

# Kapitel 8

## Anwendungen: Zwei-Zustands-Systeme

Bei Systemen mit nur zwei relevanten Zuständen sind quantenmechanische Effekte am stärksten. Solche Systeme werden auch für besonders wichtige Anwendungen der Quantenmechanik benutzt, wie z.B. Magnetresonanz, Laser, oder Quantencomputer.

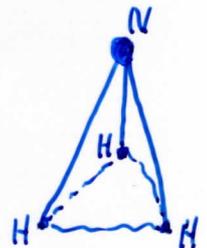
Qubits

$|1\rangle + c|2\rangle$  mit komplexem  $c$

--> Vorlesung Quantum Information WS

### 8.1 Nicht-zeitabhängige Wechselwirkung

Zunächst betrachten wir ein System, in dem ein Teilchen zwischen zwei Zuständen tunneln kann. Als Beispiel dient uns das Ammoniak-Molekül.



#### 8.1.1 Doppelter Potentialtopf: Beispiel NH<sub>3</sub>

Im Ammoniak-Molekül  $NH_3$  bilden die Wasserstoffatome ein (vertikal gedachtes) Dreieck, die Basis einer Pyramide. Das Stickstoffatom kann sich in gleichwertigen Positionen links oder rechts der Ebene des Dreiecks befinden, zwischen denen es eine Potentialbarriere gibt, durch die das Stickstoffatom (relativ zur Ebene der Wasserstoffatome) tunneln kann.

Die potentielle Energie für das Stickstoffatom ist symmetrisch für Koordinaten  $x$  links bzw. rechts der Ebene. Deshalb sind alle Eigenzustände von  $NH_3$  auch Eigenzustände des Paritätsoperators, d.h. symmetrische bzw.

## 8.1. Nicht-zeitabhängige Wechselwirkung

antisymmetrische Zustände  $|\psi_{S,A}\rangle$  mit

$$\psi_{S,A}(x) = \pm \psi_{S,A}(-x), \quad (8.1)$$

wobei  $x$  die Koordinate senkrecht zur Basisebene ist. Aus dem Knotensatz wissen wir, dass der Grundzustand symmetrisch ist, und der erste angeregte Zustand antisymmetrisch.<sup>1</sup>

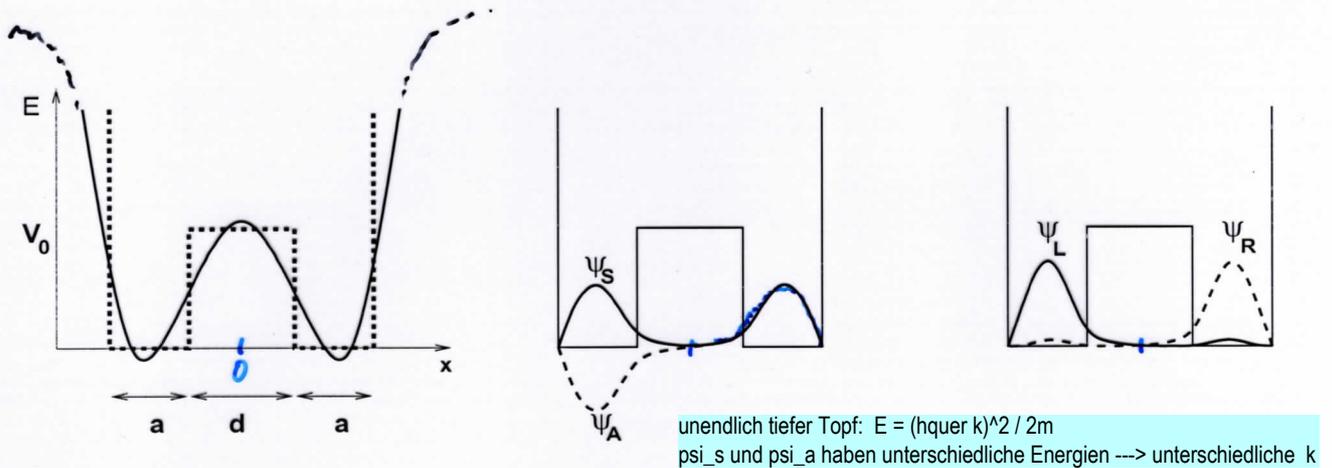


Abbildung 8.1: Links: Näherungsweise realistisches Doppelmuldenpotential und idealisiertes Kastenpotential für das Stickstoffatom in  $NH_3$ . Mitte: Skizze der tiefstliegenden Eigenfunktionen. Rechts: Die Linearkombinationen  $|\psi_{L,R}\rangle = (|\psi_S\rangle \pm |\psi_A\rangle) / \sqrt{2}$ .

Um die folgenden Überlegungen zu vereinfachen, behandeln wir das Potential für das Stickstoffatom näherungsweise als einen unendlich tiefen doppelten Potentialtopf (s. Abb. 8.1) mit einer Barriere der Höhe  $V_0$ . Wir werden nur die beiden tiefstliegenden Eigenzustände  $|\psi_S\rangle$  und  $|\psi_A\rangle$  berechnen. Die Rechnung verläuft analog zum endlich tiefen Potentialtopf (Kap. 4.3.2). Die Wellenfunktion muss bei  $x = \pm(\frac{d}{2} + a)$  verschwinden. Bei Ammoniak ist  $V_0$  (viel) größer als die tiefstliegenden Eigenenergien. Der Ansatz lautet dann

$$\psi_{S,A}(x) = \begin{cases} \pm c \sin\left(k\left(\frac{d}{2} + a + x\right)\right) & \text{(linker Bereich)} \\ c' \cosh \kappa x & \text{(Mitte, symmetrisch)} \\ c' \sinh \kappa x & \text{(Mitte, antisymmetrisch)} \\ c \sin\left(k\left(\frac{d}{2} + a - x\right)\right) & \text{(rechter Bereich)} \end{cases} \quad (8.2)$$

unterschiedl.  $k$  und  $\kappa$  für  $\psi_S$  und  $\psi_A$

<sup>1</sup>Es gibt natürlich weitere angeregte Zustände, auch bezüglich Rotations- und internen Vibrationsmoden. Diese können hier unberücksichtigt bleiben.

mit  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  und  $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ . Aus den Stetigkeitsbedingungen folgt

$$\tan ka = -\frac{k}{\kappa} \coth \frac{\kappa d}{2} \quad (8.3)$$

für die symmetrische, und dasselbe mit  $\tanh$  für die antisymmetrische Lösung. Diese Gleichungen kann man numerisch oder graphisch lösen. Qualitativ können wir die Form der Wellenfunktionen für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand schon ohne weitere Rechnung skizzieren, aufgrund der früheren Ergebnisse beim endlich tiefen Potentialtopf, dem Knotensatz, und der Stetigkeit von  $\psi(x)$ . Eine solche Skizze ist in Abb. 8.1 wiedergegeben.

Wir betrachten zunächst den Grenzfall, dass die Potentialbarriere unendlich hoch ist. Dann muss die Wellenfunktion innerhalb der Barriere verschwinden ( $c' = 0$ ) und wir haben zwei unendlich tiefe Potentialtöpfe, mit den Eigenenergien  $\frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ma^2}$ , d.h. der Grundzustandsenergie

$$E_\infty = \frac{\pi^2 1^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (8.4)$$

in beiden Töpfen. Die Zustände links und rechts sind hier orthogonal und man kann beliebige Linearkombinationen der Zustände gleicher Energie bilden, insbesondere auch solche, die gleichzeitig Eigenfunktionen  $\psi_{S,A}(x)$  des Paritätsoperators sind. Dies sind hier die Summe bzw. Differenz der Grundzustandsfunktionen in den beiden Töpfen, beide mit derselben Energie  $E_\infty$ .

(1 Teilchen, rechts oder links, oder Linearkombination)

Bei  $NH_3$  ist die Potentialschwelle zwischen den beiden Töpfen nicht unendlich groß, aber gegenüber den betrachteten Eigenenergien sehr hoch und breit, d.h.  $E \ll V_0$  und  $\kappa a \gg 1$ . Die sinusförmige Wellenfunktion in den beiden Töpfen ist jetzt breiter, da sie in die Barriere hineinragt. Deshalb ist zu erwarten, dass die Energien niedriger liegen. In der Tat erhält man aus (8.3) die Energien der tiefstliegenden symmetrischen bzw. antisymmetrischen Zustände nach einiger Rechnung näherungsweise zu

$$E_{S,A} \simeq E_M \mp A \quad (8.5)$$

mit

$$E_M := E_\infty \left(1 - \frac{2}{Ka}\right) \quad \text{und} \quad A \simeq E_\infty \frac{4e^{-Kd}}{Ka} \quad (8.6)$$

## 8.1. Nicht-zeitabhängige Wechselwirkung

und  $K = \sqrt{2m(V_0 - E_\infty)}$ . Die Energien sind in Abb. 8.2 veranschaulicht. Die Energie  $E_M$  liegt niedriger als  $E_\infty$ . Die Energien von  $|\psi_S\rangle$  und  $|\psi_A\rangle$  unterscheiden sich um die Aufspaltung  $2A$ , mit der sogenannten Tunnelamplitude  $A$  (s.u.).

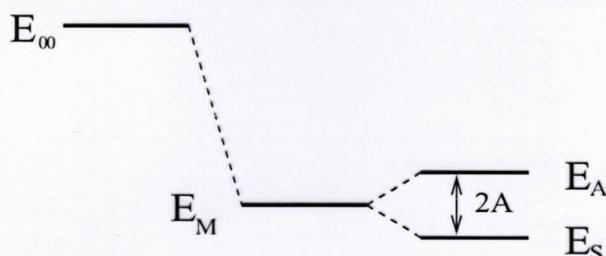


Abbildung 8.2: Tiefstliegende Energien des doppelten Potentialtopfs

Für die Aufspaltungsenergie  $2A$  sieht man in (8.6) die charakteristische exponentielle Abhängigkeit von der Größe der Potentialbarriere, die wir schon beim Tunneleffekt gefunden haben.

### Tunnelfrequenz

Klassisch befindet sich das Stickstoffatom entweder links oder rechts der Ebene, kann aber die Potentialschwelle nicht durchdringen. Aus den Eigenzuständen  $|\psi_{A,S}\rangle$  von  $\hat{H}$  kann man entsprechende Zustände konstruieren<sup>2</sup> (s. Abb. 8.1).

$$\underline{|\psi_{L,R}\rangle} := \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_S\rangle \mp |\psi_A\rangle) . \quad (8.7)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im jeweils gegenüberliegenden Topf ist dabei sehr klein.<sup>3</sup> Umgekehrt gilt auch

$$\underline{|\psi_{A,S}\rangle} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_L\rangle \mp |\psi_R\rangle) . \quad (8.8)$$

Die Zustände  $|\psi_L\rangle$  und  $|\psi_R\rangle$  sind aber keine Eigenzustände des Hamiltonoperators. (weil  $\psi_S$  und  $\psi_A$  unterschiedliche Energien (Eigenwerte) haben)

<sup>2</sup>Die Namen „Links“ und „Rechts“ sind hier nicht eindeutig. Man kann die Vorzeichen auch anders wählen.

<sup>3</sup>Sie ist nicht Null, weil  $E_S \neq E_A$  und daher der Parameter  $k$  in der Wellenfunktion von  $|\psi_A\rangle$  und  $|\psi_S\rangle$  leicht verschieden ist. (s. Abbildung 8.1)

Wenn das Stickstoffatom zur Zeit  $t = 0$  in einem dieser Zustände präpariert wird, etwa  $|\psi(0)\rangle = |\psi_R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_S\rangle + |\psi_A\rangle)$ , dann lautet die Zeitentwicklung

$\psi_S$  und  $\psi_A$  sind Eigenzustände mit den Energien  $E_S$  und  $E_A$

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\psi(0)\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( e^{-\frac{i}{\hbar}E_S t} |\psi_S\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}E_A t} |\psi_A\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}E_S t} \left( |\psi_S\rangle + e^{+\frac{i}{\hbar}(E_S-E_A)t} |\psi_A\rangle \right). \end{aligned} \quad (8.9)$$

✓

Das Teilchen schwingt daher mit einer Frequenz  $\omega_0$ ,

$$\hbar \omega_0 = E_A - E_S = 2A. \quad (8.10)$$

zwischen den beiden Zuständen  $|\psi_R\rangle$  und  $|\psi_L\rangle$  hin und her! Dieser Übergang ist nur aufgrund des Tunneleffekts möglich.

Bei Ammoniak ist die Energiedifferenz  $2A \approx 10^{-4}$  eV. Das Ammoniak-Molekül schwingt deshalb (nach entsprechender Anregung) mit der Frequenz  $\omega = 2A/\hbar \approx \underline{24 \text{ GHz}}$ .

In der gleichartigen Arsen-Verbindung  $AsH_3$  ist die Tunnelamplitude  $A$  sehr viel kleiner als bei  $NH_3$ , weil Arsen etwa fünf mal größer als Stickstoff ist. Wenn  $AsH_3$  in den Zustand  $|\psi_R\rangle$  gebracht wird, schwingt es deswegen mit der extrem kleinen Frequenz von  $\simeq \underline{10^{-8} \text{ Hz}}$ , d.h. es tunnelt fast gar nicht durch die Barriere und verhält sich in diesem Sinne fast klassisch. Die exponentielle Abhängigkeit der Tunnelamplitude hat hier drastische Auswirkungen. !

### Spontane und stimulierte Emission

Wenn ein isoliertes Ammoniak-Molekül in den angeregten Zustand  $|\psi_A\rangle$  gelangt, z.B. durch Absorption eines Photons, fällt es nach einiger Zeit in den Grundzustand zurück, unter Aussendung eines Photons der Frequenz  $\omega = 2A/\hbar \simeq 24 \text{ GHz}$ , d.h. einer Wellenlänge von 1.25 cm. Dies nennt man „spontane Emission“. Die Lebensdauer des angeregten Zustands ist bei spontaner Emission sehr lang (ca. 1 Monat). !

Dies ist anders, wenn gleichzeitig schon sehr viele Photonen der Frequenz  $\omega$  vorhanden sind. Diese sind Bosonen, die alle im gleichen Quantenzustand vorliegen können. Dann erhöht sich bei  $N$  solcher Photonen die Rate

## 8.1. Nicht-zeitabhängige Wechselwirkung

für die Emission eines weiteren Photons um den Faktor  $N + 1$  wie Einstein schon 1917 erkannte. Dies nennt man „stimulierte Emission“.

Dieses Phänomen kann man auch semiklassisch beschreiben: in einem elektrischen Feld der Frequenz  $\omega$  wächst die Zerfallsrate proportional zur Energie des Feldes, d.h. zum Quadrat der Feldstärken. Die Lebensdauer wird dadurch sehr viel kleiner, z.B. bei  $NH_3$  ca.  $10^{-9}$  Sekunden bei einem elektrischen Feld von  $10^3 V/m$ .

Die Emission von Licht durch  $NH_3$  erfolgt mit einer sehr scharf definierten spektralen Linie, mit der es z.B. in interstellaren Wolken trotz deren extremer Verdünnung detektiert werden kann. (S.4.) ✓

### Tunnelamplitude

Der Hamiltonoperator lautet in Matrixform in der Eigenbasis  $|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle$

$$H = \begin{pmatrix} E_S & 0 \\ 0 & E_A \end{pmatrix}. \quad (8.11)$$

Die beiden tiefstliegenden Zustände  $|\psi_{S,A}\rangle$  sind Linearkombinationen von  $|\psi_{L,R}\rangle$ . Man kann im Raum der beiden tiefstliegenden Zustände daher auch  $|\psi_{L,R}\rangle$  als Basis wählen. Die Matrixelemente von  $\hat{H}$  in diesen Zuständen sind

siehe (8.7), (8.8)

$$\begin{aligned} \langle \psi_L | \hat{H} | \psi_L \rangle &= \frac{1}{2} (\langle \psi_S | - \langle \psi_A |) \hat{H} (|\psi_S\rangle - |\psi_A\rangle) = \frac{E_S + E_A}{2} = E_M, \\ \langle \psi_L | \hat{H} | \psi_R \rangle &= \frac{E_S - E_A}{2} = A, \text{ etc..} \end{aligned} \quad (8.12)$$

Der Hamiltonoperator hat in der Basis  $|\psi_R\rangle, |\psi_L\rangle$  daher die Gestalt

$$H = \begin{pmatrix} E_M & A \\ A & E_M \end{pmatrix}. \quad (8.13)$$

Durch die endliche Potentialbarriere erscheint also zwischen den im linken bzw. rechten Topf lokalisierten Zuständen  $|\psi_{L,R}\rangle$  ein „Übergangsmatrixelement“ (oder „Tunnelamplitude“)  $H_{LR} = A$ . Dies taucht analog etwa auch bei der Beschreibung von Elektronen in einem Festkörper auf, in Gestalt eines „Hüpfoperators“ zwischen Eigenzuständen benachbarter Atome.

(vgl. Übungsaufgabe)

### 8.1.2 Hamiltonoperator mit Nichtdiagonalelementen

Wir betrachten nun noch einmal allgemein ein System mit zwei Zuständen  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$ . In der Basis dieser Zustände sei der Hamiltonoperator  $H_0$  diagonal, mit Eigenwerten  $E_1$  und  $E_2$ . Er hat somit die Matrixdarstellung  $H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$ . Zusätzlich sei eine Wechselwirkung  $\hat{V}$  gegeben, die Übergänge zwischen den Zuständen  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  erlaubt. Der Gesamt-Hamiltonoperator  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  hat dann die Matrixdarstellung

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & \gamma^* \\ \gamma & E_2 \end{pmatrix}. \tag{8.14}$$

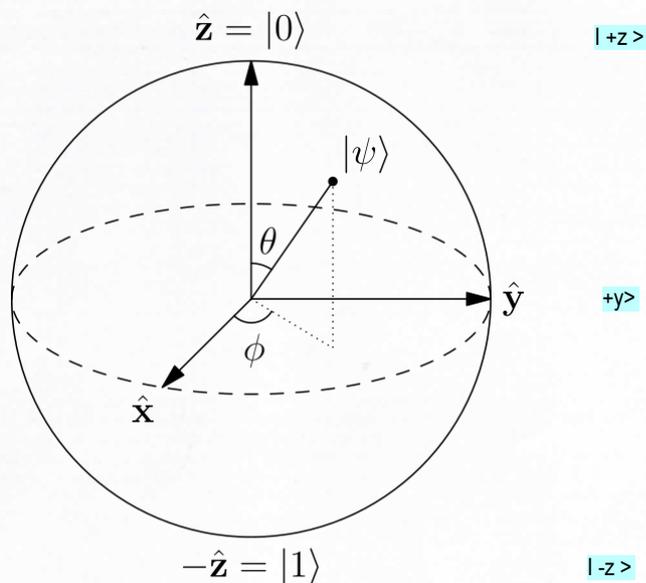
Dies ist schon der allgemeinste zweidimensionale hermitesche Hamiltonoperator. Die Eigenenergien von  $\hat{H}$  erhält man durch Nullsetzen der entsprechenden Determinante zu (Diagonalisierung)

$$E_{\pm} = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_1 - E_2}{2}\right)^2 + |\gamma|^2}. \tag{8.15}$$

Wir sehen, dass sich der Abstand zwischen den Energien durch die zusätzliche Kopplung  $\gamma$  immer *vergrößert*.

Wenn das System zu irgendeinem Zeitpunkt nicht in einem der Eigenzustände  $|\psi_{\pm}\rangle$  ist, dann oszilliert es danach mit  $\hbar\omega_0 = E_+ - E_-$  zwischen entsprechenden Linearkombinationen der Eigenzustände. 14.6.2023

### Spin-Vektoren: Bloch - Kugel (Bloch sphere) (zu Kap. 8.2)



## 8.2. Spin im konstanten + rotierenden Feld: Resonanz

### 8.2 Spin im konstanten + rotierenden Feld: Resonanz

(s.a. Bloch-Kugel auf der vorigen Seite)

Wir betrachten ein ruhendes Spin- $\frac{1}{2}$  Teilchen in einem magnetischen Feld. Der Hamilton-Operator ist

$$\hat{H} = -\mu \vec{B} \hat{S}. \quad (8.16)$$

mit  $\mu = g \frac{q}{2m}$ . Zunächst wirke nur ein

konstantes Feld  $(0, 0, B_0)$  in  $z$ -Richtung.

Dann sind die Eigenzustände  $|\uparrow\rangle \equiv | +z \rangle$  und  $|\downarrow\rangle \equiv | -z \rangle$ , und die Energien sind  $E_{\uparrow, \downarrow} = \mp \mu B_0 \frac{\hbar}{2}$ . Wenn das System anfangs nicht in einem Eigenzustand ist, dann rotiert der Vektor des Spinoperators (im Heisenbergbild) mit der

$$\text{Larmor-Frequenz } \omega_0 = (E_{\uparrow} - E_{\downarrow})/\hbar = -\mu B_0 \quad (8.17)$$

um die  $z$ -Achse (s.a. Kap. 3.5.3). Dabei ist  $\hbar \omega_0$  gerade der Energieunterschied zwischen den Zuständen  $| +z \rangle$  und  $| -z \rangle$ . Zusätzlich schalten wir nun ein

$$\text{in der } xy\text{-Ebene mit der Frequenz } \omega \text{ rotierendes Magnetfeld ein,} \quad (8.18)$$

$$\vec{B} = (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, B_0).$$

Der Hamiltonoperator ist jetzt explizit zeitabhängig. Wir müssen die zeitabhängige Schrödingergleichung  $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$  lösen. In der  $z$ -Darstellung

$$|\psi\rangle = c_{\uparrow} |\uparrow\rangle + c_{\downarrow} |\downarrow\rangle \quad (8.19)$$

wird aus  $\hat{H}$  die Matrix  $-\mu \frac{\hbar}{2} (B_x \sigma_x + B_y \sigma_y + B_z \sigma_z)$  und die Schrödingergleichung lautet

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_{\uparrow} \\ c_{\downarrow} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{+i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\uparrow} \\ c_{\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (8.20)$$

wobei  $\omega_1$  proportional zur Stärke des mit  $\omega$  rotierenden Feldes ist:

$$\omega_1 := -\mu B_1 \quad (8.21)$$

## Kapitel 8. Anwendungen: Zwei-Zustands-Systeme

Die Bewegungsgleichung kann man durch eine Basistransformation auf eine mit  $\omega$  rotierende Basis lösen. Dies entspricht der Substitution (Ansatz)  $c_{\uparrow,\downarrow}(t) = \exp(\mp i\omega t/2) b_{\uparrow,\downarrow}(t)$  und man erhält

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} b_{\uparrow} \\ b_{\downarrow} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega - \omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\uparrow} \\ b_{\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (8.22)$$

In der neuen Basis ist der Hamiltonoperator nicht mehr zeitabhängig und sofort lösbar. Die Eigenenergien sind gemäß Gl. (8.15) gleich  $\pm \hbar\Omega$  mit

$$\Omega = \frac{1}{2} \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}, \quad (8.23)$$

d.h. der Hamiltonoperator hat in der Eigenbasis die Matrixform  $\begin{pmatrix} \hbar\Omega & 0 \\ 0 & -\hbar\Omega \end{pmatrix}$ .

Wir betrachten nun den Fall, dass der Spin anfangs im Zustand  $|\uparrow\rangle$  ist, d.h.  $c_{\uparrow}(0) = b_{\uparrow}(0) = 1$ . Dann erhält man nach kurzer <sup>einiger</sup> Rechnung

$$b_{\downarrow}(t) = -\frac{i\omega_1}{2\Omega} \sin \Omega t. \quad (8.24)$$

Die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit  $t$  den Zustand  $|\downarrow\rangle$  zu finden, ist  $|c_{\downarrow}(t)|^2 = |b_{\downarrow}(t)|^2$  und somit exakt durch die

### RABI-FORMEL

$$|c_{\downarrow}(t)|^2 = \left(\frac{\omega_1}{2\Omega}\right)^2 \sin^2 \Omega t \quad (8.25)$$

$$\equiv \frac{(\mu B_1)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\mu B_1)^2} \sin^2 \frac{\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + (\mu B_1)^2} t}{2} \quad (8.26)$$

gegeben, mit  $\omega_0 = -\mu B_0$  und  $\omega_1 = -\mu B_1$ . Diese Wahrscheinlichkeit oszilliert mit der Frequenz  $\Omega$ . Sie ist in Abb. 8.3 dargestellt.

Die Stärke dieser Energie-Oszillation hängt von der Amplitude

$$\left(\frac{\omega_1}{2\Omega}\right)^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{\omega - \omega_0}{\omega_1}\right)^2} \quad (8.27)$$

der Rabi-Oszillation ab. Sie ist in Abb. 8.4 dargestellt und zeigt eine Resonanz (mit der sogenannten „Lorentz-Form“  $\frac{1}{1+x^2}$ ) bei  $\omega = \omega_0$ , d.h.

## 8.2. Spin im konstanten + rotierenden Feld: Resonanz

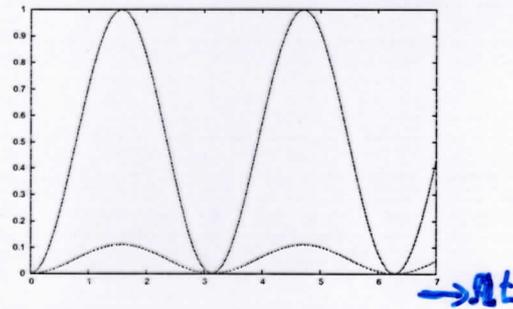


Abbildung 8.3: Rabi-Oszillationen. Wahrscheinlichkeit  $|c_{\downarrow}(t)|^2$ , den Zustand  $|\downarrow\rangle$  anzutreffen, als Funktion der Zeit; dargestellt bei der Resonanz,  $\omega = \omega_0$ , und knapp neben der Resonanz,  $|\omega - \omega_0| = 3|\omega_1| \equiv 3|\mu B_1|$ . (große Amplitude) (kleine Amplitude)

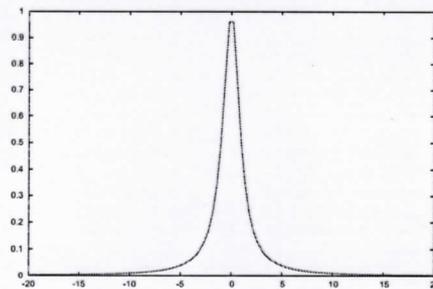


Abbildung 8.4: Amplitude der Rabi-Oszillationen als Funktion von  $\frac{\omega - \omega_0}{\omega_1}$ .

wenn die Frequenz des rotierenden Feldes gleich der Larmor-Frequenz im Feld  $B_0$  ist. Die Breite der Resonanzkurve beim halben Maximalwert ist  $|2\omega_1| = |2\mu B_1|$ , und somit zur Stärke des rotierenden Feldes proportional. Die Resonanz wird daher bei kleinem rotierendem Feld  $B_1$  sehr scharf. (Wenn man  $B_1$  aber zu klein wählt, wird  $|c_{\downarrow}|^2$  zu klein für Messungen.) Eine offensichtliche Anwendung ist die Messung der Larmor-Frequenz und damit des magnetischen Moments  $\mu$ . I. Rabi (Nobelpreis 1944) konnte 1938 auf diese Weise mit Molekülstrahlen das magnetische Moment des Protons 1000 Mal genauer messen als mit dem Stern-Gerlach-Apparat. Spin 1/2

Wir schauen uns auch den Erwartungswert von  $\hat{H}$  während der Oszillation an. Der Einfachheit halber nehmen wir dafür  $\omega = \omega_0$  und  $\omega_0 > 0$  an.

✓ (8.25) ⇒ Wenn  $c_{\downarrow}(0) = 0$ , dann ist  $|\psi\rangle = |\uparrow\rangle$  und gemäß Gl. (8.20)  $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}\omega_0$ . Nach einem Viertel der Periode  $T = 2\pi/\Omega$  ist  $|c_{\downarrow}(t)| = 1$ , d.h. der Spin ist um 180 Grad gedreht,  $|\psi\rangle = |\downarrow\rangle$  und  $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = -\frac{\hbar}{2}\omega_0$ . Deswegen verringert sich der Erwartungswert der Energie des Teilchens im ersten Viertel der Periode und vergrößert sich im zweiten Viertel wieder. Da insgesamt keine Energie er-

zeugt werden kann, gibt das Teilchen im ersten Periodenviertel offenbar Energie an das Magnetfeld ab, und nimmt sie im zweiten Viertel wieder auf.<sup>4</sup>

Energieabgabe:  
Abstrahlung von  
Photonen der  
Frequenz  $\omega_0$

Bei der Resonanzfrequenz  $\omega = \omega_0$  ist  $2\Omega = \omega_1$ . Bemerkenswerterweise ist die Wahrscheinlichkeit  $|c_{\downarrow}(t)|^2 = \sin^2(\Omega t)$  bei kurzen Zeiten proportional zu  $\Omega^2 \sim \omega_1^2 = \mu B_1^2$ , d.h. proportional zur Energie des Feldes: je stärker das schwingende Magnetfeld der Stärke  $\omega_1$  ist, desto wahrscheinlicher findet ein Zerfall statt, unter Aussendung eines weiteren Photons der Frequenz  $\omega_0$  (stimulierte Emission).

Die Rabi-Formel bleibt in guter Näherung gültig, wenn das zeitabhängige Magnetfeld linear schwingt, statt gemäß Gl. (8.18) zu rotieren. Man kann das linear schwingende Feld als Summe eines rechts- und eines linksrotierenden Felds schreiben:

$$(B_1 \cos \omega t, 0, 0) = \underbrace{(B_1 \cos \omega t, B_1 \sin(\omega t), 0)}_{\text{rechtsrotierend}} + \underbrace{(B_1 \cos \omega t, B_1 \sin(-\omega t), 0)}_{\text{linksrotierend}}.$$

Wenn das rechtsrotierende Feld in der Nähe der Resonanz ist,  $\omega \simeq \omega_0$ , und  $\omega$  viel größer als die Resonanzbreite  $2\omega_1$  ist, dann ist das linksrotierende Feld mit Frequenz  $-\omega$  eine Störung, die von der Resonanz weit weg liegt und deshalb fast keinen Beitrag zu  $|c_{\downarrow}|^2$  liefert und vernachlässigt werden kann (sogenannte „rotating wave approximation“).

### 8.2.1 NMR

Mit der Weiterentwicklung der Mikrowellentechnik wurden vielfältige Anwendungen möglich. Bloch und Purcell (Nobelpreis 1952) entwickelten unabhängig voneinander 1945 die Kernspinresonanz (NMR) in Festkörpern. Aus den unterschiedlichen Energien der Zustände  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  im Feld  $B_0$  folgt, dass sie im thermischen Gleichgewicht unterschiedlich besetzt sind. Bei Raumtemperatur und  $B_0 = 1\text{T}$  beträgt der relative Besetzungsunterschied für den Spin von Wasserstoffkernen (Protonen) aber nur etwa  $10^{-6}$ . Wegen der makroskopischen Zahl von Teilchen in einem Festkörper reicht dies aber aus, um die Zeitentwicklung der Besetzungszahlen messen zu können. Typischerweise verwendet man hierbei ein linear schwingendes Magnetfeld.

<sup>4</sup>Wir behandeln das elektromagnetische Feld hier klassisch. Eine quantenmechanische Berücksichtigung der Photonen benötigt die Quantenelektrodynamik.

Hier geht es um den  
Erwartungswert!

Die Resonanz kann man z.B. über die Absorptionsrate des zeitabhängigen Feldes messen. Oft geht man aber anders vor und legt das oszillierende Feld in Pulsen der Dauer einer viertel Rabi-Periode an, so dass  $|c_{\downarrow}|^2$  nach einem Puls maximal ist. Danach relaxieren die Spins in einer charakteristischen Zeitskala namens  $T_1$  („longitudinale Relaxationszeit“, typisch 1 Sekunde(!)) zurück zum Gleichgewichtszustand und senden dabei Photonen der Energie  $\hbar\omega_0$  aus. Diese kann man als Magnetfeld der Frequenz  $\omega_0$  mit der gleichen Spule messen, mit welcher der Puls erzeugt wurde. Bei einem Puls von einer achte Rabi-Periode ist der Erwartungswert der Spins danach in der  $xy$ -Ebene ausgerichtet; die Spins relaxieren mit einer kürzeren Zeit  $T_2$  („transversale Relaxationszeit“, typisch 0.1 Sekunden) zurück zum Gleichgewichtszustand. Die angesprochenen Protonen sind nicht frei, sondern wechselwirken auch mit ihrer Umgebung im Festkörper. Die Werte der Relaxationszeiten hängen deshalb von ihrer Umgebung ab. Anhand der Resonanzfrequenz  $\omega_0$  und der Zeiten  $T_1, T_2$  kann man sehr genau verschiedene Atome unterscheiden. Die Fouriertransformation der zeitlichen Information ergibt dabei charakteristische Spektren. Auch die chemische Umgebung hat Einfluss, da die umgebenden Elektronen die Resonanzfrequenz verändern. Wechselwirkung mit benachbarten Spins kann zu Linienaufspaltung führen und so Auskunft über chemische Bindungen geben. R. Ernst (Nobelpreis 1991) führte kompliziertere Pulsformen ein, mit deren Hilfe man gleichzeitig viele Frequenzen analysieren kann. Ortsauflösungen bis hinunter zu etwa 0.02 mm sind möglich.

Anwendungen der NMR sind zahlreich, u.a. in der Physik, Chemie, Biologie (Strukturanalyse von Polymeren, Nobelpreis 2002), und sogar bei der Ölsuche (Analyse der Oberflächen in einem Bohrloch).

### 8.2.2 MRT

Besonders wichtig sind inzwischen die Anwendungen in der Medizin, bekannt unter den Namen Magnetresonanztomographie (MRT oder MR), oder Magnetic Resonance Imaging (MRI).<sup>5</sup>

Es wird fast ausschließlich die Resonanz von Wasserstoffkernen benutzt, mit supraleitenden Magneten bei Magnetfeldern von 1-3 Tesla. Unterschied-

<sup>5</sup>Der Name „Kernspintomographie“ wird in der Medizin kaum noch benutzt, weil er falsche Assoziationen wecken könnte...

liche Gewebe werden anhand des Einflusses der chemischen Umgebung auf  $\omega_0$  und vor allem auf  $T_1$  und  $T_2$  detektiert. Der wichtigste Aspekt der Medizinischen Anwendungen ist die Bildgebung. Sie wird durch zusätzliches Anlegen von zeitlich veränderlichen Magnetfeld-Gradienten in allen drei Raumrichtungen ermöglicht, welche lokal die Resonanzfrequenz und Phase verändern (Lauterbur und Mansfield ab 1973, Nobelpreis 2003) und dadurch dreidimensional aufgelöste Bilder ermöglichen mit einer Auflösung von etwa 1 mm. Die Rekonstruktion der Bilder erfolgt über Fouriertransformationen. (FFT)

Inzwischen sind NMR-Aufnahmen in ca. 0.1 Sekunden möglich geworden, und dadurch z.B. die Echtzeit-Untersuchung von Gehirn-Aktivitäten.

### 8.3 Maser und Laser

Zu den spektakulärsten Anwendungen der in Kap. 8.2 untersuchten Physik gehören Maser („Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation“) und das etwas später entwickelte optische Pendant, der Laser. Wir besprechen zuerst die ursprüngliche Entwicklung, den Ammoniak-Maser (Townes, Basov, Prokhorov 1954, Nobelpreis 1964).

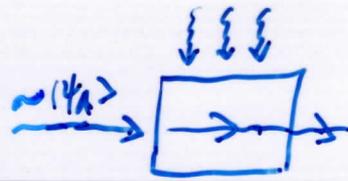
Bei einem Maser wird zunächst ein Strahl von Ammoniak-Molekülen durch ein elektrisches Feld  $\mathcal{E}$  geleitet. Ammoniak ( $NH_3$ ) hat ein elektrisches Dipolmoment, das zur Position (links/rechts) von  $N$  korrespondiert und an das Feld koppelt. In einem schwachen Feld sind die neuen Eigenzustände  $|\psi_{\pm}\rangle$  von  $NH_3$  dann kleine Modifikationen des ursprünglichen Grundzustands  $|\psi_S\rangle$  und des angeregten Zustands  $|\psi_A\rangle$ :

$$|\psi_{-}\rangle = |\psi_S\rangle + c\mathcal{E}|\psi_A\rangle \quad \text{und} \quad |\psi_{+}\rangle = |\psi_A\rangle - c\mathcal{E}|\psi_S\rangle, \quad (8.28)$$

(mit einer Konstanten  $c$ ). Parallel bzw. antiparallel zum Feld ausgerichtete Moleküle entsprechen deswegen unterschiedlichen Eigenzuständen.

Man wählt nun das Feld inhomogen (z.B. in  $y$  und  $z$  Richtung anwachsend). Auf die Moleküle wirkt dann eine Kraft, die es analog zum Stern-Gerlach Experiment erlaubt, parallel und antiparallel zum Feld ausgerichtete Moleküle zu trennen. Man präpariert so einen Strahl im Zustand  $|\psi_{+}\rangle \simeq |\psi_A\rangle$ . In diesem überwiegt der Anteil des angeregten Zustands  $|\psi_A\rangle$  von  $NH_3$  gegenüber dem des Grundzustands  $|\psi_S\rangle$  (Besetzungsinversion).

### 8.3. Maser und Laser



Der Strahl wird nun in einen Resonator geleitet, in dem ein Mikrowellenfeld der Frequenz  $\omega \approx \omega_0$  existiert (24 GHz). In einem solchen schwingenden elektrischen Feld hat der Hamiltonoperator dieselbe Form wie Gl. (8.20). Daher wird wieder im ersten Viertel der Rabi-Oszillation Energie von den  $NH_3$ -Molekülen an das elektromagnetische Feld abgegeben. Die Flugzeit der Moleküle wird auf höchstens diese Zeit eingestellt. Somit wird das Feld mittels der hindurchfliegenden  $NH_3$ -Moleküle *verstärkt*.

Der Maser kann als sehr empfindlicher und rauscharmer Verstärker verwendet werden, speziell auch zur Messung der  $NH_3$ -Linie in der Astrophysik. Analog funktioniert der Wasserstoff-Maser zur Verstärkung der 21 cm Linie. Mit ähnlichen Verfahren arbeiten auch Atomuhren (Ramsey 1949, Nobelpreis 1964), wie z.B. die Cäsium-Standard-Uhr mit einer relativen Genauigkeit von  $10^{-15}$ , die man etwa in der Astrophysik oder auch beim GPS nutzt. Inzwischen sind sogar Ein-Atom-Maser möglich, die als Quelle einzelner Photonen dienen.

Übertragen auf optische Frequenzen erhält man den LASER, der oft auf Festkörperbasis realisiert wird. Die Besetzungsinversion erzeugt man hier häufig mit Hilfe von weiteren Energieniveaus. Gleich wie beim Maser ist das Prinzip, dass eine elektromagnetische Welle (Lichtstrahl) der passenden Frequenz durch das Zurückfallen der Elektronen von den erzeugten angeregten Zuständen erheblich verstärkt wird.

Ganz wesentlich bei Maser und Laser (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) ist der Effekt der jeweils schon vorhandenen Photonen, welche, wie schon erwähnt die Emissionsrate drastisch erhöhen (stimulierte Emission), proportional zur Anzahl schon vorhandener Photonen, d.h. zur Energiedichte des elektromagnetischen Feldes, die deswegen mittels Resonatoren erhöht wird. Die vollständige Beschreibung benötigt die Vielteilchen-Theorie, die kurz in der Fortgeschrittenen Quantenmechanik und ausführlicher in der Vorlesung Quanten und Felder eingeführt werden wird.

Kohärent!