Universität Regensburg, Fakultät für Physik
Prof. Dr. Tilo Wettig

WS 2023/24

Übungen zur Quantenmechanik für LA und Nanoscience
Blatt 14 (für die Übungen in der Woche 05.02.-09.02.)

Die Bearbeitung dieses Übungsblattes ist freiwillig. Die Berechnung der angekreuzten Aufgaben (50%) ist mit Blatt 13 abgeschlossen, aber mit Blatt 14 können Sie Bonusprozente erwerben.

---

1 Zweidimensionaler Hilbertraum

Betrachten Sie einen zweidimensionalen Hilbertraum mit orthogonalen (aber nicht notwendigerweise normierten) Basiskets $|\varphi_1\rangle$ und $|\varphi_2\rangle$, wobei $\langle\varphi_i|\varphi_i\rangle = c_i$. Die Wirkung eines Operators A auf diese Kets ist durch

$$A|\varphi_1\rangle = -|\varphi_2\rangle\,, \qquad A|\varphi_2\rangle = -|\varphi_1\rangle$$

gegeben.

a) Drücken Sie den Operator A in den Operatoren $|\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|$ (mit $i, j = 1, 2$) aus.

b) Welche Bedingung müssen die Normierungsfaktoren von $|\varphi_1\rangle$ und $|\varphi_2\rangle$ erfüllen, damit A hermitesch ist?

c) Drücken Sie $AA^\dagger$, $A^\dagger A$ und A^2 in den Operatoren $|\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|$ aus.

d) Schreiben Sie A in Matrixform und berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenkets.

2 Hyperfeinstruktur

Die Hyperfeinstruktur atomarer Spektren ist eine Konsequenz der Wechselwirkung der magnetischen Momente der Elektronen und des Atomkerns. In dieser Aufgabe betrachten wir nur Atome (oder Ionen) mit einem einzigen Elektron.

a) In radialsymmetrischen Zuständen $|n\ell m\rangle = |n00\rangle$ kann die Wechselwirkung als Zusatzterm

$$H_{\mathrm{HF}} = A_n \vec{S}\cdot\vec{I}$$

im Hamilton-Operator geschrieben werden. Hierbei ist $\vec{S}$ der Spinoperator des Elektrons und $\vec{I}$ der Spinoperator des Kerns. Der Spin des Kerns kann ganzzahlig oder halbzahlig sein (in Einheiten von $\hbar$). A_n ist eine (kleine) Konstante, die von n abhängt.

i) Der Gesamtspinoperator ist $\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$. Begründen Sie, warum es sinnvoll ist, die Basis der Gesamtspinzustände $|sifm\rangle$ als Ausgangspunkt für die Störungstheorie zu wählen.

ii) Berechnen Sie die Energieverschiebung der Gesamtspinzustände in Störungstheorie erster Ordnung für festes n.

b) Wir leiten nun die Form der Störung in a) her und schätzen deren Größe ab.

Das magnetische Moment des Kerns ist $\vec{M} = \frac{Zeg_N}{2M_N c}\vec{I}$. Hierbei ist Ze die Ladung des Kerns, g_N sein gyromagnetisches Verhältnis und M_N seine Masse. Das magnetische Feld eines punktförmigen Dipols ist durch $\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}_{\mathrm{Dipol}} = \frac{1}{4\pi}\left[-\vec{M}\nabla^2\frac{1}{r} + \vec{\nabla}(\vec{M}\cdot\vec{\nabla})\frac{1}{r}\right]$ gegeben.

Daher hat der Zusatzterm im Hamilton-Operator, der die Wechselwirkung beschreibt, die Form

$$H_{\mathrm{HF}} = -\vec{\mu}_{\mathrm{electron}} \cdot \vec{B} = \frac{e}{mc}\vec{S} \cdot \vec{B} = \frac{Ze^2 g_N}{2mM_N c^2}\frac{1}{4\pi}\vec{S} \cdot \left[-\vec{I}\nabla^2\frac{1}{r} + \vec{\nabla}(\vec{I} \cdot \vec{\nabla})\frac{1}{r}\right].$$

Wir haben dabei $g_{\mathrm{electron}} = 2$ angenommen.

i) Zeigen Sie für $\ell = 0$, dass $\langle(\vec{S} \cdot \vec{\nabla})(\vec{I} \cdot \vec{\nabla})\frac{1}{r}\rangle_{\ell=0} = \frac{1}{3}\langle\vec{S} \cdot \vec{I}\nabla^2\frac{1}{r}\rangle_{\ell=0}$ und damit

$$\langle H_{\mathrm{HF}}\rangle_{\ell=0} = -\frac{Ze^2 g_N}{3mM_N c^2}\frac{1}{4\pi}(\vec{S} \cdot \vec{I})\langle\nabla^2\frac{1}{r}\rangle_{\ell=0}\,,$$

wobei der Erwartungswert über den räumlichen Anteil der Wellenfunktion gebildet werden sollte. Den Spinanteil der Wellenfunktion haben wir noch nicht bestimmt.

ii) Benutzen Sie $\nabla^2\frac{1}{r} = -4\pi\delta^{(3)}(\vec{r})$, um zu zeigen, dass $\langle H_{\mathrm{HF}}\rangle_{\ell=0}$ proportional zu $|R_{n0}(0)|^2$ ist.

iii) Bestimmen Sie A_n und erklären Sie, warum es in der Tat sehr klein ist.
Hinweis: $|R_{n0}(0)|^2 = \frac{4}{n^3}\left(\frac{Z\alpha mc}{\hbar}\right)^3$.

3 Paramagnetische Resonanz

Wie in der Vorlesung diskutiert, ist die Zeitentwicklung eines Spinzustandes in einem konstanten magnetischen Feld durch

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = e^{i\gamma\vec{S}\cdot\vec{B}t/\hbar}|\psi(0)\rangle$$

gegeben. Diese Zeitentwicklung entspricht einer Rotation um einen Winkel $\vec{\theta}(t) = -\gamma\vec{B}t$, d.h. der Spin präzediert um die Richtung des magnetischen Feldes mit Kreisfrequenz $-\gamma|\vec{B}|$. Genauer gesagt ist das Objekt, das die Präzession vollzieht, der Vektor $\langle\vec{S}\rangle = (\langle S_x\rangle, \langle S_y\rangle, \langle S_z\rangle)$, der die Erwartungswerte der Komponenten des Spinoperators enthält. Das System wird durch die vereinfachte Pauli-Gleichung

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\gamma\vec{S} \cdot \vec{B}|\psi(t)\rangle$$

beschrieben. Wir betrachten nun ein zeitabhängiges Magnetfeld $\vec{B}(t)$ der Form

$$\vec{B}(t) = B_1\cos(\omega t)\hat{x} + B_0\hat{z}\,.$$

Zusätzlich zu einer dominanten, konstanten z-Komponente gibt es eine kleine, oszillierende x-Komponente (d.h. $B_1 \ll B_0$). Wir führen die Definitionen $\omega_0 = -\gamma B_0/2$ und $\omega_1 = -\gamma B_1/2$ ein. Für ein Elektron gilt $\gamma < 0$, so dass diese Frequenzen positiv sind.

a) Zeigen Sie, dass für $B_1 = 0$ der Spin (d.h. der Vektor $\langle\vec{S}\rangle$ der Erwartungswerte) in der Tat mit der Kreisfrequenz $2\omega_0$ um die z-Achse rotiert.

Hinweis: Benutzen Sie die explizite Form von $\vec{S} \cdot \vec{B}$ und das Ergebnis von Aufgabe 11.4e).

b) Man könnte nun raten, dass

$$|\psi(t)\rangle = e^{\int_0^t dt'\,\frac{i}{\hbar}\gamma\vec{S}\cdot\vec{B}(t')}|\psi(0)\rangle$$

eine Lösung der vereinfachten Pauli-Gleichung ist. Dies ist jedoch nicht korrekt. Warum nicht?

c) Um eine näherungsweise Lösung zu konstruieren, separieren wir zunächst die schnelle Rotation um die z-Achse ab und schreiben die Lösung als

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c(t) \\ d(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C(t)e^{-i\omega_0 t} \\ D(t)e^{i\omega_0 t} \end{pmatrix}.$$

Zeigen Sie, dass die Funktionen $C(t)$ und $D(t)$ die Gleichung

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = -i\omega_1 \cos(\omega t) \begin{pmatrix} De^{2i\omega_0 t} \\ Ce^{-2i\omega_0 t} \end{pmatrix}$$

erfüllen. Zeigen Sie weiterhin, dass wir für $\omega \approx 2\omega_0$

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \approx -\frac{i}{2}\omega_1 \begin{pmatrix} De^{i(2\omega_0-\omega)t} \\ Ce^{-i(2\omega_0-\omega)t} \end{pmatrix}$$

nähern können.

d) Lösen Sie die genäherte Version des Systems aus Differentialgleichungen. Eliminieren Sie zuerst $D(t)$ und zeigen Sie, dass $C(t)$ die Gleichung

$$\ddot{C} - i(2\omega_0 - \omega)\dot{C} + \frac{1}{4}\omega_1^2 C = 0$$

erfüllt. Benutzen Sie dann die Standardmethode zur Lösung homogener Differentialgleichungen zweiter Ordnung und bestimmen Sie $c(t)$ und $d(t)$.

e) Nehmen Sie als Anfangsbedingung an, dass der Spin in die positive z-Richtung zeigt, d.h. $c(0) = 1$ und $d(0) = 0$. Berechnen Sie die Integrationskonstanten von Teil d) und zeigen Sie, dass die Wahrscheinlichkeit $P_-(t)$, das System zur Zeit $t > 0$ mit Spin in der negativen z-Richtung zu finden, durch

$$P_-(t) = \left(\frac{\omega_1}{\Delta}\right)^2 \sin^2 \frac{\Delta t}{2}$$

gegeben ist, wobei $\Delta^2 = (\omega - 2\omega_0)^2 + \omega_1^2$.

f) Berechnen Sie das Maximum von $P_-(t)$ als Funktion von ω und zeichnen Sie $P_-^{\max}(\omega)$. Erklären Sie, wie man die Frequenz ω_0 (und damit den g-Faktor des Teilchens) experimentell bestimmen kann.