Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I
Übungsblatt Nr. 3, 25.11.2009

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 2.12.2008

Aufgabe 5: Drei-Zustands-Raum
Betrachten Sie einen drei-dimensionalen Zustandsraum. Für einen Satz von orthonormalen Kets $(|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle)$ als Basis werden die Operatoren A und B dargestellt durch

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix}$$

mit reellen Parametern a und b.

a) Es ist leicht zu zeigen, dass das Spektrum von A, d.h. die Menge der Eigenwerte von A, entartet ist. Berechnen Sie das Spektrum von B. Zeigt es eine Entartung?

b) Zeigen Sie, dass A und B vertauschen

c) Finden Sie einen gemeinsamen Satz von Eigenvektoren von A und B und ihre Eigenwerte. Werden die Eigenvektoren eindeutig charakterisiert durch ihre Eigenwerte?

Aufgabe 6: Operatoren und Basiswechsel
Für einen unitären Operator gilt: $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$.

a) Zeigen Sie, dass die Eigenwerte eines unitären Operators U komplexe Zahlen mit dem Absolutbetrag 1 sind.

b) Bleibt ein hermitescher Operator A hermitesch nach einer unitären Transformation?

c) Zwei Operatoren A und B vertauschen, d.h. $[A, B] = 0$. Zeigen Sie, dass die beiden Operatoren nach einer unitären Transformation immer noch vertauschen.

d) Konstruieren Sie die Basiswechselmatrix, die die zu S_z diagonale Basis $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ mit der zu S_x diagonalen Basis verbindet. Zeigen Sie, dass das Ergebnis konsistent ist mit der allgemeinen Beziehung

$$U = \sum_r \left| b^{(r)} \right\rangle \left\langle a^{(r)} \right| .$$

Berechnen Sie die Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

in der neuen Basis und vergleichen Sie sie mit den ursprünglichen Matrizen.