Bsp.

1) $H(t) = g_s \mu_B \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}(t) = g_s \mu_B \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} B_z & B_x \Theta(t)(1-e^{-t/\tau}) \\ B_x\Theta(t)(1-e^{-t/\tau}) & -B_z \end{pmatrix}$

TEST B 3) $g_s \Rightarrow g$; $B_0 \Rightarrow \mathcal{B}$

a) SUDDEN APPROX. $\underset{\text{Einschalt-Zeit}}{\tau} \ll \frac{\hbar}{|\Delta E_{Hol}|} = \frac{\hbar}{g_s \mu_B B_z}$

ADIABATISCHE NÄHERUNG $\tau \gg \frac{\hbar}{g_s \mu_B B_z}$

b) mit $B_z = 4B_0$; $B_y = 3B_0$ und $(1-e^{-t/\tau}) \approx 1$

$H(t \gg \tau) \approx \tilde{H} = g_s \mu_B \frac{\hbar}{2} B_0 \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 3 & -4 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{vmatrix} 4-\lambda & 3 \\ 3 & -4-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 16 - 9 \Rightarrow \lambda^2 = 25$

$\lambda = \pm 5$

$E_+ = \frac{5}{2}\hbar \overbrace{\mu_B g_s B_0}^{G} \Rightarrow -x + 3y = \phi \quad |e_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$

$E_- = -\frac{5}{2}\hbar \mu_B g_s B_0 \Rightarrow 9x + 3y = \phi \quad |e_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix}$

$|\psi(t=0)\rangle =$ G.S. von $H(t=0) = g_s \mu_B \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle_z$

Zeitentwicklung (Sudden Approx.): $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |\psi(0)\rangle$

$= e^{-\frac{iE_+t}{\hbar}} \langle e_+|\psi(0)\rangle |e_+\rangle + e^{-\frac{iE_-t}{\hbar}} \langle e_-|\psi(0)\rangle |e_-\rangle$

mit $\langle e_+|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}$; $\langle e_-|\psi(0)\rangle = -3/\sqrt{10}$

$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 3e^{-\frac{5}{2}Git} - 3e^{\frac{5}{2}iGt} \\ e^{-\frac{5}{2}iGt} + 9e^{\frac{5}{2}iGt} \end{pmatrix} = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} -6i\sin(\frac{5}{2}Gt) \\ 10\cos(\frac{5}{2}Gt) + i8\sin(\frac{5}{2}Gt) \end{pmatrix}$

$P_\uparrow(t) = \frac{36}{100} \sin^2(\frac{5}{2}Gt) = \frac{9}{25} \sin^2(\frac{5}{2}\mu_B g_s B_0 t)$

c) ADIABATISCHE NÄHERUNG : das System bleibt in GS von $H(t)$

$H(t^* = \tau \ln 3) = g_s \mu_B \frac{\hbar}{2} B_0 \begin{pmatrix} 4 & 3\,(1-\frac{1}{3}) \\ 3\cdot(1-\frac{1}{3}) & -4 \end{pmatrix} = g_s \mu_B \frac{\hbar}{2} B_0 \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & -4 \end{pmatrix}$

TEST B $\ln 2$; $(1-\frac{1}{2})$; $2 \to 3/2$

$\Rightarrow \lambda^2 - 16 - 4 = 0 \quad \lambda = \pm\sqrt{20} \quad E_{GS}^{\text{Adiab.}} = -g_s \mu_B \frac{\hbar}{2} B_0 \sqrt{20}$

$\Rightarrow \lambda^2 - 16 - \frac{9}{4} = \phi \quad \lambda = \pm \frac{\sqrt{73}}{2} \quad E_{GS}^{\text{Adiab}} = -g \mu_B \frac{\hbar}{2} \mathcal{B} \frac{\sqrt{73}}{2}$

Bsp. 3c) $H = \begin{pmatrix} \epsilon & \emptyset & \emptyset \\ \emptyset & 2\epsilon & \emptyset \\ \emptyset & \emptyset & 10\epsilon \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \emptyset & \emptyset & V \\ \emptyset & \emptyset & V \\ V & V & \emptyset \end{pmatrix} \cos(\omega t)\,\theta(t)$

TEST B : Bsp. 1b) $10\epsilon \to 9\epsilon_0$; $\epsilon \Rightarrow \epsilon_0$

i) $|GS\rangle(t=0)\rangle = |1\rangle$

Mögliche Übergänge in 1. Ordnung für $t>0$: $\begin{cases} 1 \to 2 & \text{NICHT MÖGLICH } V_{12}=\emptyset \\ 1 \to 3 & \checkmark \text{ JA} \end{cases}$

ii) $$W_{3\leftarrow 1} = \frac{\pi}{2\hbar} V^2 \cdot \left[\delta(9\epsilon + \hbar\omega) + \delta(9\epsilon - \hbar\omega)\right]$$ $9\epsilon \to 8\epsilon_0$

iii) $$\underbrace{\frac{\hbar}{V}}_{\text{Gültigkeit der 1. Ordnung}} \gg t \gg \begin{cases} \dfrac{\hbar}{|E_3-E_1|} = \dfrac{\hbar}{9\epsilon} \\ \text{ODER AUCH:} \\ \dfrac{\hbar}{|E_3-E_1 \mp \hbar\omega|} = \dfrac{\hbar}{|9\epsilon - \hbar\omega|} \end{cases}$$

KEINE INTERFERENZ ZWISCHEN $\pm\hbar\omega$ BEITRÄGEN

NÄHRUNG MIT DER δ-FUNKTION

$9\epsilon \to 8\epsilon_0$

Bsp. 3d) $$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$ Klassische Hamilton-Gleichung $\dot{p} = -\frac{dV}{dx}$;

Im Heisenberg-Darstellung: $\frac{d}{dt} P_H(t) = -\frac{d}{dx_H} V(x_H)$ (für die Operatoren).

Für die Erwartungswerte $\langle x\rangle(t)$; $\langle p\rangle(t)$ ist die Identität mit den Hamilton-Gleichungen nur gültig wenn $V(x) = \sum_n c_n x^n$ mit $n \leq 2$, weil $\langle -\frac{d}{dx} x^3 \rangle = -3\langle x^2\rangle \neq -3\langle x\rangle^2$

$\Rightarrow$ Gleiche Dynamik wie im Klassischen Problem nur für (i) $V(x) = \text{Konst}$; (iii) $V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 + Ax$

TEST B: für (ii) $V(x) = \text{Konst}$; (iv) $V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 + \alpha x$

Musterlösung   Abweichungen für Test B in rot

Bsp. 3.a / 1a Eine grobe Abschätzung ist, dass folgende l berücksichtigt werden müssen:

$$l \lesssim k \cdot a = \frac{\pi}{\cancel{4}\cancel{a}} \cdot 2\cancel{a} \qquad \text{also } l = 0, 1 \text{ und evtl. } 2, 3, 4, 5, 6$$

$$= \frac{\pi}{2a} 2a \qquad \text{also } l = 0, 1, 2, \text{ evtl. } 3$$

3.b / 1d Die Dichtematrix ist ein hermitescher Operator mit Spur(klasse) Spur $\rho = 1$

Allg. Matrix $2N^2$ reelle Einträge

hermitesch: $a_{ij} = a_{ji}^*$ $\Rightarrow$ N^2 reelle Einträge

wegen der Spur verbleiben $\underline{N^2 - 1}$ reelle Parameter

(Die positive-Definitheit reduziert nicht die Anzahl dieser Parameter, aber den zulässigen reellen Wertebereich)

Bsp. 2 / Bsp. 4 a) $|\uparrow_y\rangle$ / $|\downarrow_y\rangle$ $= [|\uparrow\rangle \pm i|\downarrow\rangle]/\sqrt{2}$

$$\Rightarrow \hat{\rho} = \frac{1}{2}\left[|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \pm i|\downarrow\rangle\langle\uparrow| \mp i|\uparrow\rangle\langle\downarrow|\right]$$

bzw. als Matrix $\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \mp i \\ \pm i & 1 \end{pmatrix}$ ($|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$)   (*) s.u.

b) Das Magnetfeld muss in x-Richtung wirken

$$e^{-iHt/\hbar}|\uparrow\rangle \stackrel{!}{=} [|\uparrow\rangle \pm i|\downarrow\rangle]/\sqrt{2} \cdot e^{i\phi}$$

$$e^{-iHt/\hbar}|\uparrow\rangle = e^{-iHt/\hbar}\left\{[|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle]/\sqrt{2} + [|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle]/\sqrt{2}\right\}$$

$$= e^{-i g_s \mu_B \frac{\hbar}{2}\sigma_x B_x t/\hbar} \quad ''$$

$$= e^{-i g_s \mu_B B_x t/2}[|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle]/\sqrt{2}$$
$$+ e^{+i g_s \mu_B B_x t/2}[|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle]/\sqrt{2}$$

$$= e^{-i g_s \mu_B B_x t/2}\left[\left(1 + e^{2 i g_s \mu_B B_x t/2}\right)|\uparrow\rangle + \left(1 - e^{2 i g_s \mu_B B_x t/2}\right)|\downarrow\rangle\right]$$

$$\stackrel{!}{=} e^{i\phi}[|\uparrow\rangle \pm i|\downarrow\rangle]$$

$\Rightarrow \left(1 - e^{2ig_s\mu_B B_x t/2}\right) = \pm i\left(1 + e^{2ig_s\mu_B B_x t/2}\right)$

$\Rightarrow \tan\left(\tfrac12 g_s \mu_B B_x t\right) = -1 \Rightarrow \tfrac12 g_s\mu_B B_x t = \begin{cases} \frac34\pi + n\pi \\ \frac14\pi + n\pi \end{cases} \quad n \in \mathbb{N}$

$t = \left(\tfrac32\pi + n\pi\right)\frac{1}{g_s\mu_B B_x}$
$\left(\tfrac12\pi + n\pi\right)$

c) $\hat\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$

$= \left(\frac{|k\rangle|\uparrow\rangle}{\sqrt2} + |k'\rangle \frac{|\uparrow\rangle \pm i|\downarrow\rangle}{2}\right)\left(\frac{\langle\uparrow|\langle k|}{\sqrt2} + \frac{\langle\uparrow| \mp i\langle\downarrow|}{2}\langle k'|\right)$

bei Gruppe B außerdem $|k\rangle \leftrightarrow |k'\rangle$

$= \frac12 |k\rangle|\uparrow\rangle\langle\uparrow|\langle k| + \frac14|k'\rangle|\uparrow\rangle\langle\uparrow|\langle k'| + \frac14 |k'\rangle|\downarrow\rangle\langle\downarrow|\langle k'| \pm \frac i4 |k'\rangle|\downarrow\rangle\langle\uparrow|\langle k'|$

$\mp \frac i4 |k'\rangle|\uparrow\rangle\langle\downarrow|\langle k'| + \frac{1}{2\sqrt2}|k\rangle|\uparrow\rangle\langle\uparrow|\langle k'| + \frac{1}{2\sqrt2}|k'\rangle|\uparrow\rangle\langle\uparrow|\langle k|$

$\pm \frac{i}{2\sqrt2}|k\rangle|\uparrow\rangle\langle\downarrow|\langle k'| \mp \frac{i}{2\sqrt2}|k'\rangle|\downarrow\rangle\langle\uparrow|\langle k|$

bzw. als Matrix

$$\begin{array}{c} |k\rangle|\uparrow\rangle \quad |k'\rangle|\uparrow\rangle \quad |k'\rangle|\downarrow\rangle \\ \begin{pmatrix} \frac12 & \frac{1}{2\sqrt2} & \mp\frac{i}{2\sqrt2} \\ \frac{1}{2\sqrt2} & \frac14 & \mp\frac{i}{4} \\ \pm\frac{i}{2\sqrt2} & \pm\frac{i}{4} & \frac14 \end{pmatrix} \end{array}$$

d) Bei der Spur $\int d^3q \,\langle q|\dots|q\rangle$ fällt die 2. Zeile weg, da $\langle q|k\rangle \sim \delta(q-k)$ und $\langle k'|q\rangle \sim \delta(q-k')$ aber $k \neq k'$

$\Rightarrow \hat\rho_{spin} = \frac34|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac14|\downarrow\rangle\langle\downarrow| \pm \frac i4 |\downarrow\rangle\langle\uparrow| \mp \frac i4|\uparrow\rangle\langle\downarrow|$

bzw $\begin{pmatrix} \frac34 & \mp\frac{i}{4} \\ \pm\frac{i}{4} & \frac14 \end{pmatrix}$

$\quad |\uparrow\rangle \quad |\downarrow\rangle$

e) Wahrsch. $3/4$ $S_z = +\hbar/2$ und $1/4$ $S_z = -\hbar/2$

⊛ Ergänzung zu a) und d)

a) $\mathrm{Spur}\,\rho^2 = \frac14 \mathrm{Spur}\begin{pmatrix} 1 & \mp i \\ \pm i & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \mp i \\ \pm i & 1\end{pmatrix} = \frac14 \mathrm{Spur}\begin{pmatrix} 2 & * \\ * & 2\end{pmatrix} = 1$

$\Rightarrow$ a) ist reiner Zustand

d) $\mathrm{Spur}\,\rho^2 = \frac{1}{16} \mathrm{Spur}\begin{pmatrix} 3 & \mp i \\ \pm i & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & \mp i \\ \pm i & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{16} \mathrm{Spur}\begin{pmatrix} 10 & * \\ * & 2\end{pmatrix} = \frac{12}{16}$

$\neq 1 \Rightarrow$ d) ist kein reiner Zustand

Beispiel 4) (Test A) / Beispiel 2) (Test B)

a)

$$f(\vec{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r\, e^{-i\vec{q}\vec{r}}\, V(\vec{r}) \quad , \vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$$

$$= k\begin{pmatrix}\cos\varphi\sin\theta\\ \sin\varphi\sin\theta\\ \cos\theta\end{pmatrix} - k\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

$$f(\vec{q}) = -\frac{m(V_0 d^3)/\alpha}{2\pi\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,dy\,dz\, e^{-i\vec{q}\vec{r}}\,\delta(x-nd)\,\delta(y)\,\delta(z)$$

$$= -\frac{m(V_0 d^3)/\alpha}{2\pi\hbar^2}\sum_{n=-N}^{+N}\left(e^{-iq_x d}\right)^n$$

$$= -\frac{m(V_0 d^3)/\alpha}{2\pi\hbar^2}\, e^{+iq_x dN}\sum_{n=-N}^{N}\left(e^{-iq_x d}\right)^{n+N} \quad \left[\begin{array}{l} n+N = m,\\ m: 0\ldots 2N\end{array}\right.$$

$$= -\frac{m(V_0 d^3)/\alpha}{2\pi\hbar^2}\, e^{iq_x dN}\underbrace{\sum_{m=0}^{2N}\left(e^{-iq_x d}\right)^m}_{\frac{1-e^{-iq_x d(2N+1)}}{1-e^{-iq_x d}}}$$

$$= -\frac{m(V_0 d^3)/\alpha}{2\pi\hbar^2}\,\frac{e^{iq_x d(N+1/2)} - e^{-iq_x d(N+1/2)}}{e^{iq_x d 1/2} - e^{-iq_x d 1/2}} \qquad \cancel{\frac{e^{-iq_x d 1/2}}{e^{-iq_x d 1/2}}}$$

$$\boxed{f(\vec{q}) = -\frac{m(V_0 d^3)/\alpha}{2\pi\hbar^2}\,\frac{\sin(q_x d[N+1/2])}{\sin(q_x d 1/2)}}$$

b) $$f(\theta,\varphi) = -\frac{m(V_0 d^3)/\alpha}{2\pi\hbar^2}\cdot\frac{\sin(kd\cos\varphi\sin\theta[N+1/2])}{\sin(kd\cos\varphi\sin\theta 1/2)}$$

$$\phi = 0 \Rightarrow \frac{\partial\sigma}{\partial\Omega} = |f(\theta,0)|^2 = \left(\frac{m(V_0 d^3)/\alpha}{2\pi\hbar^2}\right)^2\frac{\sin^2(kd\sin\theta[N+1/2])}{\sin^2(kd\sin\theta 1/2)}$$

$\Rightarrow$

⇒ Maximum tritt auf wenn Nenner 0 wird:

$$\boxed{\tfrac{1}{2} k d \sin\Theta = n\pi} \quad , n \in \mathbb{Z}$$

oder mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ $\Rightarrow$ $n\lambda = d \sin\Theta$

Für diese Winkel erhält man für $\frac{\partial\sigma}{\partial\Theta}(\Theta, \phi = 0)$ mittels l'Hospital:

$$\boxed{\frac{\partial\sigma}{\partial\Theta} = \left(\frac{m (V_0 d^3)/\alpha}{2\pi\hbar^2}\right)^2 (2N+1)^2}$$