14.4. Spin Resonanz: Spin im konstanten + dazu transversalen zeitabhängigen Magnetfeld

Spin Resonanz Experimente: sehr wichtig, weit verbreitet, Anwendungen in Physik, Chemie, Medizin etc.
(sowohl Elektronen- wie auch Kernspin)

immer dasselbe Setup: i) zeitlich konstantes, räumlich homogenes Magnetfeld $\parallel \hat{z}$
ii) harmonisches, magnetisches Wechselfeld in xy Ebene

führt zu Umklapp/Rotations Phänomenen des e^-/p Spins

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}^S(t) \quad \text{mit} \qquad (14.77)$$

$$\vec{B}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix} \qquad \vec{B}^S(t) = \left(B_x^S(t), B_y^S(t), 0\right) \qquad (14.78, 79)$$

Wechselfeld: können nicht erwarten, dass Spin immer nach oben/unten zeigt $\rightarrow$ zeitabhängige Übergänge, zeitabhängige Schrödingergleichung; allgemeiner Ansatz:

$$|S\rangle = C_1(t)\,|\uparrow\rangle + C_2(t)\,|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} \qquad (14.80)$$

Setze in zeitabh. Schrödingergl. ein $\rightarrow$

$$\mu_B \begin{pmatrix} B_z^0 & B_x^S - i B_y^S \\ B_x^S + i B_y^S & -B_z^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \end{pmatrix} \qquad (14.81)$$

ausmultipliziert: $$\left(\tfrac{1}{2}\hbar\omega_0\right) C_1 + \mu_B\left(B_x^S - i B_y^S\right) C_2 = i\hbar \dot{C}_1 \qquad (14.82)$$

$$\mu_B\left(B_x^S + i B_y^S\right) C_1 - \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0 C_2 = i\hbar \dot{C}_2 \qquad (14.83)$$

mit der Definition $$\hbar\omega_0 = 2\mu_B B_z^0 \qquad (14.84)$$

nehmen an $$B_x^S = F\cos(\omega t)$$
$$B_y^S = F\sin(\omega t) \qquad (14.85)$$

in (82, 88) einsetzen, verwenden $B_x^S \pm i B_y^S = F(\cos(\omega t) \pm i\sin(\omega t)) = Fe^{\pm i\omega t}$ (14.86)

$$\Rightarrow \quad (\hbar\omega_0/2)\, C_1 + \mu_B F e^{-i\omega t} C_2 = i\hbar \dot{C}_1 \qquad (14.87)$$

$$\mu_B F e^{i\omega t} C_1 - (\hbar\omega_0/2)\, C_2 = i\hbar \dot{C}_2 \qquad (14.88)$$

Ansatz: $$\left.\begin{aligned} c_1(t) &= d_1(t)\, e^{-i\omega_0 t/2} \\ c_2(t) &= d_2(t)\, e^{+i\omega_0 t/2} \end{aligned}\right\} \qquad (14.89)$$

$$\rightarrow\; i\hbar \dot{c}_1 = (\hbar\omega_0/2)\, c_1 + i\hbar \dot{d}_1 e^{-i\omega_0 t/2}, \text{ analog } c_2 \qquad (14.90)$$

einsetzen in (87, 88), $(\hbar\omega_0/2)c_1$ hebt sich auf, analog c_2 $\Rightarrow$

$$\mu_B F e^{-i(\omega-\omega_0)t}\, d_2 = i\hbar \dot{d}_1 \qquad (14.91)$$

$$\mu_B F e^{i(\omega-\omega_0)t}\, d_1 = i\hbar \dot{d}_2 \qquad (14.92)$$

zur Vereinfachung wählen wir $\omega = \omega_0$ (Resonanzbedingung) $\Rightarrow$ (14.93)

$$\mu_B F d_2 = i\hbar \dot{d}_1 \qquad (14.94)$$

$$\mu_B F d_1 = i\hbar \dot{d}_2 \qquad (14.95)$$

leite (94) ab $\rightarrow$ $\mu_B F \dot{d}_2 = i\hbar \ddot{d}_1$, einsetzen (95) (14.96)

$$\Rightarrow \quad \ddot{d}_1 + \frac{\mu_B^2 F^2}{\hbar^2} d_1 = 0 \qquad (14.97)$$

Integrationskonstanten: Anfangsbed.

definiere $\Omega = \frac{\mu_B F}{\hbar}$ $\Rightarrow$ $d_1 = a \sin(\Omega t + \phi)$ mit (94) $\Rightarrow$ (14.98)

„Rabi Frequenz" $\quad d_2 = i a \cos(\Omega t + \phi)$ (14.99)

Anfangsbed. $d_1(0) = 0 \;\Rightarrow\; \phi = 0$

Normierung $\Rightarrow a = 1$ $\quad \left(|d_1|^2 + |d_2|^2 = a^2 \underbrace{\{\sin^2(\Omega t) + \cos^2(\Omega t)\}}_{=1} = 1\right)$

$$\Rightarrow \quad |s\rangle = \underbrace{\sin(\Omega t)\, e^{-i\omega_0 t/2}}_{\alpha} |\uparrow\rangle + \underbrace{i\cos(\Omega t)\, e^{i\omega_0 t/2}}_{\beta} |\downarrow\rangle \qquad (14.100)$$

(14.101)

d.h. Zustandsbesetzung oszilliert zwischen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$. Auch ersichtlich aus Erwartungswerten des Spin Operators $\langle\hat{S}_z\rangle, \langle\hat{S}_x\rangle, \langle\hat{S}_y\rangle$: vgl. mit (14.49) bzw. 14.53

$$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{\hbar}{2}\left(|\alpha|^2 - |\beta|^2\right)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left[\sin^2(\Omega t) - \cos^2(\Omega t)\right] = -\frac{\hbar}{2}\cos(2\Omega t) \qquad (14.102)$$

d.h. z-Komponente oszilliert mit Frequenz 2Ω $\rightarrow$ Rabi-Oszillationen

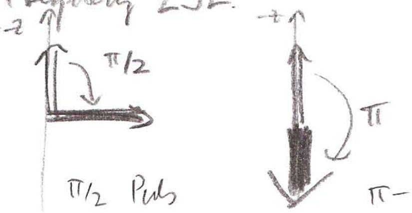
(14.105 – 14.111)

$t = 0$: $\quad \langle \sigma_z \rangle = -\hbar/2$

$t = \frac{\pi}{4\Omega}$ $\quad \langle \sigma_z \rangle = 0$

$t = \frac{\pi}{2\Omega}$ $\quad \langle \sigma_z \rangle = \hbar/2$

$t = \frac{3\pi}{4\Omega}$ $\quad \langle \sigma_z \rangle = 0$ $\quad$ etc.



$\pi/2$ Puls
90° Puls

π-Puls
180°-Puls

$\rightarrow$ schwingendes B-Feld eingeschaltet für Zeit $t = \frac{\pi}{2\Omega}$

weiter gilt:

$$\langle \sigma_x \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sin(2\Omega t) \sin(\omega_0 t) \quad (14.103)$$

$$\langle \sigma_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(2\Omega t) \cos(\omega_0 t) \quad (14.104)$$

dh. in x-y Ebene, einerseits schnelle Kreisbewegung mit Frequenz ω_0, andererseits Modulation mit $\sin(2\Omega t)$, d.h. 90° Phasenverschoben mit z-Komponente, i.e. xy Komponenten maximal genau wenn z Komponente 0 und umgekehrt.

Der Vektor $\langle \vec{S} \rangle = \begin{pmatrix} \langle \hat{S}_x \rangle \\ \langle \hat{S}_y \rangle \\ \langle \hat{S}_z \rangle \end{pmatrix}$ rotiert/präzediert um z-Achse mit ω_0 und oszilliert simultan von +z zu −z und zurück mit 2Ω.

Resonanz weil $\underset{\text{Spin Frequenz}}{\omega_0} = \underset{\text{B-Frequenz}}{\omega}$

$\boxed{\text{Dies ist das Grundprinzip von \underline{Spinresonanz}: durch anlegen eines harmonischen, zeitabhängigen B-Feldes transversal zu einem statischen B-Feld in Resonanz } \omega_0 = \omega \text{ kann man den Spin kontrolliert rotieren / manipulieren.}}$

Experimente / Praxis: B-Feld oszilliert entlang fixer Achse (x oder y oder xy) oder) und rotiert nicht. kann man auf den rotierenden Fall zurückführen: B oszilliert entlang fixer Achse = Überlagerung von zwei in entgegengesetzten Richtungen rotierenden B-Feldern, eines läuft mit Spin mit, das andere umläuft mit doppelter Frequenz (vom Ruhesystem des Spins aus gesehen) → analoge Gleichungen wie hier, aber mit rasch oszillierendem Zusatzterm (von doppelt so schnell aber entgegengesetzt rotierenden B-Feld), den man in guter Näherung vernachlässigen kann: „<u>rotating wave approximation</u>"