Übung 10

Abgabe: Dienstag, 20. Januar 2004

Aufgabe 1

Wie lauten die Eigenvektoren von $\hat{s}_x$? Welches sind die zugehörigen Eigenwerte? Man drücke die Eigenvektoren von $\hat{s}_x$ als Linearkombination von $\alpha = \binom{1}{0}$ und $\beta = \binom{0}{1}$ aus.

Aufgabe 2

Wir betrachten ein Kernresonanzexperiment mit zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen – etwa zwei Protonen in einer Molekel –, wie es der Aufnahme eines NMR-Spektrums entspricht. Da sich die Kerne in einem äußeren homogenen Magnetfeld in z-Richtung befinden, sind die jeweiligen Hamiltonoperatoren der beiden Spins gegeben durch

$$\hat{H}_1 = \Omega_1 \hat{s}_{1z} \quad \text{und} \quad \hat{H}_2 = \Omega_2 \hat{s}_{2z} \,,$$

wobei die beiden Kreisfrequenzen Ω_1 und Ω_2 in der Regel verschieden sind wegen unterschiedlicher magnetischer Abschirmung und – falls es sich um zwei verschiedene Kernsorten handelt – wegen unterschiedlicher gyromagnetischer Verhältnisse.

2.1 Wie lauten die Eigenwerte der beiden Hamiltonoperatoren?

2.2 Wie sehen die jeweiligen Kernresonanzspektren jedes *einzelnen* Spins aus? (Man zeichne eine Achse bezüglich der Energie und trage die Frequenzen der Übergänge ein.) Wie sieht das Spektrum der beiden *ungekoppelten* Spins zusammengenommen aus?

Sind die beiden Kerne *gekoppelt*, lautet der für das Experiment relevante Hamiltonoperator in guter Näherung

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \frac{2\pi J}{\hbar}\,\hat{s}_{1z}\,\hat{s}_{2z} \,,$$

wobei J eine effektive Kopplungskonstante ist (vgl. auch Vorlesung Analytik).

2.3 Man zeige, daß die Eigenvektoren $\alpha\alpha$, $\alpha\beta$, $\beta\alpha$ und $\beta\beta$ von $\hat{S}_z$ zum Eigenwert $M\hbar$ auch Eigenvektoren von $\hat{H}$ sind und gebe die entsprechenden Energieeigenwerte an.

2.4 Man tabelliere sämtliche Übergänge von einem Energieeigenzustand zu einem anderen. In erster Näherung sind nur Übergänge möglich, bei denen sich die z-Komponente des Gesamtdrehimpulses um den Betrag $\hbar$ ändert, d. h. für die $\Delta M = \pm 1$ gilt.

2.5 Man zeichne mit Hilfe von 2.4 das NMR-Spektrum der beiden gekoppelten Kerne.

Aufgabe 3

3.1 Wie lauten die Eigenwerte von s_z bei einem System mit Spin $s = \frac{5}{2}$? (Die entsprechenden Eigenzustände $\chi_{m_s}(m)$ bilden eine Basis für den Vektorraum der Zustände dieses Systems.)

3.2 Wie lauten die Eigenwerte von l_z bei einem System mit Bahndrehimpulsquantenzahl $l = 3$? (Auch hier kann man alle möglichen Wellenfunktionen des Systems als Linearkombination der entsprechenden l_z-Eigenfunktionen $\psi_{m_l}(\boldsymbol{r})$ ausdrücken, d. h. die $\psi_{m_l}(\boldsymbol{r})$ bilden auch eine Basis.)

Eine Basis für das *zusammengesetzte* System erhält man durch die Bildung aller möglichen Produkte der Form $\psi_{m_l}(\boldsymbol{r})\,\chi_{m_s}(m)$.

3.3 Wieviele solche Produktzustände gibt es?

Für den Gesamtdrehimpuls $\hat{\boldsymbol{j}} := \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}$ kann man Spinorbitale $\varphi_{j,m_j}(\boldsymbol{r}, m)$ finden, die gleichzeitig Eigenvektoren von $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ und j_z sind. Die entsprechenden Eigenwerte sind

$$\boldsymbol{j}^2 = j(j+1)\hbar^2$$
$$j_z = m_j\hbar \,.$$

3.4 Welche Werte können die Quantenzahlen j und m_j annehmen? Wieviele solche Spinorbitale $\varphi_{j,m_j}(\boldsymbol{r}, m)$ gibt es insgesamt? Kommentar?

3.5 *Fakultativ!* Man zeige, daß für *jeden* Wert von s und l die Anzahl der $\psi_{m_l}(\boldsymbol{r})\,\chi_{m_s}(m)$ gleich der Anzahl der $\varphi_{j,m_j}(\boldsymbol{r}, m)$ ist.

Aufgabe 4

In der Vorlesung wurde gezeigt, daß die magnetische Spin–Bahn-Wechselwirkungsenergie in einem Atom gegeben ist durch

$$E_{\mathrm{mag}} = \frac{\zeta}{2} \, \frac{|\boldsymbol{j}|^2 - |\boldsymbol{l}|^2 - |\boldsymbol{s}|^2}{\hbar^2} \,.$$

Für ein Wasserstoff-Atomorbital mit den Quantenzahlen n und l ist die Proportionalitätskonstante ζ gleich

$$\zeta = \frac{\alpha^2 R_{\mathrm{H}} hc}{n^3} \, \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \,,$$

wobei α die Feinstrukturkonstante und R_{H} die die Rydbergkonstante des H-Atoms bezeichnet.

Wie groß ist E_{mag} (in cm^{-1}) für die Termkomponenten $^2\mathrm{d}_{5/2}$ und $^2\mathrm{d}_{3/2}$ der 3d-Unterschale im Wasserstoffatom? Man skizziere die Lage dieser Termkomponenten gegenüber der unverschobenen 3d-Unterschale.