

11. Übung zur Vorlesung Theoretische Physik E: Quantenmechanik II Universität Karlsruhe WS 2008/09

Prof. Dr. Gerd Schön— Dr. Matthias Eschrig

www-tfp.physik.uni-karlsruhe.de/Lehre/

Vorrechnen: Dienstag, 27.01.2009

[Hinweis: Die zweite Klausur findet am Mittwoch, dem 11. Februar, von 17:30-19:30 Uhr im Audimax statt. Bitte bringen Sie ihren Studentenausweis mit. Als Hilfsmittel ist ein handbeschriebenes A4-Blatt (beidseitig beschrieben) zugelassen. Die Ausgabe der Klausuren erfolgt am 13. Februar 2009 anstatt des Beratungstutoriums im Seminarraum 2.17 des Physikhochhauses.]

Aufgabe 31

(4 Punkte)

EPSTEIN-Formel und HELLMANN-FEYMAN-Theorem:

Betrachten Sie einen Hamiltonoperator $H \equiv H(\vec{\lambda})$ mit stationären Eigenwerten $E_n \equiv E_n(\vec{\lambda})$ und Eigenvektoren $|\Psi_n\rangle \equiv |\Psi_n(\vec{\lambda})\rangle$, die (stetig und differenzierbar) von einem Parameter $\vec{\lambda}$ abhängen. Die Eigenvektoren seien orthonormal, so dass $\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \delta_{nm}$, $\langle \Psi_m | H | \Psi_n \rangle = E_n \delta_{nm}$. Bilden Sie von diesen Gleichungen jeweils auf beiden Seiten die Ableitung bezüglich $\vec{\lambda}$ und zeigen Sie, dass für $m \neq n$ die EPSTEIN-Formel

$$\langle \Psi_m | \vec{\nabla}_{\vec{\lambda}} | \Psi_n \rangle = \frac{\langle \Psi_m | \vec{\nabla}_{\vec{\lambda}} H | \Psi_n \rangle}{E_n - E_m} \quad (1)$$

folgt, und für $m = n$ das HELLMANN-FEYMAN-Theorem

$$\langle \Psi_n | \vec{\nabla}_{\vec{\lambda}} H | \Psi_n \rangle = \vec{\nabla}_{\vec{\lambda}} E_n. \quad (2)$$

Aufgabe 32

(5 Punkte)

BERRY-Feld für dreidimensionalen adiabatischen Parameter $\vec{\lambda}$:

Für einen dreidimensionalen adiabatischen Parameter $\vec{\lambda}$ kann die BERRY-Phase mittels des STOKESSchen Theorems geschrieben werden als

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} \vec{C}_n(\vec{\lambda}) d\vec{\lambda} = \int_{\mathcal{S}} [\vec{\nabla}_{\vec{\lambda}} \times \vec{C}_n(\vec{\lambda})] d\vec{f} \equiv \int_{\mathcal{S}} \vec{Q}_n(\vec{\lambda}) d\vec{f} \quad (3)$$

mit $\vec{Q}_n(\vec{\lambda}) = \vec{\nabla}_{\vec{\lambda}} \times \vec{C}_n(\vec{\lambda})$ und $\vec{C}_n(\vec{\lambda}) = \text{Im} \langle \Psi_n | \vec{\nabla}_{\vec{\lambda}} \Psi_n \rangle$. Hier ist $\mathcal{S}$ die von der geschlossenen Kurve $\mathcal{C}$ eingeschlossenen Fläche. Desweiteren nehmen wir an, dass $|\Psi_n\rangle$ und E_n Eigenvektoren und Eigenwerte der SCHRÖDINGERgleichung $H(\vec{\lambda})|\Psi_n(\vec{\lambda})\rangle = E_n(\vec{\lambda})|\Psi_n(\vec{\lambda})\rangle$ sind.

(a) (2 Punkte) Zeigen Sie, dass $\vec{Q}_n(\vec{\lambda})$ mittels des Kreuzprodukts geschrieben werden kann als

$$\vec{Q}_n(\vec{\lambda}) = \text{Im} \sum_m \langle \vec{\nabla}_{\vec{\lambda}} \Psi_n | \Psi_m \rangle \times \langle \Psi_m | \vec{\nabla}_{\vec{\lambda}} \Psi_n \rangle. \quad (4)$$

(b) (1 Punkt) Zeigen Sie, dass der Term mit $m = n$ in Gl. 4 verschwindet.

(c) (2 Punkte) Verwenden Sie die EPSTEIN-Formel aus Aufgabe 31, um zu zeigen dass

$$\vec{Q}_n(\vec{\lambda}) = \text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Psi_n | \vec{\nabla}_{\vec{\lambda}} H | \Psi_m \rangle \times \langle \Psi_m | \vec{\nabla}_{\vec{\lambda}} H | \Psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2}. \quad (5)$$

Aufgabe 33**(8 Punkte)**

BERRY-Phase für Spin- $\frac{1}{2}$ im zeitabhängigen Magnetfeld:

Betrachten Sie den Hamiltonoperator für einen Spin- $\frac{1}{2}$ im Magnetfeld $\vec{B}(t)$, $H = -\hbar\mu_e\vec{\sigma}\vec{B}(t)$ mit dem magnetischen Moment μ_e . Der Vektor des Magnetfeldes bewege sich während des Zeitintervalls $[0, T]$ adiabatisch entlang einer geschlossenen Kurve $\mathcal{C}$. Wir können dann das Magnetfeld $\vec{B}(t)$ als adiabatischen Parameter $\vec{\lambda}(t)$ auffassen. Der Hamiltonoperator ist dann nur implizit zeitabhängig über $\vec{B}(t)$. Die beiden stationären Spin-Eigenvektoren zum Hamiltonoperator $H(\vec{B}) = -\vec{\sigma}\vec{B}$ seien mit $|\Psi_{\pm}(\vec{B})\rangle$ bezeichnet. Die Eigenwerte sind $E_{\pm}(\vec{B}) = \mp\hbar\mu_e|\vec{B}|$.

- (a) (4 Punkte) Zeigen Sie unter Verwendung von Gl. (5) [mit $\vec{\lambda} = \vec{B}$ und $n = \pm$, $m = \pm$ als Quantenzahlen], dass das BERRY-Feld durch

$$\vec{Q}_{\pm}(\vec{B}) = \pm \frac{\vec{e}_B}{2B^2} \quad (6)$$

gegeben ist. Leiten Sie daraus die BERRY-Phase $\gamma_{\pm}(\mathcal{C})$ her, und zeigen Sie, dass ihr Betrag durch den halben Raumwinkel gegeben wird, den die Kurve vom Koordinatenursprung $\vec{B} = 0$ aus gesehen aufspannt.

- (b) (4 Punkte) Leiten Sie die Ergebnisse aus Teilaufgabe (a) explizit her, indem Sie die Parameterisierung durch Polarwinkel ϑ, ϕ bezüglich der z -Achse verwenden, wobei die Feldkomponenten die Gleichungen $\tan \vartheta = \sqrt{B_x^2 + B_y^2}/B_z$ und $\tan \phi = B_y/B_x$ erfüllen, und die Eigenvektoren durch

$$|\Psi_+(\vec{B})\rangle = \cos \frac{\vartheta}{2} |\uparrow\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\vartheta}{2} |\downarrow\rangle \quad (7)$$

$$|\Psi_-(\vec{B})\rangle = \sin \frac{\vartheta}{2} |\uparrow\rangle - e^{i\phi} \cos \frac{\vartheta}{2} |\downarrow\rangle. \quad (8)$$

gegeben sind. Der Anfangswert bei $t = 0$ sei der Eigenvektor für einen Spin, der in Richtung des Magnetfeldes $\vec{B}_0 \equiv \vec{B}(t=0)$ ausgerichtet ist, $|\Psi(\vec{B}_0)\rangle = |\Psi_+(\vec{B}_0)\rangle$. Wir wollen uns auf den Fall beschränken, dass ϑ zeitlich konstant bleibt. Zeigen Sie, dass die BERRY-Phase in diesem Fall durch $\gamma_{\pm}(\mathcal{C}) = \pm 2\pi \sin^2(\frac{\vartheta}{2}) = \pm \frac{1}{2}\Omega(\mathcal{C})$ gegeben ist, wobei $\Omega(\mathcal{C})$ der Raumwinkel der Kurve $\mathcal{C}$ vom Koordinatenursprung gesehen ist.

Aufgabe 34**(3 Punkte)**

Drehimpulserhaltung:

- (a) (1 Punkt) Berechnen Sie den Kommutator des Bahndrehimpulses $\vec{L}$ mit dem DIRAC-HAMILTONoperator $H_D = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2$.
- (b) (1 Punkt) Berechnen Sie den Kommutator des Spinoperators mit dem DIRAC-HAMILTONoperator.
- (c) (1 Punkt) Zeigen Sie, dass der Operator des Gesamtdrehimpulses mit dem DIRAC-HAMILTONoperator vertauscht.