

---

## 4. Übung zur Quantenmechanik I

---

Wintersemester 2016/2017

**TUTORIUM: Freitag, 4.11.2016.**

### 7. Rattling Modes

1+2+1=4 Punkte

Ein Rattling Atom befindet sich im ersten angeregten Zustand  $\psi_1$  des harmonischen Oszilators mit Frequenz  $\omega$  und Masse  $m$ . Durch die Wechselwirkung mit dem elektronischen System hat man eine kurze Zeit  $t$  später den Zustand

$$e^{-iHt/\hbar}\psi_1 \sim [1 - iHt/\hbar]\psi_1 = \left[1 - i\hbar\omega \left(a^\dagger a + 1/2\right) t/\hbar - ig \left(a^\dagger + a\right) \bar{n}_e t\right] \psi_1 := \psi(t),$$

wobei  $\bar{n}_e$  hier approximativ die zeitlich gemittelte Elektronendichte ist und  $g$  die Elektron-Phonon-Kopplung darstellt.  $a$  und  $a^\dagger$  sind die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (Leiteroperatoren).

- Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $|\psi(x)|^2$  des obigen Zustands.
- Berechnen Sie mithilfe der Leiteroperatoren: Ortserwartungswert  $\langle x \rangle$ , Impulserwartungswert  $\langle p \rangle$ ,  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$  sowie die Orts- und Impulsunschärfen  $\Delta x$  und  $\Delta p$  mit obigem Zustand  $\psi(t)$ . Ist die Heisenbergsche Unschärferelation erfüllt?
- Ist  $\psi(t)$  normiert? Überlegen Sie zu welcher Ordnung in  $t$  Ihre Rechnung in a) und b) sinnvoll ist.

### 8. Rechnungen mit Erzeugern und Vernichtern

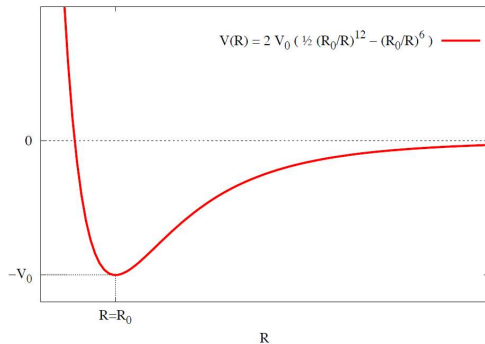
2 Punkte

Zwischen welchen Eigenzuständen  $\psi_n$  des harmonischen Oszilators sind die Matrixelemente von  $x^3$ ,  $p^3$ ,  $x^4$  und  $p^4$  nicht null?

## 9. Molekülschwingungen

2+2=4 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 aufgrund 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):



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

Abbildung 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.
- Schätzen Sie, wie groß die Korrekturen höherer Ordnung in  $R - R_0$  zu im Aufgabenteil a) berechneten Energien sind. Unter welchen Bedingungen sind die Abschätzungen von a) eine gute Näherung?