4. Tutorium - VU Quantentheorie 2 - 18.11.2011

1. Molekülrotation

Im vergangenen Tutorium wurde der Vibrationsfreiheitsgrad von Stickstoffmonoxid behandelt. Betrachten Sie nun den Rotationsfreiheitsgrad dieses Moleküls.

(a) Überlegen Sie, wie die Rotationsenergie des Moleküls mit seinem Trägheitsmoment und seinem Drehimpuls in Zusammenhang steht. Erläutern Sie, wie Sie auf Basis dieses klassischen Zusammenhangs und durch die Drehimpulsquantisierung diskrete Niveaus für die Rotationsenergie erhalten.

(b) Schätzen Sie den Abstand zwischen benachbarten Energieniveaus im Rotationsspektrum von NO ab. (Der mittlere Abstand d zwischen den beiden Atomkernen des Moleküls kann dabei mit $d \approx 115$pm als bekannt angenommen werden.)

(c) Werden die angeregten Rotationszustände von NO bei Raumtemperatur besetzt? Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit den zuvor berechneten Vibrationsanregungen bzw. mit den elektronischen Anregungen im Bereich einiger eV.

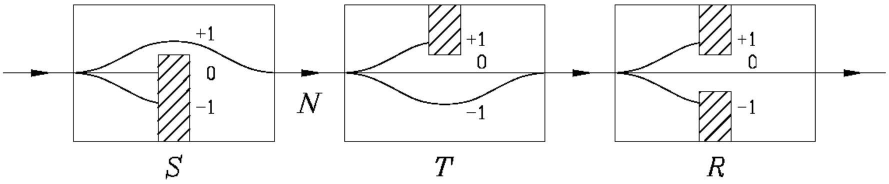
(d) Um den NO-Gehalt in Ihrer Wohnung zu überprüfen, wollen Sie ein Messgerät bauen. Strahlung welcher Wellenlänge muss dieses Messgerät erzeugen, wenn die Molekül-Detektion auf Basis der Rotationsspektren erfolgen soll?

2. Absorption eines Photons

Das Valenzelektron eines Atoms werde durch Absorption eines Photons mit Wellenzahl $\vec{k}$ und mit Polarisationsvektor $\vec{e} \perp \vec{k}$ vom Zustand $|i\rangle \equiv |n\, l\, m_l\, s\, m_s\rangle$ in einen angeregten Zustand $|f\rangle \equiv |n'\, l'\, m_l'\, s\, m_s'\rangle$ gehoben. Nehmen Sie nun an, bei dem entsprechenden Anregungsprozess handle es sich um einen elektrischen Dipolübergang. In diesem Fall wird die Übergangswahrscheinlichkeit durch folgendes Matrixelement mit dem Dipoloperator $\vec{D}$ bestimmt: $|\langle f|\vec{e}\cdot\vec{D}|i\rangle|^2$. Zeigen Sie auf dieser Basis, dass für die in Frage kommenden Dipolübergänge folgende Auswahlregeln gelten: $\Delta l \equiv l' - l = \pm 1$, $\Delta m_l \equiv m_l' - m_l = 0, \pm 1$, $\Delta m_s \equiv m_s' - m_s = 0$. *Hinweis*: Verwenden Sie für Ihre Ableitung das Wigner-Eckhart-Theorem, sowie Überlegungen zur Parität der auftretenden Wellenfunktionen. Weiters gilt folgende Identität für das Skalarprodukt zweier Vektoroperatoren: $\vec{A} \cdot \vec{B} = \sum_{i=1}^{3} A_i B_i = \sum_{q=-1}^{1} (-1)^q A_q^1 B_{-q}^1$ (wobei A_q^1, B_q^1 die sphärischen Komponenten der Vektoroperatoren sind).

3. Gekoppelte Stern-Gerlach-Apparate

Ein unpolarisierter Strahl von neutralen Spin-1 Teilchen falle in positiver y-Richtung auf die in der Abbildung dargestellte Anordnung von gekoppelten Stern-Gerlach-Apparaten ein. Dabei besitze der Stern-Gerlach-Apparat S einen Feldgradienten in positive z-Richtung bzw. R einen Feldgradienten in positive x-Richtung. Der Feldgradient des dazwischenliegenden Spin-Filters T habe ebenfalls einen Feldgradienten in der xz-Ebene, der jedoch zwischen jenen von S und R variiert werden kann. Nehmen Sie nun an, dass N (Teilchen pro Sekunde) die Intensität des Strahls sei, welcher den S-Apparat verlässt. Wie muss nun der Feldgradient von T in der xz-Ebene gelegt werden, damit die Intensität des Strahls, welcher den R-Apparat



verlässt, minimal wird? Wie groß ist diese minimale Intensität? *Hinweis*: Um die jeweiligen Wahrscheinlichkeitsamplituden in diesem Problem richtig zu kombinieren ist es wichtig zu beachten, welche Strahlteile durch eine Dichtematrix bzw. durch eine reine Gesamtheit beschrieben werden. Verwenden Sie zudem die Elemente der Drehmatrix aus dem Skriptum.

4. Bloch-Kugel

(a) Betrachten Sie den im Bsp. 1(b) des vorigen Tutoriums eingeführten Elektronenspin $|\chi\rangle$. Zeigen Sie (mit Rechnung), dass jedem möglichen Wert von $\delta \in [0, 2\pi)$, $p \in [0, 1]$ genau ein Raumwinkel $\vec{e}$ (im $\mathbb{R}^3$) zugeordnet werden kann, für den die Messung der Spinprojektion $\vec{S} \cdot \vec{e}$ mit Wahrscheinlichkeit 1 den Wert $\hbar/2$ liefert. Dieses Ergebnis veranschaulicht, dass jedem *reinen Zustand* eines quantenmechanischen Zwei-Niveau-Systems (Spin, Qubit, etc.) ein Punkt *auf der Oberfläche* der Einheitskugel ("Bloch-Kugel") entspricht. Welche Zustände von $|\chi\rangle$ sind bei dieser Darstellung äquivalent zu den Punkten (i) am Nordpol, (ii) am Südpol bzw. (iii) am Äquator der Bloch-Kugel?

(b) Motivieren Sie (ohne Rechnung) dass jedem *gemischten Zustand* (wie z.B. dem Zustand ρ in Bsp. 1(a) der vorigen Woche) ein Punkt *innerhalb* der Bloch-Kugel entspricht. Welche Dichtematrix ρ entspricht hier dem Mittelpunkt der Bloch-Kugel?

(c) Das Konzept der Bloch-Kugel erlaubt es insbesondere die Zeitentwicklung von Systemen sehr anschaulich darzustellen. Überlegen Sie dementsprechend wie die in Bsp. 1(a),(b) des vorigen Tutoriums berechnete Bewegung des Spins im homogenen Magnetfeld durch eine zeitabhängige Rotation eines Vektors innnerhalb bzw. auf der Bloch-Kugel veranschaulicht werden kann.

Zu kreuzen: 1/2/3/4