ulm university universität ulm

Prof. Dr. Axel Groß
Institut für Theoretische Chemie

Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I
Übungsblatt Nr. 2, 08.11.2016

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
    http://www.uni-ulm.de/theochem/
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 17.11.2016

Aufgabe 2: 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

$$[S_i, S_j] = S_iS_j - S_jS_i = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} S_k, \tag{1}$$

und die Anti-Vertauschungsregeln

$$\{S_i, S_j\} = S_iS_j + S_jS_i = \frac{\hbar^2}{2}\delta_{ij}, \tag{2}$$

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

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

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

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

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

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

d.h.

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

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 $1 \to 2 \to 3 \to 1$ erzeugt werden.

bitte wenden

Aufgabe 3: 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

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

Aufgabe 4: 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?