Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Theoretische Physik II SS 2013	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de

Aufgabenblatt 12

12.1 Wechselwirkung zwischen drei Spins

Wir betrachten drei Spins mit je $s = 1$. Ihre effektive Spin-Spin-Wechselwirkung werde durch folgenden Hamiltonoperator beschrieben:

$$\underset{\sim}{H} \;=\; -\frac{2J}{\hbar^2}\left(\underset{\sim}{\vec{s}}_1 \cdot \underset{\sim}{\vec{s}}_2 + \underset{\sim}{\vec{s}}_1 \cdot \underset{\sim}{\vec{s}}_3 + \underset{\sim}{\vec{s}}_2 \cdot \underset{\sim}{\vec{s}}_3\right) \; . \tag{1}$$

Bestimmen Sie die Energieeigenwerte dieses Hamiltonoperators sowie deren Entartung. Hinweis: Sie können den Hamiltonoperator durch quadratische Ergänzung nutzbringend umformen. Zur Berechnung der Entartung ist eine Betrachtung der Kopplungsmöglichkeiten hilfreich.
Nehmen Sie jetzt die Wechselwirkung mit einem äußeren homogenen Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$ hinzu:

$$\underset{\sim}{H}_{\text{Zeeman}} \;=\; \frac{g\,\mu_B}{\hbar}\,\vec{B}\cdot\underset{\sim}{\vec{S}} \; . \tag{2}$$

Stellen Sie die Energieeigenwerte des Gesamthamiltonoperators als Funktion des äußeren Feldes B graphisch dar.

12.2 Ritzsches Variationsverfahren

Der Hamiltonoperator eines eindimensionalen anharmonischen Oszillators habe die folgende Form:

$$\underset{\sim}{H} \;=\; \frac{\underset{\sim}{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\; m\omega^2 \underset{\sim}{x}^2 + \lambda\, \underset{\sim}{x}^4 \; . \tag{3}$$

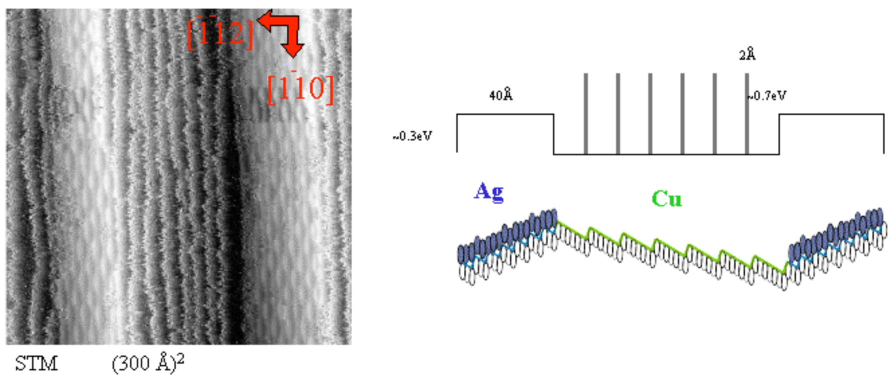
Bestimmen Sie approximativ die Grundzustandsenergie mit der Variationswellenfunktion

$$\phi(x) \;=\; c\exp\left\{-\alpha x^2\right\} \; . \tag{4}$$

Gegen welchen Wert geht die Energie für $\lambda \to 0$?

12.3 Potentialbarriere

Vorwort: In verschiedenen quantenmechanischen Systemen lassen sich quasi-eindimensionale Potentialtöpfe erzeugen. Ein Beispiel ist in der obigen Graphik dargestellt. Sie zeigt links die Rastertunnelmikroskopaufnahme einer Silber-Kupfer-Silber-Oberfläche (Dissertation Andreas Bachmann, Universität Osnabrück, urn:nbn:de:gbv:700-2002111519), bei der die Silberstreifen wie unendlich hohe Potetialwände wirken. Die dazu senkrechten Komponenten der Wellenfunktion verhalten sich so, als sei das System eindimensional. Die Stufen der Kupferoberfläche wirken innerhalb des Potentialtopfes wie kleine Barrieren (rechtes Bild).



Problem: Wir reduzieren das physikalische Problem im folgenden auf das eines Teilchens, das zwischen zwei ideal reflektierenden Wänden eingesperrt ist, sich also in einem unendlich hohen Kastenpotential, d.h. im Intervall $[0, L]$, bewegt. Innerhalb des Kastenpotentials befinde sich eine Potentialbarriere. Das System wird durch den Hamiltonoperator $\underset{\sim}{H} = \underset{\sim}{T} + \underset{\sim}{V}$ beschrieben. Dabei ist $\underset{\sim}{V}$ das Potential der Barriere, der Einfluß der unendlich hohen Potentialwände wird weiterhin durch die Randbedingung $\langle\, 0 \,|\, \Psi \,\rangle = \langle\, L \,|\, \Psi \,\rangle = 0$ modelliert.
Zur physikalischen Beschreibung des Systems sind die Eigenwerte und Eigenvektoren von $\underset{\sim}{H}$

$$\underset{\sim}{H} \,|\, \Phi_n \,\rangle \;=\; \left(\underset{\sim}{T} + \underset{\sim}{V}\right) \,|\, \Phi_n \,\rangle = E_n \,|\, \Phi_n \,\rangle \; . \tag{5}$$

nötig. Zur Lösung der Aufgabe geht man zweckmäßigerweise zu dimensionslosen Größen über, indem man alle Längen in Vielfachen von L und die Energien in Vielfachen von $\hbar^2/(2mL^2)$ angibt. Damit lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\langle\, \eta \,|\, \underset{\sim}{h} \,|\, \phi_n \,\rangle \;=\; \left(-\frac{\partial^2}{\partial\, \eta^2} + v(\eta)\right) \langle\, \eta \,|\, \phi_n \,\rangle = \epsilon_n \langle\, \eta \,|\, \phi_n \,\rangle \; . \tag{6}$$

Dabei gilt

$$x = \eta L \; , \quad \underset{\sim}{h} = \frac{\underset{\sim}{H}}{\hbar^2/(2mL^2)} \; , \quad v(\eta) = \frac{V(\eta L)}{\hbar^2/(2mL^2)} \; , \quad \epsilon_n = \frac{E_n}{\hbar^2/(2mL^2)} \; . \tag{7}$$

Die Eigenwertgleichung (6) kann man im Allgemeinen nicht geschlossen lösen, d.h. man muß sie numerisch lösen.

Aufgabenstellung: Machen Sie sich zuerst die dimensionslose Schrödingergleichung (6) klar. Bestimmen Sie die Energieeigenwerte ϵ_n und die zugehörigen Eigenfunktionen und stellen Sie die Grundzustandswellenfunktion (niedrigste Energie) und die Wellenfunktion des ersten angeregten Zustandes graphisch dar.
Die Potentialbarriere sei in unserem Fall durch

$$v(\eta) \quad = \quad \begin{cases} 50 & \text{für } 0.45 \leq \eta \leq 0.55 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{8}$$

gegeben.
Stellen Sie zuerst den Hamiltonoperator mit Hilfe der ersten 20 Eigenzustände der kinetischen Energie dar. Diese lauten in den dimensionslosen Größen

$$\langle \eta \,|\, \psi_n \rangle \quad = \quad \sqrt{2} \sin(n\pi\eta) \; . \tag{9}$$

Bestimmen Sie dann die Eigenwerte und Eigenvektoren von $\langle \psi_m \,|\, \underset{\sim}{h} \,|\, \psi_n \rangle$.
Stellen Sie in einer Graphik die Grundzustandswellenfunktion ohne Potentialbarriere $\langle \eta \,|\, \psi_1 \rangle$ und die Grundzustandswellenfunktion mit Potentialbarriere $\langle \eta \,|\, \phi_1 \rangle$ dar und in einer zweiten Graphik die entsprechenden Wellenfunktionen für die ersten angeregten Zustände.
Technische Hinweise: In Mathematica kann das Kronecker-Symbol verwendet werden, der Befehl lautet `KroneckerDelta[m,n]`. Die Eigenvektoren werden in Mathematica als Zeilen einer Matrix ausgegeben; es muß also bei Bedarf noch transponiert werden, siehe Hilfe zu `Eigensystem`.