Quantenmechanik II. Musterlösung 2.

FS 11

1. Drehimpulsmatrizen

Unter der Verwendung der folgenden Zusammenhänge für die M_i (wobei $m = -1, 0, 1$),

$$M_3|j=1,m\rangle = m|j=1,m\rangle \ ,$$
$$M_\pm|j=1,m\rangle = \sqrt{2-m(m\pm 1)}|j=1,m\pm 1\rangle \ ,$$
$$M_1 = \frac{1}{2}(M_+ + M_-) \ , \qquad M_2 = \frac{1}{2\mathrm{i}}(M_+ - M_-) \ ,$$

bestimmen wir die Drehimpulsmatrizen in der Basis $\{|j=1,m\rangle\}_{m=-1}^{1}$ zu

$$M_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} , \qquad M_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \qquad M_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} ,$$
$$M_1 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} , \qquad M_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} .$$

2. Zeitumkehr und Spin

i) Der Vorschlag liefert $U_T^* = (K \otimes \mathbb{1})(1 \otimes \sigma_2)$ und damit $U_T x_i U_T^* = x_i$ wie in der Theorie ohne Spin, da $x_i = x_i \otimes \mathbb{1}$. Ebenso $U_T p_i U_T^* = -p_i$. Um zu zeigen, dass $U_T S_i U_T^* = -S_i$ für $S_i = \hbar\sigma_i/2$ gilt, beachte zunächst, dass σ_2 rein imaginär ist, im Unterschied zu σ_1, σ_3:

$$K\sigma_i K = \begin{cases} \sigma_i & (i = 1, 3) \\ -\sigma_2 & (i = 2) \ . \end{cases}$$

Die Behauptung folgt so aus

$$(\sigma_2 K)\sigma_i(K\sigma_2) = \left\{ \begin{matrix} \sigma_2\sigma_i\sigma_2 = -\sigma_i\sigma_2^2 \\ \sigma_2(-\sigma_2)\sigma_2 \end{matrix} \right\} = -\sigma_i \ .$$

Schliesslich ist $U_T^2 = \sigma_2 K \sigma_2 K = -\sigma_2^2 = -1$.

ii) Die Invarianz lautet $HU_T = U_T H$. Aus $H|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ folgt $HU_T|\psi\rangle = U_T H|\psi\rangle = \lambda U_T|\psi\rangle$, so dass $U_T|\psi\rangle$ auch ein Eigenvektor ist. Es gilt

$$\langle\psi|U_T\psi\rangle = \langle U_T^2\psi|U_T\psi\rangle = -\langle\psi|U_T\psi\rangle$$

wegen der Antiunitarität ($\langle\varphi|\psi\rangle = \langle U_T\psi|U_T\varphi\rangle$) und $c_T = -1$. So folgt $\langle\psi|U_T\psi\rangle = 0$ und $\psi, U_T\psi$ spannen einen zweidimensionalen Unterraum des Eigenraums zu λ auf, $V_2 \subset \mathcal{E}_\lambda$, der unter U_T invariant ist. Wir konstruieren rekursiv ($n \to n+1$) einen ebenfalls invarianten Unterraum $V_{2n} \subset \mathcal{E}_\lambda$ der Dimension $2n$, solange $2n < \dim \mathcal{E}_\lambda$. Dann nämlich gibt es $0 \neq \psi \in \mathcal{E}_\lambda$ orthogonal zu V_{2n}: $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$, $(\varphi \in V_{2n})$. Daraus folgt auch

$$\langle\varphi|U_T\psi\rangle = \langle U_T\psi|U_T\varphi\rangle = -\langle\psi|U_T\varphi\rangle = 0 \ ,$$

da $U_T\varphi \in V_{2n}$ Also spannen $V_n, \psi, U_T\psi$ einen invarianten Unterraum V_{2n+2} auf. Die Rekursion bricht ab für $2n = \dim \mathcal{E}_\lambda$.

(Nebenbei: Die Kramers-Entartung liefert die Grundlage einer neuer Klasse von Isolatoren, den topologischen Isolatoren. Beispiel: Graphen mit Spin-Bahn-Kopplung.)

3. Spin-Präzession

i) Aus der Schrödinger-Gleichung und ihrer adjungierten, $-\mathrm{i}\hbar\langle\dot{\psi}(t)| = \langle\psi(t)|H(t)$, folgt für $P(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$

$$\mathrm{i}\hbar\dot{P} = \mathrm{i}\hbar(|\dot{\psi}\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\dot{\psi}| = H|\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\langle\psi|H \ ,$$

d.h.

$$\dot{P} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H, P] \ . \tag{3}$$

ii) Sei $|\vec{e}\rangle$ der Zustand eines Spin-$\frac{1}{2}$ in Richtung $\vec{e}$. Die Spektralzerlegung von $\vec{S} \cdot \vec{e} = (\hbar/2)\vec{\sigma} \cdot \vec{e}$ ist

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} \cdot \vec{e} &= |\vec{e}\rangle\langle\vec{e}| - |-\vec{e}\rangle\langle-\vec{e}| \ , \\ 1 &= |\vec{e}\rangle\langle\vec{e}| + |-\vec{e}\rangle\langle-\vec{e}| \ , \end{aligned}$$

also

$$|\vec{e}\rangle\langle\vec{e}| = \frac{1}{2}(1 + \vec{\sigma} \cdot \vec{e}) \equiv P \ .$$

Gleichung (3) mit $H(t) = -(\gamma\hbar/2)\vec{B}(t) \cdot \vec{\sigma}$ wird so zu

$$\vec{\sigma} \cdot \dot{\vec{e}}(t) = \frac{\mathrm{i}\gamma}{2}[\vec{\sigma} \cdot \vec{B}, \vec{\sigma} \cdot \vec{e}] = -\gamma\vec{\sigma} \cdot (\vec{B} \wedge \vec{e})$$

und damit zu

$$\dot{\vec{e}} = -\gamma\vec{B} \wedge \vec{e} \ . \tag{4}$$

iii) Im Fall $\vec{B}(t) = B\vec{e}_3$ beschreibt (4) eine Präzession mit Winkelgeschwindigkeit $-\gamma B\vec{e}_3$, bzw. zur Zeit t eine Drehung mit Achse $\vec{e}_3$ und Winkel $-\gamma Bt$:

$$\begin{aligned} \vec{e}(t) &= R(\vec{e}_3, -\gamma Bt)\vec{e}(0) \\ &= (\vec{e}_3 \cdot \vec{e}(0))\vec{e}_3 + (\vec{e}(0) - (\vec{e}_3 \cdot \vec{e}(0))\vec{e}_3)\cos\gamma Bt - (\vec{e}_3 \wedge \vec{e}(0))\sin\gamma Bt \ . \end{aligned}$$

Die Messung von S_3 liefert einen nach unten gerichteten Spin mit Wahrscheinlichkeit

$$P_\downarrow(t) = |\langle-\vec{e}_3|\vec{e}(t)\rangle|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2} \ ,$$

wobei $\theta = \measuredangle(-\vec{e}_3, \vec{e}(0))$, denn unter der Drehung $R(\vec{e}_3, -\gamma B t)$ bleibt $\theta(t) = \measuredangle(-\vec{e}_3, \vec{e}(t))$ konstant. Die dabei verwendete Gleichung (2) folgt aus

$$
\begin{aligned}
|\langle\vec{e}_1|\vec{e}_2\rangle|^2 &= \mathrm{tr}\,|\vec{e}_1\rangle\langle\vec{e}_1|\vec{e}_2\rangle\langle\vec{e}_2| = \frac{1}{4}\mathrm{tr}\,(1+\vec{e}_1\cdot\vec{\sigma})(1+\vec{e}_2\cdot\vec{\sigma}) = \frac{1}{4}\mathrm{tr}\,(1+\vec{e}_1\cdot\vec{e}_2)\mathbb{1}\\
&= \frac{1}{2}(1+\cos\theta) = \cos^2\frac{\theta}{2}\ .
\end{aligned}
$$

iv) Wir transformieren auf ein System O', das mit Winkelgeschwindigkeit $\omega\vec{e}_3$ rotiert,

$$
\vec{e}(t) =: R(\vec{e}_3, \omega t)\vec{e}\,'(t)\ . \tag{5}
$$

Mit $\vec{B}(t) =: R(\vec{e}_3, \omega t)\vec{B}\,'(t)$ wird

$$
\vec{B}'(t) = B_0\vec{e}_3 + B_1\vec{e}_1
$$

zeitunabhängig. Wir setzen

$$
-\gamma(B_0\vec{e}_3 + B_1\vec{e}_1) \equiv \omega_0\vec{e}_3 + \omega_1\vec{e}_1\ .
$$

Wegen $\dot{R}\vec{x} = \omega\vec{e}_3 \wedge \vec{x}$ folgt aus (5)

$$
\dot{\vec{e}} = \omega\vec{e}_3 \wedge R\vec{e}\,' + R\dot{\vec{e}}\,' = R(\omega\vec{e}_3 \wedge \vec{e}\,' + \dot{\vec{e}}\,')\ .
$$

Vergleich mit (4), d.h. mit

$$
\dot{\vec{e}} = -\gamma\vec{B} \wedge R\vec{e}\,' = R(-\gamma\vec{B}' \wedge \vec{e}\,')\ ,
$$

liefert

$$
\dot{\vec{e}}\,' = ((\omega_0 - \omega)\vec{e}_3 + \omega_1\vec{e}_1) \wedge \vec{e}\,' = \Omega\vec{e}_0 \wedge \vec{e}\,'
$$

mit

$$
\Omega^2 = (\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2\ , \qquad \vec{e}_0 = \frac{\omega_0 - \omega}{\Omega}\vec{e}_3 + \frac{\omega_1}{\Omega}\vec{e}_1\ .
$$

Die Lösung ergibt sich aus (5) und aus

$$
\begin{aligned}
\vec{e}\,'(t) &= R(\vec{e}_0, \Omega t)\vec{e}\,'(0)\\
&= (\vec{e}_0\cdot\vec{e}_3)\vec{e}_0 + (\vec{e}_3 - (\vec{e}_0\cdot\vec{e}_3)\vec{e}_0)\cos\Omega t + (\vec{e}_0 \wedge \vec{e}_3)\sin\Omega t\ ,
\end{aligned}
$$

da $\vec{e}\,'(0) = \vec{e}(0) = \vec{e}_3$. So ist $P_\downarrow(t) = (1+\cos\theta(t))/2$ mit $\theta(t) = \measuredangle(-\vec{e}_3, \vec{e}\,'(t)) = \measuredangle(-\vec{e}_3, \vec{e}\,'(t))$, da $\vec{e}_3$ invariant ist unter $R(\vec{e}_3, \omega t)$. Ferner gilt

$$
\begin{aligned}
\cos\theta(t) &= -\vec{e}_3\cdot\vec{e}\,'(t) = -(\vec{e}_0\cdot\vec{e}_3)^2 + (-1 + (\vec{e}_0\cdot\vec{e}_3)^2)\cos\Omega t\ ,\\
P_\downarrow(t) &= \frac{1-(\vec{e}_0\cdot\vec{e}_3)^2}{2}(1-\cos\Omega t) = \frac{\omega_1^2}{2\Omega^2}(1-\cos\Omega t) = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2}\sin^2\frac{\Omega t}{2}\ .
\end{aligned}
$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit oszilliert mit der Rabi-Frequenz Ω, erreicht aber den Wert 1 nur bei Resonanz $\omega = \omega_0$. Dies entspricht dem Fall $\vec{e}_0 = \vec{e}_1$, wo die Präzessionsachse $\vec{e}_0$ senkrecht zu $\vec{e}_3$ wird. Beachte, dass die Resonanzbedingung $\hbar\omega = -\gamma B_0\hbar$ der Bohrschen Frequenzbedingung für $H_0 = -\gamma B_0 S_3$ entspricht.