Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I
Übungsblatt Nr. 3, 12.11.2008

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 26.11.2008

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

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

und die Anti-Vertauschungsregeln

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

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

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2}\left(|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|\right) & (3)\\ S_y &= \frac{i\hbar}{2}\left(-|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|\right) & (4)\\ S_z &= \frac{\hbar}{2}\left(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|\right) & (5) \end{aligned}$$

Beachte: 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.

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

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

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

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 $|S_x, +\rangle$.