

## II Die Winkelkorrelationsfunktion

### II.1 Mathematisches Werkzeug

Der Erwartungswert eines Operators  $S$  in einem durch den Dichteoperator  $\rho$  beschriebenen quantenmechanischen Ensemble ist:

$$\langle S \rangle = Sp(\rho^+ S) \quad \text{[45]} \quad \text{[36]}.$$

Es wird eine analoge Algebra eingeführt, innerhalb der speziell der Umgang mit dem Dichteoperator  $\rho$  vereinfacht wird [Stö91] und [Gab71]:

#### 1.1 Die irreduzible Darstellung

Der Tensor  $S$  heißt irreduzibel, wenn bei einer Drehung  $R(\alpha, \beta, \gamma)$  im Raum gilt:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) S_{lm} = \sum_{m'} D_{m'm}^l(\alpha, \beta, \gamma) S_{lm'} \quad (\text{vgl. [21], S. 77}),$$

Die Definition der irreduziblen Darstellung [Stö91] von Operatoren erfolgt, wie man erkennt, analog zum Drehimpulsformalismus. Dieser wird hier kurz durch Wirkung von  $L_+$  und  $L_z$  auf eine Wellenfunktion  $|l, m\rangle$  veranschaulicht:

$$\begin{aligned} L_+ |l, m\rangle &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m+1\rangle \\ L_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle \end{aligned}$$

Statt der Wellenfunktion wird nun ein Operator  $S$  betrachtet:

$$\begin{aligned} [L_+, S_q^\lambda] &= \sqrt{\lambda(\lambda+1) - q(q+1)} S_q^\lambda \\ [L_z, S_q^\lambda] &= q S_q^\lambda \end{aligned} \quad \text{[37]}$$

Gleichung {37} ist eine alternative Methode zur Definition der irreduziblen Darstellung  $S_q^\lambda$  des Operators  $S$ . Speziell für den Dichteoperator  $\rho(I)$  des Zustandes  $I, M$  werden folgende Relationen eingeführt:

$$\begin{aligned} \lambda &= I - I', \\ q &= -|\lambda| \dots |\lambda|, \end{aligned}$$

mit  $|I| = |I'|$ ,

Die irreduzible Darstellung  $\rho_q^\lambda(I)$  des Dichteoperators ergibt sich aus dem Wigner-Eckart-Theorem zu:

$$\rho_q^\lambda(I) = Sp(\rho I_{\lambda q}) = \sum_{mm'} \langle m | \rho | m' \rangle \sqrt{\frac{2\lambda+1}{2I+1}} \langle I m \lambda q | I m' \rangle, \quad \text{[38]}$$

wobei  $I_{\lambda q}$  die irreduziblen Komponenten des Spins  $I$  und  $\langle I m \lambda q | I m' \rangle$  aus der Drehimpulsaddition resultierende Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind [Stö91].

45 Dies steht in geringem Widerspruch zu Definitionen verschiedener Lehrbücher  $\langle S \rangle = Sp(\rho S)$ , führt aber letztendlich zu keinem Fehler. Die Operatoren und Superoperatoren werden ab hier aus Übersichtlichkeitsgründen nicht mehr mit einem Dach versehen.

1.2 Der Liouville-Raum

Der Liouville-Raum betrachtet nicht Wellenfunktionen, sondern Operatoren  $S$  als seine Vektoren.

	Hilbert-Raum $H$ ( $Dim=N$ )	Liouville-Raum $L$ ( $Dim=2N$ )
Vektor	$ \psi\rangle$	$ B\rangle$ ist der Vektor des Operators $B$ z.B. auch $ \psi\rangle\langle\psi'  =  \psi'\rangle\langle\psi $
Skalarprodukt	$\langle\psi \phi\rangle = \int \phi \psi^*$	$(\rho B) = Sp(\rho^+ B)$ = Mittelwert des Operators $B$ wenn $\rho$ der Dichteoperator ist.
Operator	Operator $S \psi\rangle$	Beispiele für Superoperatoren $S$ : $\underline{S} B\rangle =  SB\rangle$ $\overline{S} B\rangle =  BS\rangle$ $\tilde{S} B\rangle =  [S, B]\rangle$
Bewegungsgleichung	Schrödinger-Gleichung $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}  \psi\rangle = H \psi\rangle = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)\right)  \psi\rangle$ $ \psi\rangle(t) = e^{-i\frac{H}{\hbar}t}  \psi\rangle(0)$  Hamiltonian: $H \psi\rangle = E_\psi  \psi\rangle$	Liouville-Gleichung $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}  \rho\rangle = [\tilde{L}, \rho]$ $ \rho\rangle(t) = e^{-i\frac{\tilde{L}}{\hbar}t}  \rho\rangle(0)$  Liouvillian: $\tilde{L} \psi\rangle\langle\psi'  = (E_\psi - E_{\psi'})  \psi\rangle\langle\psi' $

Tabelle 8: Kurzer Vergleich von Hilbert- und Liouville Raum

Die irreduzible Darstellung des Dichteoperators lautet unter Berücksichtigung von Gleichung {38} in der neuen Schreibweise  $\rho_q^\lambda = (\lambda q|\rho)$ . \_\_\_\_\_ {39}

Der Drehoperator  $D^{\tilde{L}}(\alpha) = e^{-i\alpha\tilde{L}\tilde{n}}$  [Fra65] ist für die folgenden Überlegungen ebenfalls wichtig. Er dreht das Koordinatensystem eines Zustandes um eine Achse  $\tilde{n}$  um einen bestimmten Winkel  $\alpha$ .

Spezialfälle für die Drehmatrix:

- $D_{m'0}^l(\psi, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)}} Y_{m'}^l(\theta, \phi),$
- $D_{00}^l(\psi, \theta, \phi) = P^l(\theta, \phi),$

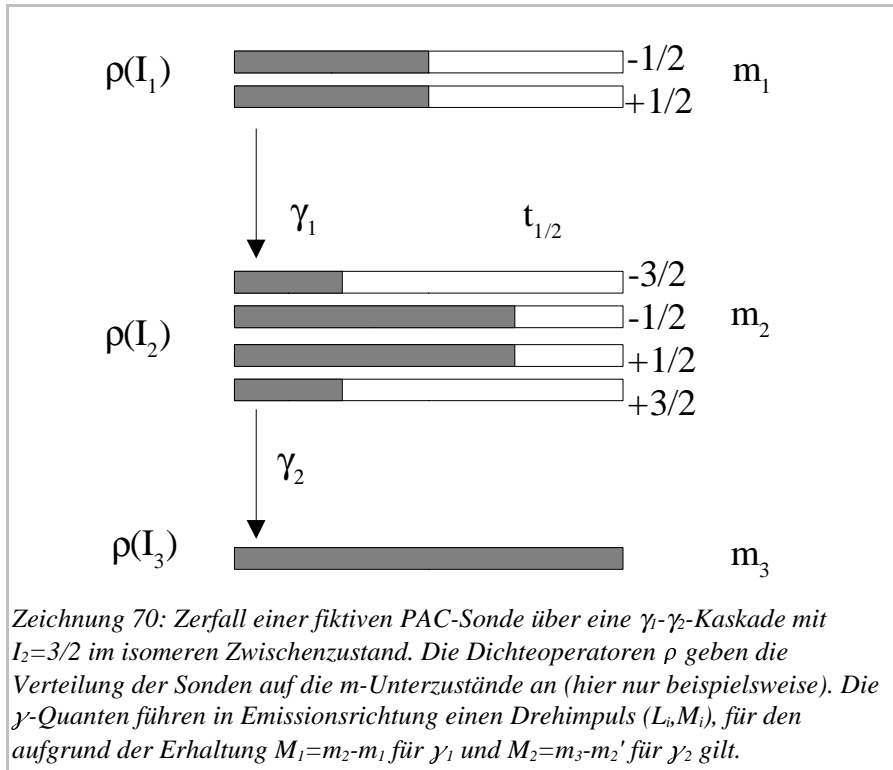
Der Vorteil von irreduziblen Tensoren ist ihr einfaches Transformationsverhalten bei Drehungen:

$S_q^\alpha(I, \alpha, \beta, \gamma) = \sum_{q'} S_{q'}^\alpha(I) D_{q'q}^\alpha(\alpha, \beta, \gamma)$ , d.h. Drehsuperoperatoren verhalten sich wie Drehoperatoren. Dies gilt sowohl für die Vektoren des Hilbert-, als auch des Liouville-Raums.

## II.2 Ableitung der Winkelkorrelationsfunktion

Bei der PAC-Methode werden radioaktive Sondenkerne verwendet, die wie folgt zerfallen:

Der im angeregten Zustand (Spin  $I_1$ ) befindliche Kern zerfällt unter Aussendung eines Gammaquants ( $\gamma_1$ ) in ein isomeres Zwischenniveau (Spin  $I_2$ ), von wo er nach einer gewissen Zeit unter Aussendung eines Gammaquants ( $\gamma_2$ ) in den Grundzustand (Spin  $I_3$ ) zerfällt. Typische Spins des Zwischenniveaus liegen zwischen  $3/2$  und  $11/2$ .



### 2.1 Der $\gamma_1$ -Zerfall:

Die magnetischen Hyperfeinwechselwirkungen bleiben zunächst ausgeschaltet, weswegen keine energetische Aufspaltung der  $m$ -Unterkomponenten vorhanden ist.

Der Dichteoperator des Zwischenzustandes  $\rho(I_2)$ , welcher durch den  $\gamma_1$ -Zerfall bevölkert wird, lautet:

$\rho(I_2) = H^+(\vec{y}_1) \rho(I_1) H(\vec{y}_1)$  wobei  $H_1$  der Übergangshamiltonian für den  $\gamma_1$ -Zerfall ist. Der Dichteoperator  $\rho(I_1)$ , welcher die Verteilung der Kerne auf die  $m_1$ -Unterkomponenten des Ausgangszustandes  $I_1$  beschreibt wird als Einheitsoperator angenommen (statistische Verteilung).

Die Bevölkung des Zwischenzustandes  $m_2$  erhält man durch die Summation über alle Anfangszustände  $m_1$ ,

$$\begin{aligned} \rho(I_2)_{m_2 m_2'} &= \sum_{m_1} H_{m_2 m_1}^*(\vec{y}_1) H_{m_2' m_1}(\vec{y}_1) = \sum_{m_1 M_1 M_1'} \langle \vec{y}_1 | M_1 \rangle^* \langle M_1 | H \rangle_{m_2 m_1}^* \langle \vec{y}_1 | M_1' \rangle \langle M_1' | H \rangle_{m_2' m_1} = \\ &= \sum_{m_1 M_1 M_1'} \langle \vec{y}_1 | M_1 \rangle^* H(M_1)_{m_2 m_1}^* \langle \vec{z} | M_1' \rangle H(M_1')_{m_2' m_1} \end{aligned}$$

$\rho(I_1)$  und damit  $\rho(I_2)$  ist diagonal, wenn die Quantisierungsachse  $z$  in Emissionsrichtung von  $\gamma_1$  gewählt wird, dann gilt für  $\rho_{m_1 m_1'}$ :  $m_2=m_2'$ ,  $m_1=m_1'$ ,  $M_1=M_1'$ . Hierbei ist  $M_1=m_2-m_1$  die Magnetquantenzahl des Gammaquants.

$$\rho(I_2)_{m_2 m_2} = \sum_{m_1 M_1} |\langle \vec{y}_1 | M_1 \rangle|^2 |H(M_1)_{m_2 m_1}|^2 = \sum_{\mu M_1} |\langle 0 | M_1 \rangle D_{M_1 \mu}^{L_1}(\vec{z} \rightarrow \vec{y}_1)|^2 |H(M_1)_{m_2 m_1}|^2 = \sum_{m_1} F_{M_1}^{L_1}(\vec{y}_1) G(m_1 \rightarrow m_2)$$

$F_{M_1}^{\vec{L}_1}(\vec{\gamma}_1) = |\vec{L}_1 Y_{L_1}^{M_1}|^2 / \sum_m |\vec{L}_1 Y_{L_1}^{M_1}|^2$  ist die Ausstrahlcharakteristik [ScW97], also die Intensität der Gammastrahlung der Multipolordnung  $(L_1, M_1)$  in Abhängigkeit vom Emissionswinkel von  $\vec{\gamma}_1$  hinsichtlich  $z$ ,  $|M_1\rangle$  sind die Eigenvektoren von  $L_1$  und  $G(m_1 \rightarrow m_2) = |H(M_1)_{m_2, m_1}|^2$  ist die Übergangswahrscheinlichkeit von  $m_1$  nach  $m_2$ . Sie kann durch das Wigner-Eckart-Theorem weiter vereinfacht werden [ScW97]:

$$G(m_1 \rightarrow m_2) = |H(M_1)_{m_2, m_1}|^2 = |\langle I_2 m_2 | H(M_1) | I_1 m_1 \rangle|^2 = \begin{pmatrix} I_1 & L_1 & I_2 \\ -m_1 & M_1 & m_2 \end{pmatrix}^2 \langle I_2 || H(M_1) || I_1 \rangle^2$$

Das reduzierte Matrixelement  $\langle I_2 || H(M_1) || I_1 \rangle$  ist unabhängig von den Magnetquantenzahlen und daher für alle Übergänge zwischen  $I_1$  und  $I_2$  gleich.  $H(M_1)$  wird auch Multipoloperator genannt. Multipolstrahlung niedrigster Ordnung ist die Dipolstrahlung mit  $L_1 = I$ ,  $M_1 = \pm I$  in Emissionsrichtung.

## 2.2 Die Störung des Zwischenzustandes durch Hyperfeinwechselwirkung

Läßt man nun auf den Zwischenzustand ein axialsymmetrisches Hyperfeinfeld  $B$  wirken, so richten sich die Spins aus. Es kommt zum Zeeman-Effekt, der zum einen die energetische Aufspaltung  $\Delta E$  derjenigen  $m_2$ -Unterkontinua, welche den Wechselwirkungs-Hamiltonian  $H(B)$  diagonalisieren hervorruft und zum anderen eine Phasendrehung um  $\Lambda_{m_2, m_2}(t) = \exp(-i m_2 \omega_L t)$  dieser Zustände mit sich bringt.

$\omega_L = \Delta E / \hbar = \mu_N \vec{B} / \hbar$  ist die Larmorfrequenz.

Ein direktes Ausmessen der energetischen Aufspaltung  $\Delta E$ , z.B. über die emittierte Gammastrahlung  $\gamma_2$  ist nicht möglich, da derart kleine Energien durch einen Detektor nicht auflösbar sind. Daher versucht man, die durch das Feld hervorgerufene Zeitabhängigkeit der Kernzustände sichtbar zu machen. Hierzu soll zunächst die Zeitabhängigkeit des Dichtoperators im Zwischenzustand  $I_2$  betrachtet werden:

$$\rho(I_2, t) = \Lambda^+(\omega_L t) \rho(I_2) \Lambda(\omega_L t)$$

Wählt man die Richtung von  $B$  und  $\gamma_1$  parallel, so sind sowohl der Zeitentwicklungsoperator  $\Lambda(t)$  als auch  $\rho(I_2)$  diagonal.

$$\rho_{m_2}(I_2, t) = \exp(i m_2 \omega_L t) \rho_{m_2}(I_2) \exp(-i m_2 \omega_L t) = \rho_{m_2}(I_2)$$

Die Zeitabhängigkeit ist nicht mehr vorhanden. Daher darf  $B$  nicht parallel zu  $\gamma_1$  liegen, um meßbar zu sein. Diese Tatsache erhöht allerdings den Rechenaufwand. Zur Illustration soll folgendes Beispiel dienen: Wird ein Kernensemble im Zwischenzustand betrachtet, so ist seine Dichtematrix für  $z || \vec{\gamma}_1$  gegeben durch  $\rho_{m_2}(I_2)$ . Um die Basis  $\vec{\gamma}_1$ , welche  $\rho(I_2)$  diagonalisiert in die Basis  $\vec{B}$ , welche den Zeitentwicklungsoperator diagonalisiert, zu überführen, werden Drehoperatoren  $D$  verwendet:

$$\rho_{m_2, m_2'}(I_2, t) = \exp(i m_2 \omega_L t) D^+ \rho_{m_2, m_2'}(I_2) D \exp(-i m_2 \omega_L t) = \exp(i m_2 \omega_L t) \rho'_{m_2, m_2'} \exp(-i m_2' \omega_L t)$$

Man erkennt, daß nur die Nichtdiagonalelemente zeitabhängig sind. Die Dichtematrix des Überganges  $I_2$  nach  $I_3$  darf aus diesem Grund ebenfalls nicht diagonal sein, da sonst die Diagonalelemente von  $\rho(I_3)$  zeitunabhängig bleiben, an denen schließlich gemessen werden soll. Wieder müssen Drehoperatoren verwendet werden, welche die Situation noch stärker komplizieren. Daher begibt man sich vom Hilbert- in den Liouville Raum und definiert den Superoperator  $G$ :  $G(\omega_L t) \rho = \Lambda^+(\omega_L t) \rho \Lambda(\omega_L t)$ .

Um weiterhin mit der diagonalen Form von  $\Lambda(t)$  und  $\rho(I_2)$  rechnen zu können, wird zwischen beide ein Drehsuperoperator  $D$  geschaltet, der die beiden, den Dichteoperator und den Zeitentwicklungsoperator diagonalisierenden Basen ineinander überführt:  $\hat{\rho}(I_2, t) = G(t) D(\vec{\gamma}_1 \rightarrow \vec{z}) \vec{\rho}(I_2) | \underline{\hspace{2cm}} \{40\}$

### 2.3 Die Winkelkorrelationsfunktion

Der Übergang vom Niveau  $I_2$  zum Niveau  $I_3$  unter Aussendung von  $\gamma_2$  erfolgt analog zur Emission von  $\gamma_1$ . Die Winkelkorrelationsfunktion ist der emissionswinkel- und zeitabhängige Erwartungswert für die Verteilung der zerfallenden Kerne auf die  $m_3$ -Unterzustände des Niveaus  $I_3$  unter Emission von  $\gamma_2$ . Sie wird beschrieben durch die Größe  $W(\vec{\gamma}_2)$ . Aus Gleichung {36} auf Seite 81 für den Erwartungswert erhält man:

$$W(\vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2, t) = Sp[\hat{\rho}^+(I_2, t)W(\vec{\gamma}_2)] = Sp[G^+(-t)D^+(\vec{\gamma}_1 \rightarrow \vec{z})\hat{\rho}^+(I_2)D(\vec{\gamma}_2 \rightarrow \vec{z})\vec{W}(\vec{\gamma}_2)] \quad \{41\}$$

Wiederum mußte  $\vec{W}(\vec{\gamma}_2)$  mittels Drehsuperoperator aus seinem Diagonalsystem in das Basissystem des  $B_{Hf}$ -Feldes ( $z$ ) gedreht werden. Die Operatoren  $\hat{\rho}^+(I_2)$  und  $\vec{W}(\vec{\gamma}_2)$  werden direkter Orientierungs- bzw. Distributionsoperator genannt. Die allgemeine Form der Winkelkorrelationsfunktion läßt sich mit der Nomenklatur des Liouillerraums (Tabelle 8) schreiben als :

$$W(\vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2, t) = Sp[\hat{\rho}^+(I_2, t)W(\vec{\gamma}_2)] = (\hat{\rho}(I_2, t)|\vec{W}(\vec{\gamma}_2)) \quad \{42\}$$

Nach Einsetzen der Störungs- und Drehsuperoperatoren aus Gleichung {41}, Seite 85 und bei Übergang zur Matrixschreibweise durch den Einbau von produktiven (1-zu-1)-Projektionsoperatoren der Form  $|\lambda q\rangle\langle\lambda q|$  und Verwendung von Gleichung {39}, Seite 82 ergibt sich aus {42}:

$$\begin{aligned} W(\vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2, t) &= (\vec{\rho}(I_2)D(\vec{\gamma}_1 \rightarrow B)|G(t)|D(\vec{\gamma}_2 \rightarrow B)W(\vec{\gamma}_2)) = \\ &= \sum (\vec{\rho}|\lambda q)\langle\lambda q|D_{\vec{\gamma}_1 \rightarrow \vec{B}}^+|\lambda' q'\rangle\langle\lambda' q'|G^+(-t)|\lambda'' q''\rangle\langle\lambda'' q''|D_{\vec{\gamma}_2 \rightarrow \vec{B}}|\lambda''' q'''\rangle\langle\lambda''' q'''|\vec{W}) \\ &= \sum_{\lambda, q, \lambda', q'} \rho_{\lambda}^{\vec{+}0} D_{0q}^{+\lambda}(\vec{\gamma}_1 \rightarrow \vec{B}) G_{qq'}^{+\lambda\lambda'}(-t) D_{0q'}^{\lambda}(\vec{\gamma}_2 \rightarrow \vec{B}) \vec{W}_{\lambda'}^0 = \\ &= \sum_{\lambda, q, \lambda', q'} \frac{4\pi}{\sqrt{2\lambda+1}\sqrt{2\lambda'+1}} \rho_{\lambda}^{\vec{+}0} Y_q^{+\lambda}(\theta_1, \phi_1) G_{qq'}^{+\lambda\lambda'}(-t) Y_{q'}^{\lambda'}(\theta_2, \phi_2) \vec{W}_{\lambda'} \end{aligned} \quad \{43\}$$

Man beachte, daß für diagonale Orientierungs- und Distributionskoeffizienten je  $q=m-m'=0$  gilt.

Der Orientierungskoeffizient  $\rho_{\lambda}^{\vec{+}}$  und der Distributionskoeffizient  $\vec{W}_{\lambda}'$  werden gewöhnlich zum Anisotropiekoeffizienten  $A_{\lambda\lambda'}$  zusammengefaßt.  $\lambda$  und  $\lambda'$  sind gerade Zahlen [Ste71, Seite 19-23].

**Die allgemeine Formel für die kombinierte Wechselwirkung lautet:**

$$W(\vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2, t) = \sum_{\lambda, q, \lambda', q'} \frac{A_{\lambda\lambda'}}{\sqrt{2\lambda+1}\sqrt{2\lambda'+1}} Y_q^{+\lambda}(\theta_1, \phi_1) G_{qq'}^{+\lambda\lambda'}(-t) Y_{q'}^{\lambda'}(\theta_2, \phi_2) \quad \{44\}$$

(vgl. Gleichung {16}, Seite 17). Der Störoperator in {44} ergibt sich wiederum durch Einfügen produktiver (1-zu-1)-Projektionsoperatoren und lautet ausgeschrieben [Gab71]:

$$\begin{aligned} (\lambda q|G(\omega_Q t)|\lambda' q') &= (\lambda q|e^{-iLt}|\lambda' q') = \sum_{mm'} (\lambda q|e^{-iLt}|mm') (mm'|\lambda' q') = \\ G_{\lambda\lambda'}^{qq'} &= \sum_{mm'} (\lambda q|mm') e^{\frac{-i}{\hbar}(E_m - E_{m'})t} (mm'|\lambda' q') \\ G_{\lambda\lambda'}^{qq'} &= \delta_{qq'} \sqrt{(2\lambda+1)(2\lambda'+1)} \sum_{mm'} \begin{pmatrix} I & \lambda & I \\ -m & q & m' \end{pmatrix} e^{\frac{-i}{\hbar}(E_m - E_{m'})t} \begin{pmatrix} I & \lambda' & I \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \end{aligned} \quad \{45\}$$

## 2.4 Spezialfälle:

1. Bei äußeren **Magnetfeldern** entspricht die zeitliche Störung einer Präzession des Spins um die Magnetfeldachse um den Winkel  $\omega t$ . Sie wird als Drehsuperoperator ausgedrückt. Bei axialsymmetrischen Feldern ist:

$$(\lambda q|G(\omega_L t)|\lambda' q') = (\lambda q|D^+(-\omega_L t)|\lambda' q') = D_{qq}^{\lambda+} \delta_{qq'} \delta_{\lambda\lambda'} = e^{iq\omega_L t} \delta_{qq'} \delta_{\lambda\lambda'}$$

Im folgenden wird betrachtet, wie sich der Winkel zwischen dem **MHF** und den Emissionsrichtungen von  $\gamma_1$  und  $\gamma_2$  auf die Winkelkorrelationsfunktion auswirkt.

–  $\vec{B}_{hf}$  und  $\vec{y}_1, \vec{y}_2$  in beliebigem Winkel:

$$W(t) = \sum_{\lambda, q} \rho_{\lambda}^{\vec{+}0} D_{0q(\vec{y}_1 \rightarrow \vec{B})}^{+\lambda} D_{qq}^{+\lambda}(-\omega_L t) D_{0q(\vec{y}_2 \rightarrow \vec{B})}^{\lambda} \vec{W}_{\lambda}^0 = \sum_{\lambda, q} \frac{4\pi}{2\lambda+1} \rho_{\lambda}^{\vec{+}0} Y_q^{+\lambda}(\theta_1, \phi_1) e^{iq\omega_L t} Y_q^{\lambda}(\theta_2, \phi_2) \vec{W}_{\lambda}$$

Die Dichtematrix im Zwischenzustand ist:  $\rho_{\lambda}^{+q}(t) = \rho_{\lambda}^{+q}(0) e^{iq\omega_L t}$

–  $\vec{B}_{hf} \perp \vec{y}_1, \vec{y}_2$ . In diesem Fall liegen  $\vec{y}_1, \vec{y}_2$  in der selben Ebene wie  $\omega t$ . Die Drehoperatoren sind zusammenzufassen:

$$W(t) = \sum_{\lambda, q} \rho_{\lambda}^{\vec{+}0} D_{0q(\vec{y}_1 \rightarrow \vec{B})}^{+\lambda} D_{qq}^{+\lambda}(-t) D_{q0(\vec{B} \rightarrow \vec{y}_2)}^{+\lambda} \vec{W}_{\lambda}^0 = \sum_{\lambda} \rho_{\lambda}^{\vec{+}0} D_{00}^{+\lambda}(\theta - \omega_L t) \vec{W}_{\lambda}^0$$

$$W(t) = \sum_{\lambda} \rho_{\lambda}^{\vec{+}0} P^{\lambda}(\cos(\theta - \omega_L t)) \vec{W}_{\lambda}^0$$

$\theta$  ist der Winkel zwischen  $\gamma_1$  und  $\gamma_2$

Aus dieser Gleichung heraus kann die zeitabhängige Dichtematrix im Zwischenzustand definiert werden:

$$\rho_{\lambda}^{\vec{+}0}(t) = \rho_{\lambda}^{\vec{+}0} P^{\lambda}(\cos(\theta - \omega_L t))$$

Für die ersten beiden Komponenten ergibt sich beispielsweise:

$$\rho_0^{\vec{+}0}(t) = \rho_{\lambda}^{\vec{+}0}$$

$$\rho_2^{\vec{+}0}(t) = \rho_2^{\vec{+}0} \frac{1}{2} (3\cos^2 \omega_L t - 1) = \frac{1}{4} [1 + 3\cos(2\omega_L t)]$$

Auf das Problem der Umpopulation im Zwischenzustand wird später noch näher eingegangen werden.

–  $\vec{B}_{hf} \parallel \vec{y}_1, \vec{y}_2$  in diesem Fall sind die Drehmatrizen zur Transformation der Koordinatensysteme Diracsche Deltafunktionen

$$W(\theta, \phi, t) = (\vec{\rho}_1(\vec{y}_1)|D(\omega_L t)|\vec{W}(\vec{y}_2)) = \sum_{\lambda, q} \rho_{\lambda}^{\vec{+}0} D_{00}^{+\lambda}(-\omega_L t) \vec{W}_{\lambda} = \sum_{\lambda, q} \rho_{\lambda}^{\vec{+}0} e^{(i0\omega_L t)} \vec{W}_{\lambda} = const.$$

Es liegt keine Zeitabhängigkeit vor.

Man beachte, daß auch der Erwartungswert des Spins auf diese Weise berechnet werden kann.

- Der Erwartungswert des zu  $B_{hf}$  parallelen Spinanteils  $\langle S_z \rangle$  ist dann zeitunabhängig.

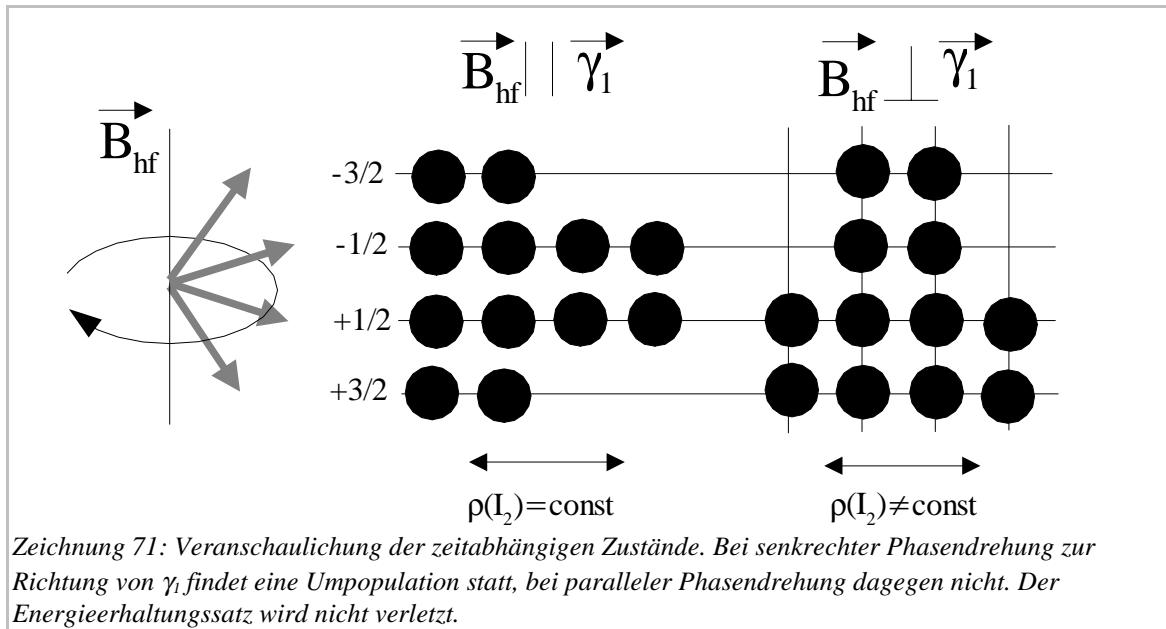
$$\langle S_z \rangle = (\vec{\rho}(S) D(\vec{\gamma}_1 \rightarrow \vec{B}) | D(\omega_L t) | \vec{S}_z \rangle = \sum_{\lambda q} \rho_0^{\vec{\lambda}+} D_{0q}^{\lambda+}(\vec{\gamma}_1 \rightarrow \vec{B}) e^{iq\omega_L t} \delta_{q0} S_{z0}^\lambda = \sum_{\lambda} \rho_0^{\vec{\lambda}+} P^\lambda(\cos \theta) S_z^\lambda$$

- Der Erwartungswert des zu  $B_{hf}$  rechtwinkligen Spinanteils ist periodisch zeitabhängig

$$\langle S_x \rangle = (\vec{\rho}(S) D_{(\vec{\gamma}_1 \rightarrow \vec{B})} | D(\omega_L t) | D_{(\vec{x} \rightarrow \vec{B})} \vec{S}_x \rangle$$

$$\langle S_x \rangle = \sum_{\lambda} \rho_0^{\vec{\lambda}+} D_{00}^{\lambda+}(\vec{\gamma}_1 \rightarrow -\omega t \rightarrow \vec{x}) S_{x0}^\lambda = \sum_{\lambda} \rho_0^{\vec{\lambda}+} P^\lambda(\cos(\theta - \omega t)) S_x^\lambda$$

Man spricht daher auch von einer Umpopulation der zu  $B_{hf}$  rechtwinkligen Zustände im Zwischenniveau (Zeichnung).



2. Bei **elektrischer Quadrupolwechselwirkung** besitzt der Störoperator eine kompliziertere Form [Gab71, Seite 405] als bei der Dipolwechselwirkung. Zur Vereinfachung werden die Projektionsoperatoren  $|mm'\rangle\langle mm'|$  in (1) eingebaut:

$$(\lambda q | G(\omega_Q t) | \lambda' q') = (\lambda q | e^{-i\tilde{L}t} | \lambda' q') = \sum_{mm'} (\lambda q | e^{-i\tilde{L}t} | mm') (mm' | \lambda' q') = \sum_{n=m^2-m'^2} S_{n\lambda\lambda'} e^{-3in\omega_Q t}$$

Die Winkelkorrelationsfunktion ist dann:

$$W(\vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2, t) = \sum_{\lambda, q, \lambda', q'} \frac{4\pi}{\sqrt{2\lambda+1}\sqrt{2\lambda'+1}} \rho_{\lambda}^{\vec{\lambda}+} Y_q^{\lambda+}(\theta_1, \phi_1) \sum_{n=m^2-m'^2} S_{n\lambda\lambda'} e^{-3in\omega_Q t} Y_{q'}^{\lambda'}(\theta_2, \phi_2) \vec{W}_{\lambda'}$$

Für die elektrische Quadrupolwechselwirkung gilt ebenfalls, daß keine Zeitabhängigkeit vorliegt, wenn die Achse des **EFQ** parallel zur Emissionsrichtung verläuft.