Technische Universität Wien

Prof. K. Held, Prof. A. Toschi, Dr. J. Tomczak
Dr. A. Kauch

1. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2018/2019

TUTORIUM: Freitag, 12.10.2018.

1. Lineare Algebra

1+2+1+1=5 Punkte

In der Quantenmechanik wird man sehr oft mit dem Problem der Diagonalisierung von Matrizen konfrontiert. Beispielsweise könnte eine stationäre Schrödinger-Gleichung in einer diskreten Basis wie folgt aussehen (in dimensionslosen Einheiten)

$$H\Psi_j = E_j \Psi_j \tag{1}$$

mit

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2}$$

a) Diagonalisieren Sie die Matrix H, d.h. berechnen Sie deren Eigenwerte und Eigenvektoren.

b) Berechnen Sie die Matrix e^{-iHt} und zeigen Sie, dass für einen beliebigen konstanten Vektor Ψ_0 der Vektor

$$\Psi(t) = e^{-iHt}\Psi_0 \tag{3}$$

die (zeitabhängige) Schrödinger-Gleichung

$$i\frac{d}{dt}\Psi(t) = H\Psi(t) \tag{4}$$

erfüllt ($\hbar \equiv 1$). Dabei bezeichnet i die komplexe Einheit und d/dt die Zeitableitung.

c) Sind die Matrizen H und e^{-iHt} hermitesch ($A^\dagger = A$) bzw. unitär ($A^\dagger A = \mathbb{1}$)?

d) Welche Forderungen an die Eigenwerte λ_j (mit Beweis) und die Eigenbasis Ψ_j(ohne Beweis) implizieren die Eigenschaften hermitesch bzw. unitär einer Matrix A?

2. Hund'sche Kopplung

1+1+1+1+1=5 Punkte

In der Festkörperphysik können wir uns oft auf ein relativ enges Energiefenster einschränken. Dadurch reduziert sich die Anzahl der relevanten Freiheitsgrade und mit einem relativ einfachen Modell lässt sich ein Teil der Physik verstehen. Als Beispiel betrachten wir ein System aus zwei Elektronen in zwei Orbitalen eines Atoms in einem Kristallfeld. Die Energien der Orbitalen sind entartet (haben den gleichen Wert). Die Elektronen beschreiben wir durch zwei wechselwirkende Spins. Jeder der beiden Spins kann die Werte $\pm\hbar/2$ annehmen. Wir betrachten die Basis

$$\{|\uparrow,\uparrow\rangle, |\uparrow,\downarrow\rangle, |\downarrow,\uparrow\rangle, |\downarrow,\downarrow\rangle\},$$

wobei $|\uparrow,\downarrow\rangle$ den Zustand beschreibt, in dem das Teilchen in Orbital 1 in positive z-Richtung polarisiert ist und das in Orbital 2 in negative z-Richtung usw. Wie wir später in der Vorlesung noch feststellen werden, kann der quantenmechanische Hamilton-Operator dafür in Form der Matrix

$$H = J \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{5}$$

geschrieben werden. Dabei ist J eine als bekannt angenommene Konstante. Die folgenden Teilaufgaben lassen sich nur durch mathematische Rechnungen beantworten. Mehr physikalisches Verständnis werden wir uns noch in der Vorlesung und folgenden Übungen erarbeiten.

a) Finden Sie die Eigenwerte E_j und Eigenvektoren $|\Psi_j\rangle$ des Systems. (d. h. der Matrix H)

b) Berechnen sie außerdem ausgehend von der Schrödinger-Gleichung für dieses Modell (Gleichung (4) in Aufgabe 1) die Zeitentwicklung der Eigenvektoren, d.h. $|\Psi(t)\rangle$ für $|\Psi(t=0)\rangle = |\Psi_j\rangle$, $j = 1...4$.

c) Finden Sie die Zeitentwicklung des Zustandes $\Psi(t=0) = (0,0,1,0)^T$.

d) Für die Quantenmechanik spielen Kommutatorrelationen zwischen Operatoren, welche physikalische Observablen beschreiben, eine große Rolle. Berechnen Sie den Kommutator zwischen H und den folgenden Operatoren

$$\sigma_2^y = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2^z = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

die die Projektionen des Spins in Orbital 2 auf die y- und z-Richtung beschreiben.

e) Berechnen Sie die Wirkung des folgenden Operators

$$\sigma_{total}^z = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

der die Projektion des Gesamtspins auf z-Richtung beschreibt, auf die Eigenzustände (Eigenvektoren) $|\Psi_j\rangle$ des Systems. Wie können Sie das Ergebnis physikalisch interpretieren?