Technische Universität Wien

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

5. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2018/2019

<u>TUTORIUM</u>: Freitag, 16.11.2018.

11. Zwei-dimensionaler harmonischer Oszillator *1+0.5+1+1=3.5 Punkte*

Betrachten Sie ein Teilchen in einem 2-dimensionalen harmonischen Potential

$$V(x, y) = \frac{1}{2} m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m\omega_y^2 y^2 \tag{1}$$

mit $\omega_y = 2\omega_x$.

a) Geben Sie die Eigenzustände der stationären Schrödingergleichung sowie die dazugehörigen Eigenenergien für dieses Problem an. Die Eigenzustände des eindimensionalen harmonischen Oszillators $\psi_n(x/x_0)$, mit $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_x}$, können Sie als bekannt annehmen.

b) Ist der Grundzustand entartet? Sind die ersten vier angeregte Zustände, d.h. die Eigenfunktionen zu den vier (nach dem Grunzustand) kleinsten Energien, entartet?

c) Zur Zeit $t = 0$ befindet sich das Teilchen in einem Mischzustand

$$|\psi(t = 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + i|e\rangle),$$

wobei $|g\rangle$ und $|e\rangle$ den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand beschreiben. Welche möglichen Messwerte können Sie bei einer Messung der Energie für den obigen Zustand erhalten? Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit für eine Messung für jede einzelne dieser Möglichkeiten? Berechnen Sie den Energieerwartungswert.

d) Geben Sie die Zeitentwicklung des obigen Zustands an und die Erwartungswerte von Energie, x und p_y zur Zeit $t > 0$.

12. Basistransformationen I *0.5+0.5=1 Punkte*

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

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

a) Transformieren Sie den Hamilton-Operator explizit in den Impuls-Raum, d.h. zeigen Sie zunächst, wie in der Vorlesung angedeutet, daß $\langle k'|x|k\rangle = i\delta(k-k')\frac{\partial}{\partial k}$ und unter Verwendung dieses Resultats $\langle k|H|k'\rangle$. Was fällt Ihnen an der Struktur des Operators auf?

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

13. Basistransformationen II und Messung *1+1+1+1.5+1=5.5 Punkte*

Wir betrachten ein drei-Niveau System, das z.B. in Festkörperphysik ein einfaches Modell für drei Wasserstoff-Ad-Atome auf einer Oberfläche sein kann. Wenn wir uns auf die 1s Orbitale beschränken, wird der dreidimensionale Hilbertraum durch drei orthonormierte Basiszustände $|1\rangle$, $|2\rangle$ und $|3\rangle$ aufgespannt. Wenn zwei Atome nah zueinander sind ist das Hüpfen zwischen denen möglich und die Niveaus $|2\rangle$ und $|3\rangle$ sind durch ein Hüpf-Integral t gekoppelt. Der Hamiltonoperator des Systems ist in Dirac-Notation damit durch

$$H = \epsilon_1 |1\rangle\langle 1| + \epsilon_2 |2\rangle\langle 2| + \epsilon_3 |3\rangle\langle 3| + t|2\rangle\langle 3| + t|3\rangle\langle 2| \tag{3}$$

gegeben, und wir betrachten zuerst $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = -t$.

a) Geben Sie die Matrixdarstellung des obigen Hamilton-Operators in der Basis $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ an. Finden Sie die Eigenwerte E_n und Eigenzustände $|v_n\rangle$ des Systems.

Das System befindet sich im Zustand

$$|\psi\rangle = -\frac{2i}{3}|1\rangle + \frac{2}{3}|2\rangle + \frac{1}{3}|3\rangle$$

b) Geben Sie die unitäre Transformation U in Dirac Notation an, die von der Basis $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ in die Eigenbasis von H transformiert. Entwickeln Sie $|\psi\rangle$ in der Basis der Eigenfunktionen von H, $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle\}$.

c) Welche möglichen Messwerte können Sie bei einer Messung der Energie für den obigen Zustand erhalten? Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit für eine Messung für jede einzelne dieser Möglichkeiten? Berechnen Sie den Energieerwartungswert des Zustands $|\psi\rangle$.

d) Welche möglichen Messwerte können Sie bei einer Messung der Observable

$$\hat{A} = i|2\rangle\langle 3| - i|3\rangle\langle 2|$$

für den obigen Zustand erhalten? (*Hinweis: suchen Sie zunächst die Eigenwerte und Eigenzustände von $\hat{A}$. Danach entwickeln Sie $|\psi\rangle$ in der Basis der Eigenfunktionen von $\hat{A}$.*) Geben Sie die möglichen Messwerte mit deren Wahrscheinlichkeiten an. Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle \hat{A} \rangle$.

e) Durch eine kleine Änderung der Umgebung von Atom 3 (z.B. durch ein AFM-Tip der sich dem Atom nähert), ändert sich ϵ_3 von $-t$ auf $-\alpha t$. Geben Sie die Matrixdarstellung des Hamilton-Operators H_1, der durch H mit $\epsilon_1 = \epsilon_2 = -t$ und $\epsilon_3 = -\alpha t$ gegeben ist, in der bereits gefundenen Eigenbasis aus **b)**, $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle\}$, an.