Universität des Saarlandes
Fachrichtung 7.1 – Theoretische Physik
Prof. Dr. H. G. Schuster

Saarbrücken, 04.06.2010

**Musterlösung**
**(Theoretische Physik III Quantenmechanik)**
**SS 2010, Blatt 6**

Aufgabe 12 (2+2 Punkte)

**a)**
Der Hamilton Operator für ein Wasserstoffatom im Magnetfeld kann in Coulomb Eichung $\underline{\nabla} \cdot \underline{A}(\underline{r}) = 0$ geschrieben werden als:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}\left(\hat{\underline{p}} + \frac{e}{c}\underline{A}(\hat{\underline{r}})\right)^2 - \frac{e^2}{r} \tag{1}$$

Dabei gilt für das Vektorpotential $\underline{A}(\hat{\underline{r}}) = \frac{1}{2}(\underline{B} \times \hat{\underline{r}})$.
Es gilt die Wirkung des Operator $\left(\hat{\underline{p}} + \frac{e}{c}\underline{A}(\hat{\underline{r}})\right)^2$ auf eine Testfunktion $f(\hat{r})$ zu berechnen, wozu wir in die Ortsdarstellung wechseln:

$$\left(\hat{\underline{p}} + \frac{e}{c}\underline{A}(\hat{\underline{r}})\right)\left(\hat{\underline{p}} + \frac{e}{c}\underline{A}(\hat{\underline{r}})\right) f(\hat{\underline{r}}) \tag{2}$$

$$= \left[-\hbar^2\underline{\nabla}^2 + \frac{e}{c}\frac{\hbar}{i}\left(\underline{\nabla} \cdot \underline{A}(\underline{r}) + \underline{A}(\underline{r} \cdot \underline{\nabla})\right) + \frac{e^2}{c^2}\underline{A}^2(\underline{r})\right] f(\underline{r}) \tag{3}$$

$$= -\hbar^2\underline{\nabla}^2 f(\underline{r}) + \frac{e}{c}\frac{\hbar}{i}\left[(\underline{\nabla} \cdot \underline{A}(\underline{r})) + (\underline{\nabla} \cdot f(\underline{r}))\,\underline{A}(\underline{r}) + \underline{A}(\underline{r})\,(\underline{\nabla} \cdot f(\underline{r}))\right] + \frac{e^2}{c^2}\underline{A}^2(\underline{r}) f(\underline{r}) \tag{4}$$

mit der Coulombeichung folgt: (5)

$$= -\hbar^2\underline{\nabla}^2 f(\underline{r}) + \frac{e}{c}\frac{\hbar}{i}2\underline{A}(\underline{r})(\underline{\nabla} \cdot f(\underline{r})) + \frac{e^2}{c^2}\underline{A}^2(\underline{r}) f(\underline{r}) \tag{6}$$

$$= \left(\hat{\underline{p}}^2 + 2\frac{e}{c}\underline{A}(\hat{\underline{r}})\hat{\underline{p}} + O(\underline{B}^2)\right) f(\hat{\underline{r}}) \tag{7}$$

Mit $\underline{A}(\hat{\underline{r}}) = \frac{1}{2}(\underline{B} \times \hat{\underline{r}})$ kann nun der Hamilton Operator in linearer Ordnung angegeben werden als:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}\left(\hat{\underline{p}}^2 + \frac{e}{c}(\underline{B} \times \hat{\underline{r}})\hat{\underline{p}}\right) - \frac{e^2}{r} \tag{8}$$

$$= \frac{1}{2m_e}\left(\hat{\underline{p}}^2 + \frac{e}{c}\underline{B}(\hat{\underline{r}} \times \hat{\underline{p}})\right) - \frac{e^2}{r} \tag{9}$$

$$= \frac{1}{2m_e}\left(\hat{\underline{p}}^2 + \frac{e}{c}\underline{B} \cdot \hat{\underline{L}}\right) - \frac{e^2}{r} \tag{10}$$

Wählt man $\underline{B} = (0, 0, B_z)$ erhält man

$$\hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} + \frac{eB_z}{2m_e}\hat{L}_z \tag{11}$$

**b)**
$|nlm\rangle$ ist Eigenzustand von $\hat{H}_0$, wobei $n, l, m$ die Quantenzahlen des Wasserstoffatoms darstellen. Es ergibt sich folgende Eigenwertgleichung:

$$\hat{H}_0 |n,l,m\rangle = E_n |n,l,m\rangle\,, \qquad \text{mit } E_n = -\frac{m_e e^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1,2,3,... \tag{12}$$

Da $\hat{H}_0, \hat{H}_1$ hermitesch sind und sie miteinander vertauschen $[\hat{H}_0, \hat{H}_1] = 0$ haben sie gemeinsame Eigenzustände. (siehe Vorlesung (4.92),(4.94)).

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{H}_1\right) |n,l,m\rangle = \left(E_n + \frac{eB_z}{2m_e} m\hbar\right) |n,l,m\rangle \tag{13}$$

wobei im letzten Schritt die Eigenwertgleichung $\hat{L}_z |m\rangle = m\hbar |m\rangle$ ausgenutzt wurde. Führt man das Bohrsche Magneton ein $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ ergibt sich für (13):

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{H}_1\right) |n,l,m\rangle = \left(E_n + \mu_B B_z m\right) |n,l,m\rangle \tag{14}$$

Aufgabe 13 (5 Punkte)

Ein Elektron im Magnetfeld $\underline{B}$ wird durch den Spin-Hamilton Operator beschrieben:

$$\hat{H} = 2\frac{\mu_B}{\hbar} \underline{B} \cdot \underline{\hat{S}} = 2\frac{\mu_B}{\hbar} \left(B_1 \cdot \hat{S}_1 + B_2 \cdot \hat{S}_2 + B_3 \cdot \hat{S}_3\right) \tag{15}$$

Um die Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes $\left\langle \hat{S} \right\rangle (t)$ zu berechnen, muss die Heisenberggleichung gelöst werden:

$$\frac{d}{dt}\underline{\hat{S}}(t) = -\frac{i}{\hbar}[\underline{\hat{S}}, \hat{H}] \tag{16}$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\frac{2\mu_B}{\hbar} \begin{pmatrix} B_2\hat{S}_1\hat{S}_2 + B_3\hat{S}_1\hat{S}_3 - B_3\hat{S}_3\hat{S}_1 - B_2\hat{S}_2\hat{S}_1 \\ B_1\hat{S}_2\hat{S}_1 + B_3\hat{S}_2\hat{S}_3 - B_3\hat{S}_3\hat{S}_2 - B_1\hat{S}_1\hat{S}_2 \\ B_1\hat{S}_3\hat{S}_1 + B_2\hat{S}_3\hat{S}_2 - B_2\hat{S}_2\hat{S}_3 - B_1\hat{S}_1\hat{S}_3 \end{pmatrix} \tag{17}$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\frac{2\mu_B}{\hbar} \begin{pmatrix} B_1[\hat{S}_1, \hat{S}_2] - B_3[\hat{S}_3, \hat{S}_1] \\ B_1[\hat{S}_2, \hat{S}_1] - B_3[\hat{S}_3, \hat{S}_2] \\ B_1[\hat{S}_3, \hat{S}_1] - B_2[\hat{S}_2, \hat{S}_3] \end{pmatrix} \tag{18}$$

mit $[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk}\hat{S}_k$ und dem Levi-Civita Tensor

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 \text{ wenn gerade Permutation von } 1,2,3 \\ -1 \text{ wenn ungerade Permutation von } 1,2,3 \\ 0 \text{ wenn gleiche Indizes} \end{cases}$$

folgt:

$$[\hat{S}_1, \hat{S}_2] = i\hbar\hat{S}_3, \qquad [\hat{S}_3, \hat{S}_1] = -i\hbar\hat{S}_2 \tag{19}$$

$$[\hat{S}_2, \hat{S}_1] = -i\hbar\hat{S}_3, \qquad [\hat{S}_3, \hat{S}_2] = -i\hbar\hat{S}_1 \tag{20}$$

$$[\hat{S}_2, \hat{S}_3] = i\hbar\hat{S}_1 \tag{21}$$

Damit folgt für die Heisenberggleichung:

$$\frac{d}{dt}\underline{\hat{S}}(t) = \frac{2\mu_B}{\hbar}\begin{pmatrix} B_2\hat{S}_3 - B_3\hat{S}_2 \\ B_3\hat{S}_1 - B_1\hat{S}_3 \\ B_1\hat{S}_2 - B_2\hat{S}_1 \end{pmatrix} = \frac{2\mu_B}{\hbar}(\underline{B} \times \underline{\hat{S}}) \tag{22}$$

$$= -\frac{2\mu_B}{\hbar}(\underline{\hat{S}} \times \underline{B}) \tag{23}$$

Somit gilt für die zeitliche Ableitung des Erwartungswertes:

$$\frac{d}{dt}\left\langle \underline{\hat{S}} \right\rangle (t) = -\frac{2\mu_B}{\hbar}\left\langle \underline{\hat{S}} \right\rangle \times \underline{B} \tag{24}$$

Wählt man $B = (0, 0, B_3)$ folgt aus der Berechnung des Kreuzproduktes für die Komponenten von $\underline{\hat{S}}$:

$$\frac{d}{dt}\left\langle \hat{S}_1 \right\rangle (t) = -\frac{2\mu_B}{\hbar}\left\langle \hat{S}_2 \right\rangle B_3 \tag{25}$$

$$\frac{d}{dt}\left\langle \hat{S}_2 \right\rangle (t) = -\frac{2\mu_B}{\hbar}\left\langle \hat{S}_1 \right\rangle B_3 \tag{26}$$

$$\frac{d}{dt}\left\langle \hat{S}_3 \right\rangle (t) = 0 \tag{27}$$

Aus den gekoppelten Dgls (25,26) 1.Ordnung erlangt man durch erneutes Ableiten nach der Zeit und ineinander einsetzen zwei entkoppelte Dgls 2. Ordnung:

$$\frac{d^2}{dt^2}\left\langle \hat{S}_i \right\rangle (t) = -\left(\frac{2\mu_B}{\hbar}B_3\right)^2 \left\langle \hat{S}_i \right\rangle, \qquad \text{für } i = 1, 2 \tag{28}$$

$$\text{mit der Lamorfrequenz } \omega_L = \frac{\mu_B}{\hbar}B_3 \tag{29}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2}{dt^2}\left\langle \hat{S}_i \right\rangle (t) + (2\omega_L)^2 \left\langle \hat{S}_i \right\rangle (t) = 0 \tag{30}$$