Technische Universität Wien

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

7. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2018/2019

<u>TUTORIUM</u>: Freitag, 7.12.2018.

17. Kommutationsrelationen für Spins

1+1+0.5+1.5=4 Punkte

Die Spin-Operatoren sind durch

$$S_x = \frac{\hbar}{2}(|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|), \quad S_y = \frac{\hbar}{2}(-i|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + i|\downarrow\rangle\langle\uparrow|), \quad S_z = \frac{\hbar}{2}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) \tag{1}$$

gegeben (siehe Aufgabe 14).

a) Berechnen Sie den Kommutator $[S_i, S_j]$, mit $i, j \in \{x, y, z\}$. Was fällt Ihnen auf?

b) Benutzen Sie das Ergebnis aus **a)**, um den Kommutator $[S_i, S^2]$ zu berechnen, wobei $i \in \{x, y, z\}$ und $S^2 \equiv \vec{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$.

c) Geben Sie die Heisenbergsche Unschärferelation für $\Delta S_x \Delta S_y$ an und werten Sie diese für $|\psi_1\rangle = |\uparrow\rangle$ sowie $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - i|\downarrow\rangle)$ aus.

d) Berechnen Sie auch ΔS_x und ΔS_y explizit für $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ aus **c)** und vergleichen Sie das Ergebnis mit der Heisenbergsche Unschärferelation. Wie groß ist der Erwartungswert des Antikommutators $|\langle\psi|\{S_x, S_y\}|\psi\rangle|^2$ sowie

$$\frac{|\langle S_x\psi|S_y\psi\rangle|^2}{\langle S_x\psi|S_x\psi\rangle\langle S_y\psi|S_y\psi\rangle}$$

für $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle$. Was können Sie damit für die Heisenbergsche Unschärferelation sagen? (*Antikommutator:* $\{A, B\} = AB + BA$)

18. Hundsche Kopplung

1+1+2+2=6 Punkte

Wir betrachten ein System aus zwei Elektronen in zwei Orbitalen eines Atoms in einem Kristallfeld (siehe Übung 1, Aufgabe 2). 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. Der Hamiltonian dieses Systems ist durch

$$H = -J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = -J\left((S_x)_1 \otimes (S_x)_2 + (S_y)_1 \otimes (S_y)_2 + (S_z)_1 \otimes (S_z)_2\right).$$

gegeben, wobei $(...)_{1(2)}$ die Wirkung auf das Teilchen in Orbital 1 (2) beschreibt. Die Spin-Operatoren sind in Aufgabe 17 gegeben.

a) Bestimmen Sie die Hamilton-Matrix in der obigen Basis. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der 2. Aufgabe, 1. Übungsblatt. Sie haben die Eigenwerte E_n und Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ dieses Systems als Funktion von J schon damals gefunden. Jetzt betrachten wir das Ergebnis in Abhängigkeit von J. Im Fall $J > 0$ (und $J < 0$): was ist der Grundzustand? Ist er entartet?

b) Ergänzen Sie H um weitere Operatoren bis Sie eine vSkO haben. Hinweis: siehe Aufgabe **2e)**, 1. Übungsblatt.

c) Wir nennen: $S_{z,1} \equiv (S_z)_1 \otimes (\mathbb{1})_2$ und $S_{z,2} \equiv (\mathbb{1})_1 \otimes (S_z)_2$. (Diese Notation bedeutet, $S_{z,\alpha}$ wirkt nur auf das Teilchen in Orbital α). Zeigen Sie, dass für einen beliebigen Produkt-Zustand der Form $|\phi\rangle = |\phi_1\rangle|\phi_2\rangle$, die Korrelationsfunktion

$$C(S_{z,1}, S_{z,2}) \equiv \langle S_{z,1} S_{z,2}\rangle - \langle S_{z,1}\rangle\langle S_{z,2}\rangle$$

verschwindet, d.h. $|\phi\rangle$ ist in den Unterräumen 1,2 unkorreliert. Berechnen Sie den Wert von $C(S_{z,1}, S_{z,2})$ für den Grundzustand für $J < 0$ und zeigen Sie damit, dass sich dieser nicht als Produkt schreiben lässt.

d) Gehen Sie jetzt von der Wellenfunktion

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\alpha|\uparrow,\uparrow\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}\alpha|\downarrow,\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\beta|\uparrow,\downarrow\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}\beta|\downarrow,\downarrow\rangle$$

aus. Ist $|\psi\rangle$ korreliert? Wenn nein, geben Sie den Produktzustand an. Berechnen Sie $|\psi(t)\rangle$ und bestimmen Sie $\langle S_{x,1}\rangle(t)$.