Quantentheorie für das Lehramt WS 19/20

Dr. L. Janssen

13. Übung (Besprechung: 27./29.01.20)

---

1. Leiteroperatoren des Drehimpulses

Benutzen Sie die Drehimpulsalgebra

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k, \qquad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_i] = 0, \tag{1}$$

mit $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_i)_{i=1,2,3} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$, um die folgenden Kommutatorrelationen der Leiteroperatoren $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$ zu zeigen:

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar\hat{J}_z, \qquad [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm, \qquad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_\pm] = 0. \tag{2}$$

2. Spin-1-Operator

Betrachten Sie einen Vektoroperator $\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_1, \hat{L}_2, \hat{L}_3)$ in einem dreidimensionalen Hilbert-Raum. Die Matrixelemente der drei Komponenten von $\hat{\mathbf{L}}$ bezüglich einer gegebenen Basis seien gegeben durch

$$(\hat{L}_i)_{jk} = -i\hbar\varepsilon_{ijk}, \qquad i, j, k \in \{1, 2, 3\}, \tag{3}$$

wobei ε_{ijk} der total antisymmetrische Tensor ist.

Hinweis: Jede Komponente wird also durch eine 3×3-Matrix dargestellt.

(a) Zeigen Sie, dass $\hat{\mathbf{L}}$ hermitesch ist und die Drehimpulsalgebra $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$ erfüllt.

(b) Zeigen Sie, dass das Quadrat des Drehimpulses durch $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hbar^2\ell(\ell+1)\mathbb{1}$ gegeben ist und bestimmen Sie die Drehimpulsquantenzahl ℓ.

(c) Betrachten Sie die Eigenwertgleichung $\hat{L}_3\vec{v}_m = \hbar m\vec{v}_m$. Wie lauten die Eigenwerte m? Bestimmen Sie die dazugehörigen orthonormierten Eigenvektoren $\vec{v}_m$.

3. Magnetresonanzspektroskopie

In der Spinresonanzspektroskopie wie etwa der NMR wird ein Spin einem äußeren Magnetfeld $\mathbf{B}$ ausgesetzt. Dabei besteht $\mathbf{B}$ aus einem konstanten Anteil in einer festen Richtung und einem oszillierenden Anteil in dazu senkrechter Richtung. Der Spin absorbiert die Energie des magnetischen Wechselfeldes nun in besonderer Weise, falls die Frequenz ω gerade der Zeeman-Aufspaltung der Energieniveaus entspricht. Die Messung dieser Resonanzfrequenzen erlaubt beispielsweise eine Strukturbestimmung von Molekülen in der organischen Chemie. In einem Kernspintomograph werden zusätzlich ortsabhängige Magnetfelder eingesetzt, so dass die resonanten magnetischen Momente auch räumlich zugeordnet werden können. Dies ermöglicht eine Darstellung von Gewebe und Organen des Körpers.

Betrachten Sie im Folgenden ein Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen im Magnetfeld $\mathbf{B}(t) = (B_x \cos\omega t, 0, B_z)$, beschrieben durch den explizit zeitabhängigen Hamilton-Operator

$$\hat{H} = g\mu_\mathrm{B}\mathbf{B}(t) \cdot \hat{\mathbf{S}}, \tag{4}$$

mit dem Landé-Faktor g, dem Bohr-Magneton $\mu_\mathrm{B} > 0$ und dem Spin-$\frac{1}{2}$-Operator $\hat{\mathbf{S}}$. Letzterer wird in der $\hat{S}_z$-Basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ durch 2×2-Pauli-Matrizen dargestellt,

$$\hat{\mathbf{S}} \mathrel{\widehat{=}} \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z). \tag{5}$$

Zur Zeit $t = 0$ sei der Spin im Zustand $|\downarrow\rangle$. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung von $\hat{S}_z$ zur Zeit $t > 0$ und für ω nahe der Resonanzfrequenz, den Spin im Zustand $|\uparrow\rangle$ anzutreffen. Gehen Sie dazu wie folgt vor:

(a) Der Zeitentwicklungsoperator genügt der Schrödinger-Gleichung $i\hbar\partial_t\hat{U}(t) = \hat{H}\hat{U}(t)$ als Operator-Differentialgleichung. Transformieren Sie $\hat{U}(t)$ zunächst in ein mit der Frequenz ω rotierendes Koordinatensystem,

$$\hat{U}(t) \mapsto \hat{\hat{U}}(t) = \hat{D}_z^{-1}(t)\hat{U}(t), \quad \text{mit} \quad \hat{D}_z(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}, \tag{6}$$

und zeigen Sie, dass die Schrödingergleichung für $\hat{\hat{U}}(t)$ in die Form

$$i\hbar\partial_t\hat{\hat{U}}(t) = \left\{\frac{\hbar}{2}\left((\omega_z - \omega)\sigma^z + \omega_x\sigma^x\right) + \mathcal{O}\left(\cos 2\omega t, \sin 2\omega t\right)\right\}\hat{\hat{U}}(t) \tag{7}$$

mit $\hbar\omega_z := g\mu_\mathrm{B}B_z$ und $\hbar\omega_x := \frac{1}{2}g\mu_\mathrm{B}B_x$ gebracht werden kann. (Das Symbol im zweiten Term der geschweiften Klammer repäsentiert weitere Terme proportional zu $\cos 2\omega t$ und $\sin 2\omega t$.)

Hinweis: $\hat{D}_z(t) = \mathbb{1}_2 \cos\frac{\omega t}{2} - i\sigma_z \sin\frac{\omega t}{2}$. (Wieso?)

(b) Nahe der Resonanz $\omega \approx \omega_z$ können in guter Näherung die mit 2ω oszillierende Terme in der Schrödingergleichung (7) vernachlässigt werden. Diese Näherung ist bekannt unter dem Namen "*rotating-wave approximation*". Zeigen Sie, dass die Lösung in dieser Näherung gegeben ist durch

$$\hat{\hat{U}}(t) = \exp\left[-\frac{i}{2}(\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma})t\right] = \mathbb{1}_2 \cos\frac{\Omega t}{2} - i\frac{\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{\Omega} \sin\frac{\Omega t}{2} \tag{8}$$

mit $\boldsymbol{\Omega} = (\omega_x, 0, \omega_z - \omega)$, $\Omega = |\boldsymbol{\Omega}|$ und dem Vektor $\boldsymbol{\sigma}$ aus Pauli-Matrizen. Berechnen Sie die zeitabhängige Übergangswahrscheinlichkeit $w(|\downarrow\rangle \to |\uparrow\rangle) \equiv |\langle\uparrow|\hat{U}(t)|\downarrow\rangle|^2$ in dieser Näherung und diskutieren Sie das Ergebnis.