Technische Universität Wien

Prof. K. Held, Prof. A. Toschi
Dr. A. Kauch, Priv.-Doz. J. Tomczak

1. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2021/2022

TUTORIUM: Freitag, 15.10.2021.

1. Lineare Algebra

1+2+1=4 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: Was sind ihre Eigenwerte E_j und Eigenvektoren Ψ_j?

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 ($A^\dagger A = \mathbb{1}$)?

2. Wiederholung: Analytische Mechanik

1+1+1=3 Punkte

Die Beschreibung der klassischen (analytischen) Mechanik durch Poisson Klammern weist frapierende strukturelle (algebraische) Gemeinsamkeiten mit dem Operatorformalismus der Quantenmechanik auf. Für differentierbare Funktionen $A(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, $B(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ ist die Poissonklammer definiert durch

$$\{A, B\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i} \right) \tag{5}$$

wobei q_i und p_i Komponenten der verallgemeinerten Koordinate bzw. des Impulses sind. Die Bewegungsgleichung für $A(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ lässt sich dann vermöge $dq_i/dt = \partial H/\partial p_i$ und $dp_i/dt =$

$-\partial H/\partial q_i$ schreiben als: $\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$, wobei H die Hamilton Funktion ist (siehe Analytische Mechanik).

a) Berechnen Sie die fundamentalen Poisson Klammern $\{q_i, q_j\}$, $\{p_i, p_j\}$ und $\{q_i, p_j\}$.

b) Gegeben sei ein freies Teilchender Masse m, welches sich entlang der Koordinate x bewege. Zeigen Sie, dass $F(x, p, t) = x - pt/m$ eine Konstante der Bewegung ist.

c) Zeigen Sie: Wenn eine Größe F Erhaltungsgröße ist, so ist auch $\partial F/\partial t$ eine Konstante der Bewegung. Wir setzen hierbei voraus, dass die Hamilton Funktion zeitunabhängig ist.

3. Hund'sche Kopplung

1+1+1=3 Punkte

Die aus der Chemie bekannte Hund'sche Regel besagt, dass Orbitale gleicher Energie zuerst mit Elektronen parallelen Spins gefüllt werden. Als Beispiel betrachten wir ein Modell aus zwei wechselwirkenden Elektronen in zwei entarteten Orbitalen (d.h. ihre Energien haben den gleichen Wert). Die Elektronen nähern wir an durch zwei wechselwirkende Spins, welche beide die Werte $\pm\hbar/2$ annehmen können. Wir betrachten die folgende Basis $|\Phi_j\rangle$ $(j = 1...4)$

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

wobei $|\uparrow,\downarrow\rangle$ den Zustand bezeichnet, in dem das Teilchen in Orbital 1 in positive z-Richtung polarisiert ist und jenes in Orbital 2 in negative z-Richtung usw. Der quantenmechanische Hamilton-Operator, den wir betrachten wollen, kann in Form der Matrix

$$H = -J \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{6}$$

geschrieben werden. Dabei ist $J > 0$ eine als bekannt angenommene Konstante. Die folgenden Teilaufgaben lassen sich durch mathematische Rechnungen beantworten. Ein physikalisches Verständnis für dieses System werden wir uns evtl. in 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 $|\Psi(t = 0)\rangle = (0, 0, 1, 0)^T$.