Technische Universität
Wien

Prof. Dr. K. Held
Dr. A. Toschi, Dr. P. Hansmann

4. Übung zur Quantenmechanik II

Wintersemester 2010/2011

ABGABE: zu Dritt (ausnahmsweise zu 1,2 oder 4 Personen), **Freitag**, **03.12.2010**, zu Beginn der Übungstunde (Tutorium)

NOTE: $\frac{2}{3}$ Klausur, $\frac{1}{3}$ Übungen

9. Magnetische Spinresonanz *1+3+4=8 Pkt.*

Betrachten Sie ein Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen in einem magnetischen Feld $\mathbf{B}_0 = (0, 0, B_z)$, das sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $|\psi(t = 0)\rangle = |\uparrow\rangle$ befindet. Als Quantisierungsachse wird die z-Achse angenommen, d.h. $|\uparrow\rangle$ ist der Eigenzustand des Operators S_z zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$.
Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird nun zusätzlich ein zeitabhängiges magnetisches Feld

$$\mathbf{B}_r(t) = (B_r \cos(\omega t), B_r \sin(\omega t), 0)$$

eingeschaltet. Es soll dabei $B_r \ll B_z$ gelten, d.h. $\mathbf{B}_r(t)$ kann als kleine Störung von $\mathbf{B}_0$ aufgefasst werden.

Info:
Die eben beschriebene physikalische Situation findet bei Kern-Spin-Resonanz- Untersuchungen in der Technik und der Medizin (Kernspintomographie) eine praktische Anwendung. In diesem Fall liegt ω im Radiofrequenzbereich

a) Geben Sie den Hamliton-Operator $H(t)$ für das oben beschriebene System mit gyromagnetischem Faktor γ an. (Das magnetische Moment ist damit $\boldsymbol{\mu} = \gamma\,\mathbf{S}$, also $\gamma = g\,\mu_{\mathrm{B}}$)

b) Berechnen Sie **in erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie** die Wahrscheinlichkeit $P_{\downarrow}^{(1)}(t)$, dass sich der Spin zum Zeitpunkt $t > 0$ im Zustand $|\downarrow\rangle$ befindet.

c) Berechnen Sie den **exakten Ausdruck** für die Wahrscheinlichkeit $P_{\downarrow}(t)$ und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem Resultat aus Beispiel b).

10. Kristallfeld vs. Spin-Bahn-Kopplung *2+4+2=8 Pkt.*

In dieser Aufgabe untersuchen wir die Korrekturen der Spin-Bahn-Kopplung (SO) auf die Eigenzustände des kubischen Kristallfeld (CF) Operators für ein einzelnes Elektron in der 3d-Schale. Diese Situation finden wir beispielsweise in Lanthantitanat $LaTiO_3$ wieder, bei dem Ti^{3+} Ionen oktaedrisch von sechs O^{2-} umgeben sind. Die Aufspaltung der 3d Elektronen im kubischen Kristallfeld wird aus historischen Gründen mit dem Parameter 10Dq parametrisiert.

a) Zunächst sollen die Eigenzustände des kubischen CF-Operators bestimmt werden, der sich für die $3d^1$ Konfiguration des Titans in der L_z, S_z Basis folgendermaßen schreiben lässt:

$$\hat{H}_{\mathrm{CF}} = \mathrm{Dq} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccccccc} -2^{\downarrow} & -2^{\uparrow} & -1^{\downarrow} & -1^{\uparrow} & 0^{\downarrow} & 0^{\uparrow} & 1^{\downarrow} & 1^{\uparrow} & 2^{\downarrow} & 2^{\uparrow} \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

Geben sie also den sechsfach entarteten Grundzustand t_{2g} ($E_{t_{2g}} = -4\mathrm{Dq}$) und die vierfach entarteten e_g Zustände ($E_{e_g} = 6\mathrm{Dq}$) im Sinne von Linearkombinationen der L_z, S_z Zustände an.

b) Nun soll die Spin-Bahn-Kopplung im sechsfach entarteten t_{2g} Unterraum störungstheoretisch berücksichtigt werden. Schreiben sie also als ersten Schritt den Spin-Bahn-Kopplungsoperator $\hat{H}_{\mathrm{SO}} = \zeta\, \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ in der t_{2g} Basis. Geben Sie anschließend die Aufhebung der Entartung durch die Spin-Bahn-Kopplung in erster Ordnung Störungstheorie an. Hierbei ist „ζ“, genau wie „Dq“, ein skalarer Parameter, der Informationen aus dem Radialteil der Wellenfunktionen enthält.

c) Die Spin-Bahn-Kopplung in den 3d Übergangsmetallen agiert auf ca. zehnmal kleineren Energieskalen als die Kristallfeld Aufspaltung. Nehmen Sie also an, dass $\zeta = 10\mathrm{Dq}/100$ und vergleichen sie Ihre Ergebnisse mit den exakten Energien des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands, welche lauten $E_{\mathrm{gs}}^{\mathrm{full}} = -4.0515\mathrm{Dq}$ und $E_{\mathrm{1st}}^{\mathrm{full}} = -3.900\mathrm{Dq}$. Überlegen Sie anhand der Größe des Unterschieds woher er kommt?

Info:
In $LaTiO_3$ hat man trotz des fast perfekt kubischen Kristallfeldes experimentell keine entarteten t_{2g} Zustände gefunden. Tatsächlich war die Spin-Bahn Kopplung ein Kandidat für eine mögliche Erklärung. Später hat sich jedoch herausgestellt, dass ein anderer Effekt, der sogenannte Jahn-Teller-Effekt, verantwortlich ist für die aufgehobene Entartung.
In den sog. Seltenerdverbindungen der Lanthanide ist die Situation umgekehrt zu den 3d Verbindungen: In den 4f Systemen spielt die Spin-Bahn-Kopplung eine viel wichtigere Rolle als das Kristallfeld, welches als kleine Störung aufgefasst werden kann. Der Grund dafür ist, dass die 4f Elektronen in diesen Systemen aufrgund ihrer hohen Bahndrehzahl große relativistische Korrekturen bekommen, aber aufgrund ihrer starken Lokalisierung nur wenig von der kristallinen Umgebung „sehen“. Richtig schwierig wird es dann, wenn solche Effekte auf ähnlichen Energieskalen ablaufen wie z.B. bei 4d & 5d Verbindungen oder auch den Actiniden mit ihren 5f Elektronen.