Technische Universität Wien

Prof. K. Held, Prof. A. Toschi , Dr. J. Tomczak
Dr. A. Kauch , DI T. Ribic

6. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2016/2017

TUTORIUM: Freitag, 18.11.2016.

12. Basistransformationen

1+1=2 Punkte

Gehen Sie vom Hamilton-Operator des harmonischen Oszilators im Ortsraum aus:

$$H = -\frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \tag{1}$$

Dabei bezeichnet ∂_x die Ableitung d/dx.

a) Transformieren Sie den Hamilton-Operator explizit in den Impuls-Raum, d.h. berechnen Sie zunächst $\langle p'|x|p\rangle$ und unter Verwendung des Resultates $\langle p|H|p'\rangle$. Was fällt Ihnen an der Struktur des Operators auf?

b) Geben Sie Eigenenergien und Eigenfunktionen des Operators im Impulsraum an.

13. Benzen-Ring

2+2=4 Punkte

Ein Benzen Molekül, bestehend aus 6 Kohlenstoff-Atomen und 6 Wasserstoff-Atomen bildet eine 6-eckige Grundform. Vereinfacht kann der Hamilton Operator für die besonders relevanten p_z-Orbitale mit niedrigen Anregungsenergien in einer diskreten, orthonormalen Basis geschrieben werden: $|\Psi_l\rangle$ bezeichnet ein p_z-artiges Orbital am l-ten Kohlenstoff-Atom. Der Hamilton-Operator in dieser Basis lautet:

$$H = \sum_{l=1}^{N} |\Psi_l\rangle \varepsilon \langle\Psi_l| + \sum_{l=1}^{N} |\Psi_{l+1}\rangle t \langle\Psi_l| + |\Psi_l\rangle t \langle\Psi_{l+1}|, \tag{2}$$

dabei ist $N = 6$ die Anzahl an Orbitalen in der Basis. Wir haben periodische Randbedingungen $|\Psi_{N+1}\rangle = |\Psi_1\rangle$. ε ist die on-site Energie und $t = \langle\Psi_{l+1}| \left(\frac{p^2}{2m} + V\right) |\Psi_l\rangle$ das sogenannte Hopping-Integral. Die Werte dürfen als bekannt angenommen werden.

a) Schreiben Sie die Matrix-Darstellung des Hamilton-Operators und der Schrödinger-Gleichung explizit in der Basis der $|\Psi_l\rangle$ an.

b) Bestimmen Sie die Eigenzustände und Eigenenergien des Systems. Führen Sie dazu eine Transformation in die Basis der $|\Phi_k\rangle$ durch, wobei

$$|\Phi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^{N} e^{2\pi i\, kl/N} |\Psi_l\rangle. \tag{3}$$

Dabei nimmt k Werte zwischen 1 und N an.

14. Messungen an einem Spin

1+1+2=4 Punkte

In der Vorlesung werden wir nächste Woche den Messprozess noch eingehender behandeln. Wir betrachten hier einen einzelnen Spin, der einem Magnetfeld B ausgesetzt wird. Wir möchten Messungen an dem System vornehmen. In der z-Basis für den Spin

$$|\uparrow\rangle \widehat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \; |\downarrow\rangle \widehat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

lautet der dazugehörige Hamilton-Operator:

$$H = g\hbar\mu_B B \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{5}$$

Weiters betrachten wir noch die hermitischen Operatoren:

$$\sigma_x = \hbar/2 \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \hbar/2 \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z = \hbar/2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{6}$$

Wir werden in der Vorlesung noch sehen, dass diese Operatoren dem Spin in x-, y- und z-Richtung entsprechen.

a) Bestimmen Sie die prinzipiell möglichen Messwerte von σ_x, σ_y und σ_z.

b) Das System befindet sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Grundzustand. Eine Messung von σ_x wird vorgenommen. Was sind die möglichen Messwerte und die Wahrscheinlichkeiten diese zu messen.

c) Angenommen in **b)** wurde $+\hbar/2$ gemessen, wie lautet die Wellenfunktion unmittelbar nach der Messung? Berechnen Sie die möglichen Messwerte und zugehörigen Wahrscheinlichkeiten für eine spätere Messung von σ_x, σ_y und σ_z zum Zeitpunkt $t > 0$.