



## Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I Übungsblatt Nr. 2, 13.11.2012

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 22.11.2012

---

### Aufgabe 3: Spin $\frac{1}{2}$ Zustände

Benutzen Sie die Orthonormalität der Spin-auf  $|\uparrow\rangle$  und Spin-runter  $|\downarrow\rangle$  Zustände, d.h.

$\langle\uparrow|\uparrow\rangle = 1 = \langle\downarrow|\downarrow\rangle$  und  $\langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0 = \langle\downarrow|\uparrow\rangle$ ,

um die Vertauschungsregeln

$$[S_i, S_j] = S_i S_j - S_j S_i = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} S_k, \quad (1)$$

und die Anti-Vertauschungsregeln

$$\{S_i, S_j\} = S_i S_j + S_j S_i = \frac{\hbar^2}{2} \delta_{ij}, \quad (2)$$

die Spin-Operatoren  $S_i$  zu beweisen, wobei die Spin-Operatoren gegeben sind durch

$$S_x = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|) \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$S_y = \frac{i\hbar}{2} (-|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|) \equiv \frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Beachten Sie: Der total anti-symmetrische Levi-Civita Tensor  $\varepsilon_{ijk}$  wird definiert mit Hilfe der Einheits-Basisvektoren  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$  eines rechtshändigen kartesischen Koordinatensystems

$$\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j = \sum_k \varepsilon_{ijk} \mathbf{e}_k, \quad (6)$$

d.h.

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 0 & \text{mindestens zwei Indices sind gleich} \\ 1 & \text{ijk ist gerade Permutation von 123} \\ -1 & \text{ijk ist ungerade Permutation von 123} \end{cases} \quad (7)$$

**Hinweis:** Es reicht, wenn Sie die unterschiedliche Fälle in den Gleichungen (1) und (2) jeweils für ein Paar von Indizes (z.B.  $(i, j) = (1, 1), (1, 2)$  und  $(2, 1)$ ) zeigen, da die anderen Fälle durch zyklische Permutation der Indizes  $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$  erzeugt werden.

bitte wenden

#### Aufgabe 4: Unbestimmtheitsrelation

a) Berechnen Sie

$$\langle (\Delta S_x)^2 \rangle \equiv \langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2,$$

wobei die Erwartungswerte bezüglich des Zustandes  $|S_z, +\rangle$  genommen werden. Benutzen Sie das Ergebnis, um die Unbestimmtheitsrelation

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

zu überprüfen mit  $A = S_x$  und  $B = S_y$ .

b) Überprüfen Sie die Unbestimmtheitsrelation mit  $A = S_x$  und  $B = S_y$  für den Zustand  $|S_x, +\rangle$ .

**Hinweis:** Der Eigenzustand für der Operator  $S_x$  zum Eigenwert  $+\hbar/2$  ist gegeben durch

$$|S_x, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$$

#### 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  $b$ .

- 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?
- Zeigen Sie, dass  $A$  und  $B$  vertauschen
- Finden Sie einen gemeinsamen Satz von Eigenvektoren von  $A$  und  $B$  und ihre Eigenwerte. Werden die Eigenvektoren eindeutig charakterisiert durch ihre Eigenwerte?