Beispielaufgabe: Elektronenspinresonanz

Ein freies Elektron sei in einer Kavität eingeschlossen, in der ein homogenes und konstantes Feld $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z$ angelegt sei. Zur Zeit $t=0$ werde noch ein in der x-y-Ebene rotierendes Magnetfeld

$$\vec{B}' = B_0' \left(\cos(\omega t)\, \vec{e}_x + \sin(\omega t)\, \vec{e}_y \right), \qquad B_0' = \text{const},$$

eingeschalten. Zur anfänglichen Zeit $t=0$ zeige der Elektronenspin in z-Richtung.

1. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit $P(t)$ dafür, dass der Spin des Elektrons in (verglichen zur Anfangsrichtung) umgekehrte Richtung zeigt.
2. Für welche Frequenz ω des rotierenden Magnetfeldes wird die zeitgemittelte Umkehrwahrscheinlichkeit $\overline{P}$ maximal? Was ist der maximale Wert von $\overline{P}$?

---

anfänglicher Zustand: $|\uparrow\rangle$

Hamiltonoperator des Elektronenspins im $\vec{B}$-Feld: $H = \omega_L S_z$, mit Larmorfrequenz ω_L

$\rightarrow$ Energiedifferenz zwischen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$:

$$\left.\begin{aligned} H|\uparrow\rangle &= \omega_L S_z |\uparrow\rangle = \frac{\omega_L}{2}|\uparrow\rangle \\ H|\downarrow\rangle &= \omega_L S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\omega_L}{2}|\downarrow\rangle \end{aligned}\right\} \quad E_\downarrow - E_\uparrow = -\omega_L$$

Störoperator: $V(t) = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}'(t) = \frac{1}{m} \vec{S} \cdot \vec{B}'(t) = \frac{B_0'}{m} \left(S_x \cos(\omega t) + S_y \sin(\omega t) \right)$

wähle eine Darstellung:

$$S_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Damit lässt sich das Matrixelement berechnen:

$$\langle\downarrow|V(t)|\uparrow\rangle = \frac{B_0'}{2m}\underbrace{\left[\cos(\omega t)\underbrace{(0\ 1)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}}_{1} + \sin(\omega t)\underbrace{(0\ 1)\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}}_{i}\right]}_{e^{i\omega t}}$$

Für die Übergangswahrscheinlichkeit gilt zu 1. Ordnung:

$$P_{n\to m}(t) = \left|-i\int_{t_0}^{t}dt'\ e^{i\omega_{mn}t'}\ V_{mn}(t')\right|^2$$

mit $V_{mn}(t) = \langle m|V(t)|n\rangle$ und $E_m - E_n \equiv \omega_{mn}$.

$$\Rightarrow\ P_{\uparrow\to\downarrow}(t) = \left|-i\frac{B_0'}{2m}\int_0^t dt'\ e^{i(\omega-\omega_L)t'}\right|^2 = \left(\frac{B_0'}{2m}\right)^2\left|\frac{i}{\omega-\omega_L}\left(1-e^{i(\omega-\omega_L)t}\right)\right|^2$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{B_0'}{m}\right)^2\frac{1}{(\omega-\omega_L)^2}\Big(1-\cos\big((\omega-\omega_L)t\big)\Big)$$

Für $\omega\to\omega_L$ geht $P(t)\sim t^2$ (folgt aus Reihenentwicklung). Die Störungsrechnung bricht also zusammen.

zeitgemittelte Wahrscheinlichkeit:

$$\overline{P} = \lim_{t\to\infty}\left[\frac{1}{t}\int_0^t dt'\ P(t')\right] = \frac{1}{2}\left(\frac{B_0'}{m}\right)^2\frac{1}{(\omega-\omega_L)^2}\lim_{t\to\infty}\left\{\frac{1}{t}\left[t-\frac{\sin\big((\omega-\omega_L)t\big)}{\omega-\omega_L}\right]\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{B_0'}{m}\right)^2\frac{1}{(\omega-\omega_L)^2}\xrightarrow{\omega\to\omega_L}\infty$$