Technische Universität
Wien

Prof. Dr. K. Held
Prof. Dr. A. Toschi, Dr. J. Tomczak
Dipl.-Ing. G. Rohringer, Dipl.-Ing. T. Schäfer

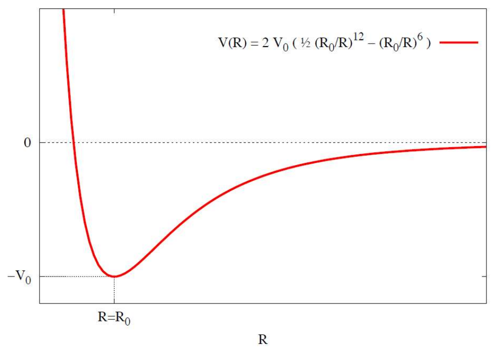
4. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2013/2014

<u>TUTORIUM</u>: Freitag, 08.11.2013.

7. Molekülschwingungen *3 Punkte*

Die Wechselwirkungen eines einfachen Moleküls mit zwei Atomen gleicher Masse M im Abstand R voneinander können wie folgt modelliert werden: für kleine Abstände $R \ll R_0$ tritt augrund der Überlappung der elektronischen Wellenfunktionen eine stark repulsive Kraft auf, während für große Abstände $R \gg R_0$ die Kraft aufgrund der van-der-Waals-Wechselwirkung attraktiv wird. Diese Überlegungen führen auf das folgende Modellpotential (Lennard-Jones Potential):



$$V(R) = 2V_0 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{R_0}{R} \right)^{12} - \left(\frac{R_0}{R} \right)^6 \right] \tag{1}$$

Figure 1: Lennard-Jones Potential.

Betrachten Sie für die Beschreibung von Molekülschwingungen das Relativkoordinatensystem mit dem Lennard-Jones Potential und berechnen Sie approximativ die Energien des Grundzustands und der ersten zwei angeregten Zustände der Schwingungen dieses Moleküls.

8. Rechnungen mit Erzeugern und Vernichtern *0.5+0.5+2.0=3 Punkte*

Analog zum Plenum betrachten Sie ein Teilchen der Masse m in einem harmonischen Oszillator, dessen Wellenfunktion zum Zeitpunkt $t = 0$ durch

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{C}(1 + i(a^\dagger)^2 - e^{i\phi}a + ia^\dagger a + aa^\dagger)\psi_0 \tag{2}$$

gegeben ist. a und $a^\dagger$ stellen die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (Leiteroperatoren) und ψ_0 die Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators dar.

a) Berechnen Sie C, sodass die Wellenfunktion normiert ist.

b) Bestimmen Sie die Zeitentwicklung und die Wahrscheinlichkeitsverteilung des obigen Zustands.

c) Bestimmen Sie mithilfe der Leiteroperatoren die Größen Ortserwartungswert $\langle x \rangle (t)$, Impulserwartungswert $\langle p \rangle (t)$, $\langle x^2 \rangle$(t), $\langle p^2 \rangle$(t) sowie die Orts- und Impulsunschärfe $\Delta x(t)$ und $\Delta p(t)$ für obigen Zustand bei beliebigen Zeiten t. Ist die Heisenbergsche Unschärferelation erfüllt? Sind die klassischen Bewegungsgleichungen erfüllt?

9. Rattling Modes in Clathraten

1+1+1+1=4 Punkte

Thermoelektrische Materialien besitzen die Eigenschaft, bei Anlegen eines Temperaturgradienten elektrische Spannung zu generieren. Eine in dieser Hinsicht aussichtsreiche Materialklasse stellen die Clathrate dar (siehe auch A. Prokofiev et al., "Thermopower enhancement by encapsulating cerium in clathrate cages"[1]), in welchen in einem "Käfig" aus Hostatomen H Gastatome G eingeperrt werden (siehe Fig. 2).

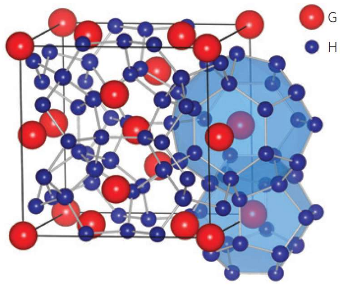


Figure 2: Typische Clathratanordnung. Im konkreten Beispiel nehmen wir als Gastatom dreifach positiv geladenes Ce^{3+} an. Abbildung aus Nature Materials[1].

Betrachten Sie nun einen einzelnen Clathrat-Käfig. Für das konkrete Beispiel nehmen wir als Gastatom dreifach positiv geladenes Cer Ce^{3+} der Masse m an. Des Weiteren approximieren wir den Käfig der Hostatome durch ein harmonisches Potential mit typischer Frequenz ω und behandeln das Problem der Einfachheit halber eindimensional.

a) Geben Sie den Hamiltonoperator für obiges System an. Wenn eine thermoelektrische Spannung erzeugt wird, ist der Käfig einem externen elektrischen Feld E ausgesetzt. Wie lautet der Hamiltonoperator im elektrischen Feld?

b) Berechnen Sie die Energie-Eigenwerte des Systems mit und ohne elektrisches Feld.

c) Geben Sie die (unnormierte) Wellenfunktion des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands an.

d) Berechnen Sie zu den Wellenfunktionen aus c) die Erwartungswerte $\langle x \rangle$ und $\langle p \rangle$.

[1]Nature Materials 2013, http://dx.doi.org/10.1038/nmat3756