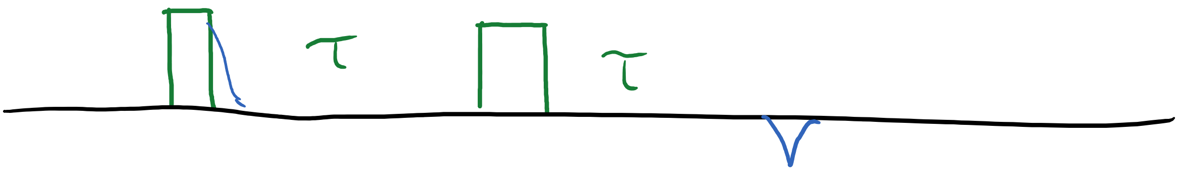
Spin-Echos (Basic)

Monday, December 18, 2017 3:56 PM

Hahn-Echo: (2 Puls-Echo) $\frac{\pi}{2} - \tau - \pi - \tau$

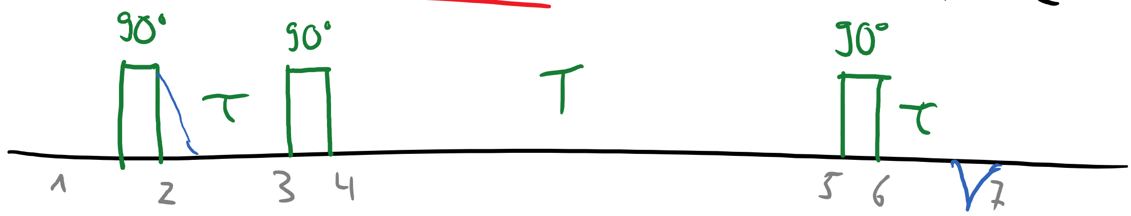


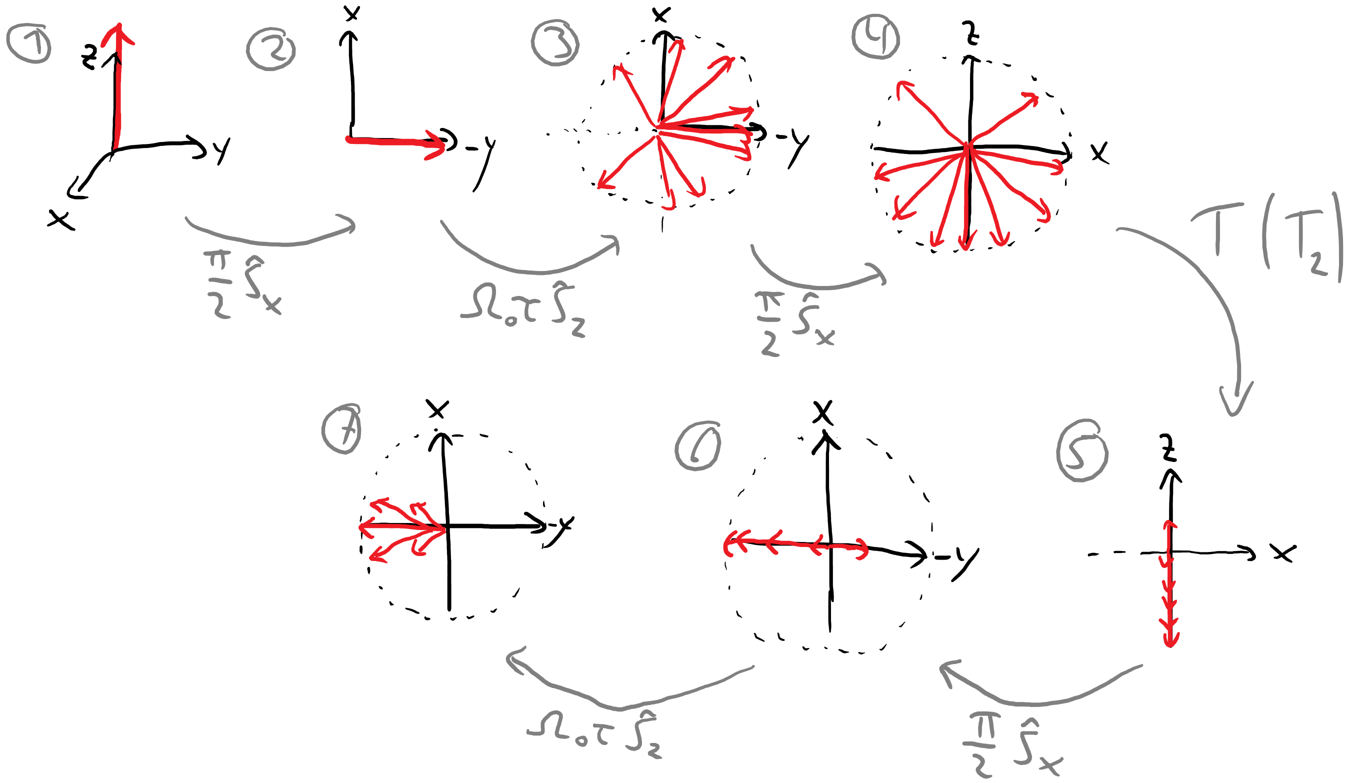
- refokussiert: Zeeman-Offset, Hyperfein-WW
- refokussiert nicht: e-e-WW (wenn beide e-Spins durch Puls angeregt)

$\Rightarrow$ Echo zerfällt mit Phasengedächtniszeit T_m

für isolierte Elektronenspins: $T_m \approx T_2$

Stimuliertes Echo (3-Puls-Echo): $\frac{\pi}{2} - \tau - \frac{\pi}{2} - T - \frac{\pi}{2} - \tau$





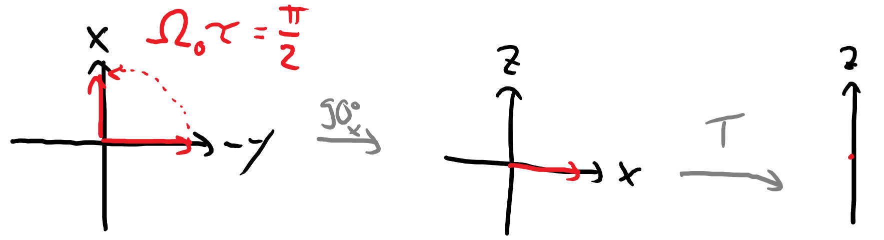
Spin-Echos (Advanced)

Monday, December 18, 2017 4:39 PM

Stimuliertes Echo:

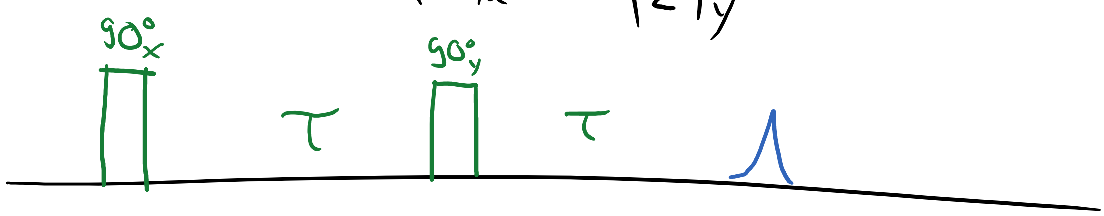
Vorteil: Phasengedächtnis wird als M_z gespeichert („Polarization-Grating")
$\rightsquigarrow$ Phasengedächtnis geht mit T_1 verloren statt mit T_2

Nachteil: kleineres Echo und „Blind-Spots" durch Projektion von $\vec{M}$ in x-z-Ebene auf z-Achse



$\longrightarrow$ Blind-Spots bei $\boxed{\Omega_0 = \frac{n \cdot \pi}{2\tau}}$

Solid Echo: $\left(\frac{\pi}{2}\right)_x - \tau - \left(\frac{\pi}{2}\right)_y - \tau$



- refokussiert: e-e Kopplung, Nullfeldaufspaltung
- refokussiert nicht (vollständig): Zeeman-Offset, Hyperfein-WW

Produkt-Operator-Formalismus (POF)

Monday, December 18, 2017 7:52 PM

Formalismus zur Beschreibung der Evolution des Spin-Systems.

$$\text{Ausgangszustand} \xrightarrow{\text{Operator}} \text{Endzustand}$$

Bsp.: $\hat{S}_z \xrightarrow{\frac{\pi}{2}\hat{S}_x} -\hat{S}_y$

$$\hat{S}_x \xrightarrow{\Omega_0 t \hat{S}_z} \hat{S}_x \cos(\Omega_0 t) + \hat{S}_y \sin(\Omega_0 t)$$

Mathematisch ausführlich:

Zustand durch Dichtematrix beschrieben

Dichtematrix enthält QM Zustand des Systems

$\rightarrow$ Erwartungswerte

$$\boxed{\rho(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|}$$ äußeres Produkt

$$\Rightarrow \langle\hat{O}\rangle = \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{O}\rho)$$

Summe der Diagonalelemente

$$\rho = \begin{pmatrix} \text{Populationen} & \text{Kohärenzen} \\ \text{Kohärenzen} & \text{Populationen} \end{pmatrix}$$

Diagonalelemente: Wahrscheinlichkeit der Besetzung von QM Zustand

Nicht-diagonalelemente: Evolution der kohärenten Superpositionen

Dichtematrix

Monday, December 18, 2017 8:00 PM

Praktisch: ρ als Superposition von Spin-Operatoren

1-Spin: $\rho(t) = a(t)\,\hat{S}_x + b(t)\,\hat{S}_y + c(t)\,\hat{S}_z$

2-Spin: $\rho(t) = \ldots + g(t)\,\hat{S}_x \hat{I}_x + h(t)\,\hat{S}_x \hat{I}_y + \ldots$

3-Spin: $\rho(t) = \ldots + k(t)\,\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x}\hat{I}_x + \ldots$

Propagation de Dichtematrix:

$$\boxed{\rho(t) = U\rho(0)U^{-1}} \qquad U = e^{-i\hat{H}t}$$

unitäre Transformationsmatrix

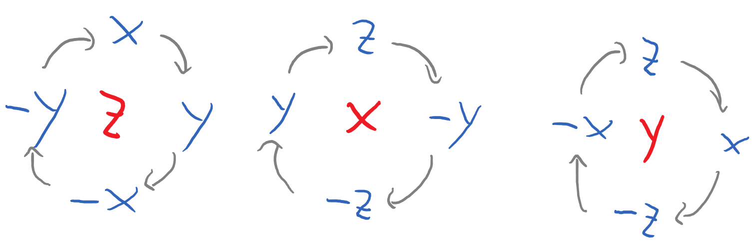
$\rightarrow$ Rotation

generell: $e^{-i\varphi\hat{S}_k}\,\hat{O}\,e^{+i\varphi\hat{S}_k} = \hat{O}\cos\varphi - i[\hat{S}_k, \hat{O}]\sin\varphi$

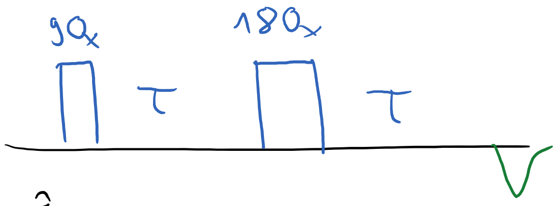
Bsp.:

$$e^{-i\Omega_0 t\hat{S}_z}\,\hat{S}_x\,e^{+i\Omega_0 t\hat{S}_z} = \hat{S}_x\cos\Omega_0 t - i[\hat{S}_z, \hat{S}_x]\sin\Omega_0 t$$
$$= \hat{S}_x\cos\Omega_0 t - i\cdot i\hat{S}_y\sin\Omega_0 t$$
$$= \hat{S}_x\cos\Omega_0 t + \hat{S}_y\sin\Omega_0 t$$

Kommutator-Kreise:



Hahn-Echo



1 Spin: $\hat{H} = \Omega_0 \hat{S}_z$

$$\hat{S}_z \xrightarrow{\frac{\pi}{2}\hat{S}_x} -\hat{S}_y \xrightarrow{\Omega_0 \tau \hat{S}_z} -\hat{S}_y \cos(\Omega_0\tau) + \hat{S}_x \sin(\Omega_0\tau)$$

$$\Big\downarrow \pi \hat{S}_x$$

$$+S_y \cos(\Omega_0\tau) + S_x \sin(\Omega_0\tau)$$

$$\Big\downarrow \Omega_0 \tau \hat{S}_z$$

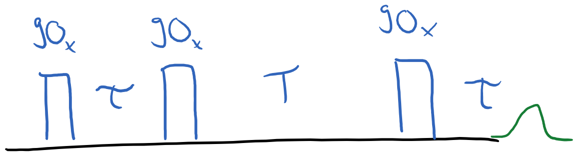
$$+\hat{S}_y \cos^2(\Omega_0\tau) - \cancel{\hat{S}_x \cos(\Omega_0\tau)\sin(\Omega_0 t)}$$

$$+ \cancel{\hat{S}_x \sin(\Omega_0\tau)\cos(\Omega_0\tau)} + S_y \sin^2(\Omega_0 t)$$

$$= \hat{S}_y \left[\cos^2(\Omega_0\tau) + \sin^2(\Omega_0\tau)\right] = \hat{S}_y$$

$\Rightarrow$ alle Spin-Pakete evolvieren zu $\hat{S}_y$, unabhängig von Ω_0, nach τ

Stimuliertes Echo



1 Spin: $\hat{H}_0 = \Omega_0 \hat{S}_z$

$$\hat{S}_z \xrightarrow{\frac{\pi}{2}\hat{S}_x} -\hat{S}_y \xrightarrow{\Omega_0 \tau \hat{S}_z} -\hat{S}_y \cos(\Omega_0 \tau) + \hat{S}_x \sin(\Omega_0 \tau)$$

$$\Big\downarrow \frac{\pi}{2}\hat{S}_x$$

$$-\hat{S}_z \cos(\Omega_0 \tau) \xleftarrow{T \gg T_2} -\hat{S}_z \cos(\Omega_0 \tau) + \hat{S}_x \sin(\Omega_0 \tau)$$

$$\Big\downarrow \frac{\pi}{2}\hat{S}_x$$

$$\hat{S}_y \cos(\Omega_0 \tau) \xrightarrow{\Omega_0 \tau \hat{S}_z} \hat{S}_y \cos^2(\Omega_0 \tau) - \frac{1}{2}\hat{S}_x \sin(2\Omega_0 \tau)$$

$$\Big\downarrow$$

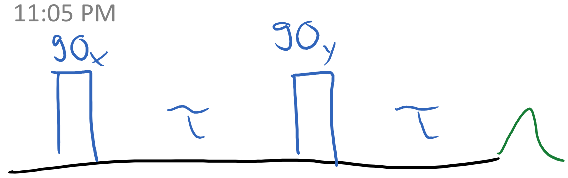
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \cos^2(\Omega_0 \tau)\, d\Omega_0 = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} 1 \, d\Omega_0$$

$\Rightarrow$ Stimulated Echo max. 50% der Intensität von Hahn-Echo

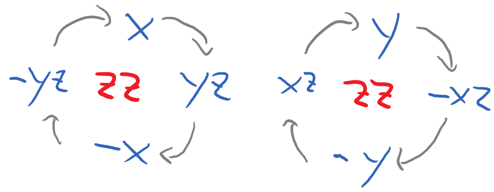
Solid Echo (POF)

Monday, December 18, 2017 11:05 PM

Solid Echo



2-Spin: $\hat{H}_0 = \omega_{ee} \hat{S}_{1z} \hat{S}_{2z}$



$$\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z} \xrightarrow{\frac{\pi}{2}\left(\hat{S}_{1x} + \hat{S}_{2x}\right)} -\hat{S}_{1y} - \hat{S}_{2y}$$

$$\xrightarrow{\omega_{ee}\tau \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}} -\left(\hat{S}_{1y} + \hat{S}_{2y}\right)\cos\left(\omega_{ee}\tau\right)$$

$$+\underbrace{\left(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2z} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2x}\right)}_{\text{"Antiphasen-Kohärenz"}}\sin\left(\omega_{ee}\tau\right)$$

$$\xrightarrow{\frac{\pi}{2}\left(\hat{S}_{1y} + \hat{S}_{2y}\right)} -\left(\hat{S}_{1y} + \hat{S}_{2y}\right)\cos\left(\omega_{ee}\tau\right)$$

$$-\left(S_{1z}S_{2x} + S_{1x}S_{2z}\right)\sin\left(\omega_{ee}\tau\right)$$

$$\xrightarrow{\omega_{ee}\tau \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}} -\left(\hat{S}_{1y} + \hat{S}_{2y}\right)\cos^2\left(\omega_{ee}\tau\right)$$

$$+\cancel{\left(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2z} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2x}\right)\cos\left(\omega_{ee}\tau\right)}\sin\left(\omega_{ee}\tau\right)$$

$$-\cancel{\left(\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1x}\hat{S}_{2z}\right)\sin\left(\omega_{ee}\tau\right)}\cos\left(\omega_{ee}\tau\right)$$

$$-\left(\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1y}\right)\sin^2\left(\omega_{ee}\tau\right)$$

$$= \underline{-\left(\hat{S}_{1y} + \hat{S}_{2y}\right)} \quad \text{Echo!}$$