Lösungen zur Quantentheorie 1, Sommersemester 2023

Dr. J. M. Link, Prof. Dr. C. Timm Blatt 9

Präsenzübungen

Aufgabe 1:

Es ist

$$H = h_0\,\mathbb{1} + h_x\sigma_x + h_y\sigma_y + h_z\sigma_z \equiv h_0\,\mathbb{1} + \vec{h}\cdot\vec{\sigma}. \tag{1}$$

Die Matrizen $\mathbb{1}$, σ_x, σ_y und σ_z sind linear unabhängig:

$$c_{\mathbb{1}}\mathbb{1} + c_x\sigma_x + c_y\sigma_y + c_z\sigma_z = 0 \quad \Leftrightarrow \quad c_{\mathbb{1}} = c_x = c_y = c_z = 0. \tag{2}$$

Der Hamilton-Operator muss hermitesch sein:

$$H^\dagger = H \tag{3}$$
$$\Leftrightarrow \quad h_0\,\mathbb{1} + h_x\sigma_x + h_y\sigma_y + h_z\sigma_z = h_0^*\,\mathbb{1} + h_x^*\sigma_x + h_y^*\sigma_y + h_z^*\sigma_z \tag{4}$$
$$\Leftrightarrow \quad (h_0 - h_0^*)\,\mathbb{1} + (h_x - h_x^*)\sigma_x + (h_y - h_y^*)\sigma_y + (h_z - h_z^*)\sigma_z = 0 \tag{5}$$
$$\Leftrightarrow \quad h_0 - h_0^* = h_x - h_x^* = h_y - h_y^* = h_z - h_z^* = 0. \tag{6}$$

Es folgt, dass h_0, h_x, h_y und h_z reell sein müssen.
Der Hamiltonian lässt sich schreiben als

$$H = \begin{pmatrix} h_0 + h_z & h_x - ih_y \\ h_x + ih_y & h_0 - h_z \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Die Eigenwerte sind

$$\lambda_1 = h_0 + \sqrt{h_x^2 + h_y^2 + h_z^2} = h_0 + |\vec{h}| \tag{8}$$

mit dem Eigenvektor

$$v_1 = \frac{1}{N_1}\begin{pmatrix} h_z + |\vec{h}| \\ h_x + ih_y \end{pmatrix}, \qquad N_1 = \sqrt{2}\,\sqrt{|\vec{h}|^2 + h_z\,|\vec{h}|}, \tag{9}$$

und

$$\lambda_2 = h_0 - \sqrt{h_x^2 + h_y^2 + h_z^2} = h_0 - |\vec{h}| \tag{10}$$

mit dem Eigenvektor

$$v_2 = \frac{1}{N_2}\begin{pmatrix} h_z - |\vec{h}| \\ h_x + ih_y \end{pmatrix}, \qquad N_2 = \sqrt{2}\,\sqrt{|\vec{h}|^2 - h_z\,|\vec{h}|}. \tag{11}$$

Diskussion: Der erste Term $h_0\mathbb{1}$ ergibt nur eine konstante Verschiebung der Eigenwerte. Die Differenz der Eigenwerte ist $2\sqrt{h_x^2 + h_y^2 + h_z^2} = 2\,|\vec{h}|$ und der Hamilton-Operator hat die Form eines Skalarprodukts des Spins (proportional zu $\vec{\sigma}$) mit $\vec{h}$. Der Hamilton-Operator beschreibt einen Spin im Magnetfeld proportional zu $\vec{h}$.

Bemerkung: Schreibt man has „Magnetfeld" $\vec{h}$ in Kugelkoordinaten,

$$\vec{h} = h\begin{pmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi \\ \cos\vartheta \end{pmatrix}, \tag{12}$$

so kann man die Eigenvektoren auch als Zustände auf der Bloch-Kugel, vgl. Aufg. 2, darstellen. Die normierten Eigenvektoren lauten

$$v_1 = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\vartheta}{2} \\ e^{i\varphi}\sin\dfrac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}, \qquad v_2 = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi}\sin\dfrac{\vartheta}{2} \\ -\cos\dfrac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}. \tag{13}$$

Beachte, dass die Eigenvektoren nur jeweils bis auf einen skalaren Phasenfaktor bestimmt sind.

Aufgabe 2:

Hinweis für die Tutor:innen: Die Lösung steht im Skript, Abschnitt 8.2.3. Offensichtlich soll die Aufgabe in der Übung selbständig gelöst werden.

Der Erwartungswert des Spin-Vektors in den Zuständen $|\vartheta,\varphi\rangle$ ist

$$\langle\hat{\vec{S}}\rangle = \langle\vartheta,\varphi|\hat{\vec{S}}|\vartheta,\varphi\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle\vartheta,\varphi| \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} |\vartheta,\varphi\rangle \tag{14}$$

mit den Komponenten

$$\begin{aligned}
\langle\hat{S}_x\rangle &= \frac{\hbar}{2}\Big(\cos\frac{\vartheta}{2}\langle\uparrow| + e^{-i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2}\langle\downarrow|\Big) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Big(\cos\frac{\vartheta}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2}|\downarrow\rangle\Big) \\
&= \frac{\hbar}{2}\Big(\cos\frac{\vartheta}{2}\,e^{i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2} + e^{-i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\vartheta}{2}\Big) \\
&= \hbar\cos\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\varphi = \frac{\hbar}{2}\sin\vartheta\cos\varphi, && (15) \\
\langle\hat{S}_y\rangle &= \frac{\hbar}{2}\Big(\cos\frac{\vartheta}{2}\langle\uparrow| + e^{-i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2}\langle\downarrow|\Big) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \Big(\cos\frac{\vartheta}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2}|\downarrow\rangle\Big) \\
&= \frac{\hbar}{2}\Big(-i\cos\frac{\vartheta}{2}\,e^{i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2} + ie^{-i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\vartheta}{2}\Big) \\
&= \hbar\cos\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\vartheta}{2}\sin\varphi = \frac{\hbar}{2}\sin\vartheta\sin\varphi, && (16) \\
\langle\hat{S}_z\rangle &= \frac{\hbar}{2}\Big(\cos\frac{\vartheta}{2}\langle\uparrow| + e^{-i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2}\langle\downarrow|\Big) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Big(\cos\frac{\vartheta}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2}|\downarrow\rangle\Big) \\
&= \frac{\hbar}{2}\Big(\cos^2\frac{\vartheta}{2} - \sin^2\frac{\vartheta}{2}\Big) = \frac{\hbar}{2}\cos\vartheta. && (17)
\end{aligned}$$

Also erhalten wir

$$\langle\hat{\vec{S}}\rangle = \frac{\hbar}{2}\,\hat{n}. \tag{18}$$

Der Zustand $|\vartheta,\varphi\rangle$ beschreibt daher einen in der Richtung von $\hat{n}$ ausgerichteten Spin. Diese Parametrisierung der Spin-Zustände, die offensichtlich die Einheitskugel in den Spin-Hilbert-Raum abbildet, nennt man *Bloch-Kugel*.

Hausaufgaben

Aufgabe 3:

(a) Die Matrix des Operators J_z ist

$$J_z = \hbar \begin{pmatrix} j & & & & & \\ & j-1 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & m & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & -j \end{pmatrix} \tag{19}$$

und die Matrix des Drehoperators ist

$$\hat{D}_{2\pi}(\hat{z}) = \begin{pmatrix} e^{-2\pi i j} & & & & & \\ & e^{2\pi i(-j+1)} & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & e^{-2\pi i m} & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & e^{2\pi i j} \end{pmatrix}. \tag{20}$$

Wenn j (und m) ganzzahlig ist, gilt $e^{-2\pi i m} = 1$ und daher $\hat{D}_{2\pi}(\hat{z}) = \mathbb{1}$. Wenn j (und m) halbzahlig ist, gilt $e^{-2\pi i m} = -1$ und daher $\hat{D}_{2\pi}(\hat{z}) = -\mathbb{1}$. Aufgrund der Isotropie des Raumes gilt dasselbe für jede Richtung $\hat{n}$.

(b) Es ist

$$\hat{T}^2 = \hat{D}_\pi(\hat{y})\hat{K}\hat{D}_\pi(\hat{y})\hat{K} = \exp\left(-\frac{i\pi}{\hbar}\,\hat{J}_y\right)\,\exp\left(+\frac{i\pi}{\hbar}\,\hat{J}_y^*\right). \tag{21}$$

Nun ist in der Standardbasis $\hat{J}_y^* = -\hat{J}_y$ ($\hat{J}_y$ imaginär). Es folgt

$$\hat{T}^2 = \exp\left(-\frac{i\pi}{\hbar}\,\hat{J}_y\right)\,\exp\left(-\frac{i\pi}{\hbar}\,\hat{J}_y\right) = \exp\left(-\frac{2\pi i}{\hbar}\,\hat{J}_y\right) = \hat{D}_{2\pi}(\hat{y}) \overset{\text{(a)}}{=} \pm\mathbb{1} \tag{22}$$

für ganzzahligen/halbzahligen Drehimpuls.

Aufgabe 4:

Es gilt

$$\hat{D}_\alpha(\hat{n}) = \cos\frac{\alpha}{2}\mathbb{1} - i\sin\frac{\alpha}{2}\vec{\sigma}\cdot\hat{n}, \tag{23}$$

also insbesondere

$$\hat{D}_\pi(\hat{x}) = -i\sigma_x, \tag{24}$$

$$\hat{D}_\pi(\hat{y}) = -i\sigma_y. \tag{25}$$

Es folgt

$$
\begin{aligned}
\hat{D}_\pi(\hat{x})\hat{D}_\pi(\hat{y}) &= -\sigma_x\sigma_y = -i\sigma_z = \hat{D}_\pi(\hat{z}), && (26)\\
\hat{D}_\pi(\hat{x})^2 &= -\sigma_x^2 = -\mathbb{1}, && (27)\\
\hat{D}_\pi(\hat{y})^2 &= -\sigma_y^2 = -\mathbb{1}, && (28)\\
\hat{D}_\pi(\hat{z})^2 &= -\sigma_z^2 = -\mathbb{1}, && (29)\\
\hat{D}_\pi(\hat{x})^3 &= -(-i\sigma_x) = i\sigma_x = -\hat{D}_\pi(\hat{x}), && (30)\\
\hat{D}_\pi(\hat{y})^3 &= -(-i\sigma_y) = i\sigma_y = -\hat{D}_\pi(\hat{y}), && (31)\\
\hat{D}_\pi(\hat{z})^3 &= -(-i\sigma_z) = i\sigma_z = -\hat{D}_\pi(\hat{z}), && (32)\\
\hat{D}_\pi(\hat{x})^4 &= \hat{D}_\pi(\hat{y})^4 = \hat{D}_\pi(\hat{z})^4 = +\mathbb{1}. && (33)
\end{aligned}
$$

Weitere Operatoren lassen sich nicht erzeugen. Es folgt

$$
\mathcal{G} = \{\mathbb{1}, \hat{D}_\pi(\hat{x}), \hat{D}_\pi(\hat{y}), \hat{D}_\pi(\hat{z}), -\mathbb{1}, -\hat{D}_\pi(\hat{x}), -\hat{D}_\pi(\hat{y}), -\hat{D}_\pi(\hat{z})\}. \tag{34}
$$

Dies ist die „Doppelgruppe der Punktgruppe D_2“.

Aufgabe 5:

(a) Es gilt

$$
\begin{aligned}
&\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{j}}_1 + \hat{\vec{j}}_2 && (35)\\
\Rightarrow\quad &\hat{\vec{J}}^2 = (\hat{\vec{j}}_1 + \hat{\vec{j}}_2)^2 = \hat{\vec{j}}_1^2 + \hat{\vec{j}}_2^2 + 2\hat{\vec{j}}_1 \cdot \hat{\vec{j}}_2 && (36)\\
\Rightarrow\quad &\hat{\vec{j}}_1 \cdot \hat{\vec{j}}_2 = \frac{\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{j}}_1^2 - \hat{\vec{j}}_2^2}{2}. && (37)
\end{aligned}
$$

Die Eigenwerte sind also

$$
\hbar^2\,\frac{J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)}{2}. \tag{38}
$$

(b) Es ist

$$
\hat{H} = -\eta\,\hat{\vec{j}}_1 \cdot \hat{\vec{j}}_2 - B(\hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}) = -\frac{\eta}{2}\,(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{j}}_1^2 - \hat{\vec{j}}_2^2) - B\hat{J}_z. \tag{39}
$$

Die Eigenwerte sind also

$$
E_{JM} = -\frac{\hbar^2\eta}{2}\,[J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)] - \hbar BM. \tag{40}
$$

(c) $j_1 = j_2 = 1/2$ erlaubt $(J,M) = (0,0)$ (Singulett) und $(J,M) = (1,1)$, $(1,0)$, $(1,-1)$ (Triplett). Wir lassen eine irrelevante Konstante in E_{JM} weg und schreiben

$$
E_{JM} = -\frac{\hbar^2\eta}{2}\,J(J+1) - \hbar BM, \tag{41}
$$

also

$$
\begin{aligned}
E_{0,0} &= 0, && (42)\\
E_{1,1} &= \underbrace{-\hbar^2\eta}_{>0} - \hbar B, && (43)\\
E_{1,0} &= -\hbar^2\eta, && (44)\\
E_{1,-1} &= -\hbar^2\eta + \hbar B. && (45)
\end{aligned}
$$

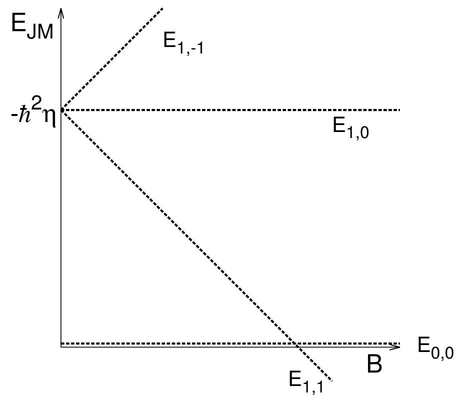

Abbildung 1: Eigenenergien E_{JM} als Funktionen von B.

Die Eigenenergien $E_{0,0}$ und $E_{1,1}$ schneiden sich für $B > 0$, siehe Abb. 1. Der Wert von B am Schnittpunkt bestimmt sich aus

$$E_{0,0} = E_{1,1} \quad \Leftrightarrow \quad -\hbar^2\eta - \hbar B = 0 \quad \Leftrightarrow \quad B = -\hbar\eta > 0. \tag{46}$$

Für $B < -\hbar\eta$ ($B > -\hbar\eta$) ist der Grundzustand das Singulett $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}, 00\rangle$ (der Triplett-Zustand $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}, 11\rangle$). B stellt ein Magnetfeld in z-Richtung dar. Für hinreichend großes B ist der Energiegewinn durch Ausrichtung des Spins (und des magnetischen Moments) parallel zum Magnetfeld größer als die Austauschwechselwirkung η. Dann bricht das Feld das Singulett auf.