



Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I Übungsblatt Nr. 2, 05.11.2019

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 14.11.2019

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

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

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 .

- 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?

Aufgabe 5: Operatoren und Basiswechsel

Für einen unitären Operator gilt: $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$.

- Zeigen Sie, dass die Eigenwerte eines unitären Operators U komplexe Zahlen mit dem Absolutbetrag 1 sind.
- Bleibt ein hermitescher Operator A hermitesch nach einer unitären Transformation?
- Zwei Operatoren A und B vertauschen, d.h. $[A, B] = 0$. Zeigen Sie, dass die beiden Operatoren nach einer unitären Transformation immer noch vertauschen.
- 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

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

Berechnen Sie die Pauli-Matrizen

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

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