UNIVERSITÄT STUTTGART – II. INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
Prof. Dr. U. Seifert
Dr. E. Reister-Gottfried (Zimmer 3.150)

Übungen: Theoretische Physik II — Quantenmechanik I

Aufgabe 11: Spin-1-Teilchen im konstanten Magnetfeld

Wir betrachten ein Spin-1-Teilchen (z.B. den Kernspin von $^{14}_{7}\mathrm{N}$) in einem konstanten Magnetfeld in z-Richtung $\mathbf{B} = B_z \mathbf{e}_z$. Der Hamiltonoperator ist

$$H = -\gamma \, \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}, \tag{1}$$

wobei $\mathbf{S} = \hbar \boldsymbol{\Sigma}$ (mit $\boldsymbol{\Sigma}$ von Blatt 3) und γ eine Proportionalitätskonstante ist.

a) Geben Sie die Lösung $|\psi(t)\rangle$ der Schrödingergleichung für das System an. Für die folgenden Rechnungen sei das System zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ im Zustand $|x+\rangle$ präpariert. Berechnen Sie die zeitabhängigen Wahrscheinlichkeiten, (i) für eine Σ_z Messung die Werte $+1, 0, -1$; (ii) für eine Σ_x Messung die Werte $+1, 0, -1$ zu erhalten. (2 Punkte)

b) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle \Sigma_x \rangle_{\psi(t)}$, $\langle \Sigma_y \rangle_{\psi(t)}$ und $\langle \Sigma_z \rangle_{\psi(t)}$. Zeigen Sie, dass für die Erwartungswerte die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \langle \boldsymbol{\Sigma} \rangle = \gamma \langle \boldsymbol{\Sigma} \rangle \times \mathbf{B} \tag{2}$$

gilt. Ist Ihnen aus der klassischen Mechanik eine ähnliche Gleichung bekannt? (2 Punkte)

c) Nun sei $\mathbf{B} = B_x \mathbf{e}_x + B_y \mathbf{e}_y + B_z \mathbf{e}_z$ und es soll weiterhin Gl. (2) gelten. Zeigen Sie direkt mit Gl. (2) die Gültigkeit des Ehrenfest-Theorems

$$\frac{d}{dt} \langle \boldsymbol{\Sigma} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \boldsymbol{\Sigma}] \rangle . \tag{3}$$

Welches Analogon hat diese Gleichung in der klassischen Mechanik? (2 Punkte)

Aufgabe 12: Das Ethen-Molekül

Wir betrachten ein π-Elektron zwischen zwei C-Atomen. $|\phi_0\rangle$, $|\phi_1\rangle$ sind die Zustände, in denen das Elektron an dem einen bzw. an dem anderen C-Atom lokalisiert ist. Der Zustandsraum ist zweidimensional. Die Basis $\{|\phi\rangle\}$ sei $|\phi_0\rangle = \{1, 0\}$, $|\phi_1\rangle = \{0, 1\}$. Der Hamiltonoperator sei gegeben durch die Wirkung auf die Zustände $\{|\phi\rangle\}$

$$H|\phi_0\rangle = E_0|\phi_0\rangle - A|\phi_1\rangle \tag{4}$$

$$H|\phi_1\rangle = E_0|\phi_1\rangle - A|\phi_0\rangle, \tag{5}$$

wobei E_0, $A \in \mathbb{R}$ und $A > 0$. Welche Bedeutung hat dabei die Größe A? Berechnen Sie das Energiespektrum und die Eigenzustände. Verteilen Sie nun zwei Elektronen auf die Energieniveaus. Nach dem Pauliprinzip darf jedes Niveau nur zweimal besetzt werden. Geben Sie die Gesamtenergie an. (2 Punkte)

Aufgabe 13: Das Benzol-Molekül

In dieser Aufgabe sollen die Energien und die Zustände eines π-Elektrons des Benzolrings untersucht werden. Die sechs C-Atome im Benzol bilden einen geschlossenen Ring. $|\phi_n\rangle$ mit $n = 0, ..., 5$ sind die Zustände, in denen das Elektron am n-ten C-Atom lokalisiert ist. Der Zustandsraum ist sechsdimensional. Die Basis $\{|\phi\rangle\}$ sei $|\phi_0\rangle = \{1,0,0,0,0,0\}$, $|\phi_1\rangle = \{0,1,0,0,0,0\}, ..$ usw.

a) Erklären Sie, warum und unter welchen Voraussetzungen der Hamiltonoperator für das Elektron in der Basis $\{|\phi\rangle\}$ die Form

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A & 0 & 0 & 0 & -A \\ -A & E_0 & -A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A & E_0 & -A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -A & E_0 & -A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -A & E_0 & -A \\ -A & 0 & 0 & 0 & -A & E_0 \end{pmatrix}$$

annimmt, wobei E_0, $A \in \mathbb{R}$ und $A > 0$. (1 Punkt)

b) Da alle C-Atome identisch sind, ist das System invariant unter dem unitären Symmetrieoperator

$$R|\phi_n\rangle = |\phi_{n-1}\rangle.$$

Geben Sie die Matrixdarstellung von R an und zeigen Sie dass,

$$[H, R] = 0.$$

Damit haben H und R eine gemeinsame Basis von Eigenvektoren $\{|\chi\rangle\}$. Drücken Sie H durch $\mathbb{1}$, R, $R^\dagger$ aus und geben Sie damit einen Zusammenhang der Eigenwerte von R und H an.

Überlegen Sie sich was R^6 ist und zeigen Sie, dass die Eigenwerte von R

$$e^{i\delta_s} \quad \text{mit} \quad \delta_s = \frac{\pi s}{3}, \qquad s = 0, ..., 5$$

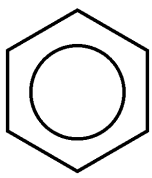
sind. Geben Sie das Energiespektrum an. Diskutieren Sie die Entartung. (2 Punkte)

c) Zeigen Sie, dass die normierten Eigenvektoren von H in der Basis $\{|\phi\rangle\}$

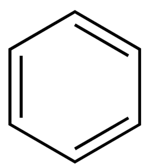
$$|\chi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{n=0}^{5} e^{in\delta_s} |\phi_n\rangle$$

sind. (2 Punkte)

d) Verteilen Sie nun sechs Elektronen auf den Ring. Beachten Sie dabei das Pauliprinzip (siehe Aufgabe 12) und berechnen Sie die Gesamtenergie. Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem Wert aus dem Modell von Kékulé, das davon ausgeht, der Benzolring sei aus drei Ethenen zusammengesetzt. (1 Punkt)



Delokalisierte Elektronen



Lokalisierte Elektronen (Kékulé)