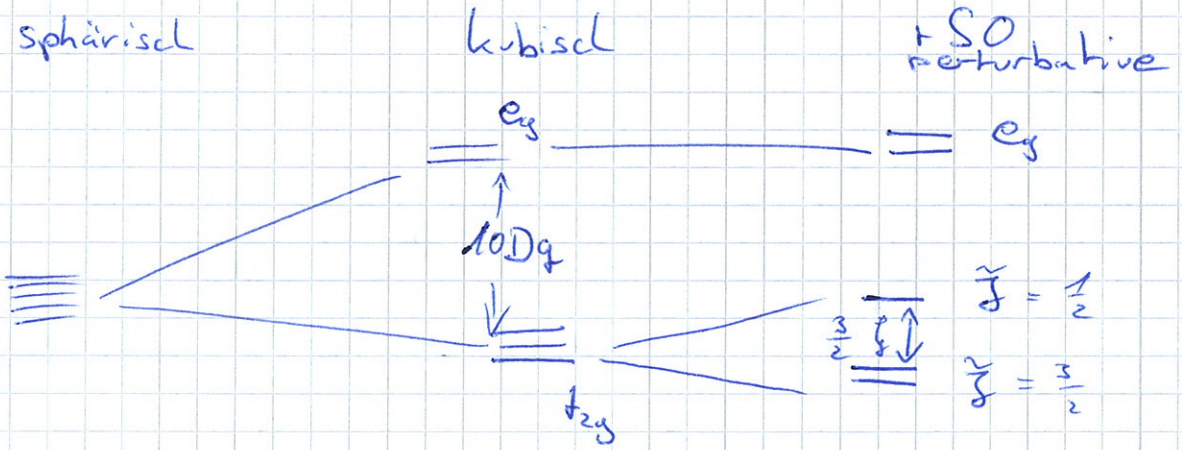
$$\hat{H}_{SO} = \sum_{m,\sigma} \zeta\, m\, \sigma \underbrace{c^\dagger_{m,\sigma} c_{m\sigma}}_{\hat{n}_{m,\sigma}} + \frac{1}{2}\zeta \sqrt{(L+m+1)(L-m)} \times \left(c^\dagger_{m+1,\downarrow} c_{m,\uparrow} + c^\dagger_{m,\uparrow} c_{m+1,\downarrow} \right)$$

---

c) The Eigenvalues of $\underline{\underline{H_{SO}}}$ in t_{2g} basis are $\underbrace{-\frac{\zeta}{2}}_{4\times}$ & $\underbrace{+\zeta}_{2\times}$

Diese Aufspaltung der t_{2g} ist dann offensichtlich, wenn man sich klar macht, dass sie sich wie ein Triplet mit "fiktivem" Drehimpuls $L=1$ verhalten, welches natürlich durch die Spin-Bahn kopplung in ein $\tilde{J} = \frac{3}{2}$ Quartet und ein $\tilde{J} = \frac{1}{2}$ Doublet aufgespalten werden.

$\Rightarrow$



Das e_g-Doublett ist unmagnetisch (!) und hat deswegen keine Spin-Bahn Wechselwirkung.
(Allerdings mischt SO e_g und t_{2g})

Die Differenz zur exakten Lösung stammt von der Vernachlässigung der Mischung zwischen e_g und t_{2g} durch die Spin-Bahn-Kopplung d.h. man vernachlässigt Terme, die $\sim \left(\frac{\xi}{Dq}\right)^2$