
Übungsklausur: Musterlösung

Aufgabe 1:

Beweisen Sie lediglich mit Hilfe der allgemeinen Drehimpulseigenschaften, also ohne die expliziten Matrixdarstellungen der Spinoperatoren für einen Spin $S = \frac{1}{2}$ die folgenden Relationen:

a) $S_xS_y + S_yS_x = 0$;

Lösung:
Es gilt $S_+|\frac{1}{2}\rangle = S_-|-\frac{1}{2}\rangle = 0$ und damit $(S_\pm)^2 = 0$. Mit $S_\pm = S_x \pm iS_y$ folgt daraus:

$$\begin{aligned} 0 &= S_+^2 = S_x^2 + i(S_xS_y + S_yS_x) + S_y^2 \\ 0 &= S_-^2 = S_x^2 - i(S_xS_y + S_yS_x) + S_y^2 \Rightarrow \\ 0 &= 2i(S_xS_y + S_yS_x) \Leftrightarrow (S_xS_y + S_yS_x) = 0 \quad \text{q.e.d.} \quad \blacksquare \end{aligned}$$

b) $S_xS_y = i\frac{\hbar}{2}S_z$;

Lösung:

$$S_xS_y + S_yS_x = 0 \Rightarrow S_xS_y = -S_yS_x;$$

$$[S_x, S_y] = 2S_xS_y = i\hbar S_z \Rightarrow S_xS_y = i\frac{\hbar}{2}S_z \quad \text{q.e.d.} \quad \blacksquare$$

Hinweis: Benutzen Sie die Eigenschaften $\langle S_+|\frac{1}{2}\rangle = S_-|-\frac{1}{2}\rangle = 0$ sowie $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$.

Aufgabe 2:
Betrachten Sie ein Teilchen mit Spin 1/2 in einem konstanten homogenen Magnetfeld $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Beschränken Sie sich auf die Diskussion des Spinfreiheitsgrades, d.h. die Abhängigkeit der Wellenfunktion vom Ort wird nicht betrachtet.

a) Wie lautet die Schrödingergeichung?

Lösung:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = g_s\frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{B}\cdot\mathbf{S}|\psi\rangle \Leftrightarrow i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = g_s\frac{\mu_B}{\hbar}BS_z|\psi\rangle \quad \blacksquare$$

b) Bestimmen Sie die Lösungen der Bewegungsgleichungen für die Amplituden c_+ und c_- des Zustandes

$$|\psi(t)\rangle = c_+(t)|\frac{1}{2}\rangle + c_-(t)| - \frac{1}{2}\rangle$$

Hinweis: Benutzen Sie dazu die Matrix-Darstellung des Spinoperators S_z sowie den Ausdruck für die Lamorfrequenz $\omega_L = \frac{g_S\mu_B}{2\hbar}B$.

Lösung:

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \Rightarrow$$

Bewegungsgleichungen:

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{c}_+(t) &= g_s\frac{\mu_B}{2}Bc_+(t),\\
i\hbar\dot{c}_-(t) &= -g_s\frac{\mu_B}{2}Bc_-(t).
\end{aligned}$$

Lösungen:

$$c_\pm(t) = e^{\mp i\frac{\mu_B g_s B}{2\hbar}t}c_\pm(0) = e^{\mp i\omega_L t}c_\pm(0) \quad \blacksquare$$

c) Bestimmen Sie nun die Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes der Spinkomponenten S_x, S_y, S_z für $\psi(0) = (a,b)^T, \quad a,b\in\mathbb{R}$.

Lösung:

$$\begin{aligned}
\langle S_i(t)\rangle &= |c_+|^2\langle\frac{1}{2}|S_i|\frac{1}{2}\rangle + c_+^*c_-\langle\frac{1}{2}|S_i| - \frac{1}{2}\rangle + c_-^*c_+\langle-\frac{1}{2}|S_i|\frac{1}{2}\rangle + |c_-|^2\langle-\frac{1}{2}|S_i| - \frac{1}{2}\rangle \Rightarrow\\
\langle S_z(t)\rangle &= |c_+|^2\frac{\hbar}{2} + 0 + 0 - |c_-|^2\frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar}{2}(|c_+|^2 - |c_-|^2);\\
\langle S_x(t)\rangle &= 0 + \frac{\hbar}{2}c_-^*c_+ + \frac{\hbar}{2}c_+^*c_- + 0 = \frac{\hbar}{2}(c_-^*c_+ + c_+^*c_-) = \frac{\hbar}{2}ab(e^{2i\omega_L t} + e^{-2i\omega_L t}) = \hbar ab\cos(2\omega_L t);\\
\langle S_y(t)\rangle &= 0 - \frac{i\hbar}{2}c_+^*c_- + \frac{i\hbar}{2}c_-^*c_+ = \frac{i\hbar}{2}(-c_+^*c_- + c_-^*c_+) = \frac{i\hbar}{2}ab(-e^{2i\omega_L t} + e^{2i\omega_L t}) = \hbar ab\sin(2\omega_L t)
\end{aligned}$$

$\blacksquare$

d) Kommentieren Sie das Ergebniss.

Lösung: Der Erwartungswert des Spins führt also eine Präzessionsbewegung um die Achse des Magnetfeldes mit der Frequenz $2\omega_L$ aus. ■

Aufgabe 3:

Betrachten Sie das Wasserstoffatom in einem konstanten Magnetfeld $\mathbf{B}$.

a) Wie lautet die Pauli-Gleichung für das Elektron?

Lösung: Hamilton-Opearator für das Elektron im konstanten Magnetfeld

$$H = H_0 + \frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{B}\cdot\mathbf{L} + g_s\frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{B}\cdot\mathbf{S},$$

wobei $\mathbf{S}$ der Spin-Operator ist.

Pauli-Gleichung für das Elektron:

$$i\hbar\partial_t\psi_\pm = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{B}(\mathbf{L} + g_s\mathbf{S})\right)\psi_\pm \quad ■$$

b) Bestimmen Sie die Eigenfunktionen und die Energieeigenwerte in Abhängigheit des Magnetfeldes $\mathbf{B} = Be_z$?

Lösung:

$$\mathbf{B} = Be_z \Rightarrow H = H_0 + \frac{\mu_B}{\hbar}B(L_z + g_sS_z)$$

Die Wellenfunktion des Elektrons:

$$\psi_{nlm\pm} = R_{nl}Y_l^m\chi_\pm.$$

Die Wellenfunktion des Elektirons im H-Atom wird um den Spinanteil χ ergänzt, die nur zwei Werte annimmt. Die Energien sind:

$$E_{nlm\pm} = E_{nl}^0 + \mu_BB(m \pm 1).$$

Da $|m| \leq l$, die Energiespaltung für $l = 0$ findet nur wegen der Existenz des Spins statt. ■

c) Skizzieren Sie schematisch das Energieniveau-Schema und die Energieaufspaltung für s und p Orbitale.

Lösung: sieh Fig.1

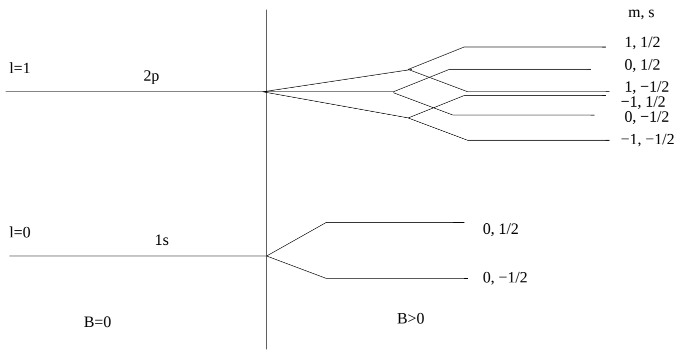

Abbildung 1:

Aufgabe 4:

Benutzen Sie das Ritzsche Variationsverfahren zur Abschätzung der Grundzustandsenergie des linearen harmonischen Oszillators unter Verwendung der Versuchsfunktionenschar ($\boldsymbol{\alpha}$-Variationsparameter)

$$\{\boldsymbol{\varphi}(x,\boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{\boldsymbol{\alpha}^2 + x^2}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad \boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^+\}.$$

Hinweis: Verwenden Sie die Formeln

$$\int_0^\infty \frac{dx}{(\boldsymbol{\alpha}^2 + x^2)^2} = \frac{\pi}{4\boldsymbol{\alpha}^3}; \qquad \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{(\boldsymbol{\alpha}^2 + x^2)^2} = \frac{\pi}{4\boldsymbol{\alpha}},$$
$$\int_0^\infty \frac{dx}{(\boldsymbol{\alpha}^2 + x^2)^3} = \frac{3\pi}{16\boldsymbol{\alpha}^5}; \qquad \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{(\boldsymbol{\alpha}^2 + x^2)^4} = \frac{\pi}{32\boldsymbol{\alpha}^5}.$$

Lösung:

$$\boldsymbol{\varphi}(x,\boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{x^2 + \boldsymbol{\alpha}^2} \Rightarrow \boldsymbol{\varphi}_{xx} = -\frac{2}{(x^2 + \boldsymbol{\alpha}^2)^2} + \frac{8x^2}{(x^2 + \boldsymbol{\alpha}^2)^3};$$

$$\langle\boldsymbol{\varphi}|H|\boldsymbol{\varphi}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Big(\boldsymbol{\varphi}^*(x,\boldsymbol{\alpha})\big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\big)\boldsymbol{\varphi}(x,\boldsymbol{\alpha})\Big) =$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Big(\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{(x^2 + \boldsymbol{\alpha}^2)^3} - \frac{4\hbar^2}{m}\frac{x^2}{(x^2 + \boldsymbol{\alpha}^2)^4} + \frac{m\omega^2}{2}\frac{x^2}{(x^2 + \boldsymbol{\alpha}^2)^2}\Big) =$$
$$= \frac{2\hbar^2}{m}\frac{3\pi}{16\boldsymbol{\alpha}^5} - \frac{\hbar^2\pi}{8m\boldsymbol{\alpha}^5} + m\omega^2\frac{\pi}{4\boldsymbol{\alpha}} = \frac{\hbar^2\pi}{8m\boldsymbol{\alpha}^5} + m\omega^2\frac{\pi}{4\boldsymbol{\alpha}};$$

$$\langle \boldsymbol{\varphi} | \boldsymbol{\varphi} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{(x^2 + \boldsymbol{\alpha}^2)^2} = \frac{\pi}{2\boldsymbol{\alpha}^3};$$

Damit lautet das Energiefunktional:

$$\langle H \rangle_{\boldsymbol{\varphi}} = \frac{\hbar^2}{4m\boldsymbol{\alpha}^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \boldsymbol{\alpha}^2$$

Extremalbedingung:

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \langle H \rangle_{\boldsymbol{\varphi}} = 0 \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m\boldsymbol{\alpha}^3} + m\omega^2 \boldsymbol{\alpha} = 0 \Leftrightarrow (\boldsymbol{\alpha}^*)^4 = \frac{\hbar^2}{2m^2\omega^2};$$

Also,

$$\langle H \rangle_{\boldsymbol{\varphi}^*} = \frac{\hbar^2}{4m} \frac{\sqrt{2} m\omega}{\hbar} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{\sqrt{2} m\omega} = \frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{4} + \frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{4} = \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar\omega > E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad \blacksquare$$