Technische Universität Wien

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

3. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2021/2022

<u>TUTORIUM</u>: Freitag, 29.10.2021.

7. Addendum: Streuung an δ-Potential *1 Punkte*

Gegeben Sei der Hamiltonian aus Aufgabe 6: $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \alpha\delta(x)$ mit $\alpha < 0$. Wir betrachten nun die stationäre Schrödingergleichung $H\psi(x) = E\psi(x)$ für Streuzustände, d.h. $E > 0$.

a) Berechnen Sie den Transmissionskoeffizienten für ein von links einfallendes Teilchen der Masse m, welches durch eine ebene Welle e^{ikx} beschrieben sein soll. Deckt sich Ihr Ergebnis mit der klassischen Erwartung?

8. Zeitentwicklung eines Zustands im Potential des harmonischen Oszillators *1+1+2+1=5 Punkte*

Wir betrachten ein Teilchen in einem harmonischen Oszillator dessen Wellenfunktion bei $t = 0$ durch den Mischzustand

$$\psi(x, t = 0) = \alpha \left[\frac{2}{5}\psi_0(x) + \frac{2}{5}\psi_1(x) - \frac{i}{5}\psi_2(x) \right]$$

beschrieben wird, wobei $\psi_n(x)$ den n-ten angeregten Zustand bezeichnet, und wir $\alpha \in C$ annehmen.

a) Normieren Sie ψ, d.h. bestimmen Sie die Konstante α.

b) Bestimmen Sie die Zeitentwicklung des Zustands, d.h. $\psi(x, t)$.

c) Bestimmen die zeitabhängigen Erwartungswerte $\langle x\rangle(t)$, $\langle p\rangle(t)$, und $\langle x^2\rangle(t)$. Ist die "klassische" Bewegungsgleichung $\langle p\rangle(t) = m\,\frac{d}{dt}\langle x\rangle(t)$ erfüllt?

d) In der Vorlesung haben Sie die Operatoren $a^\dagger$ und a kennenlernen. Bestimmen Sie die obigen Erwartungswerte noch einmal mit der Hilfe dieser Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

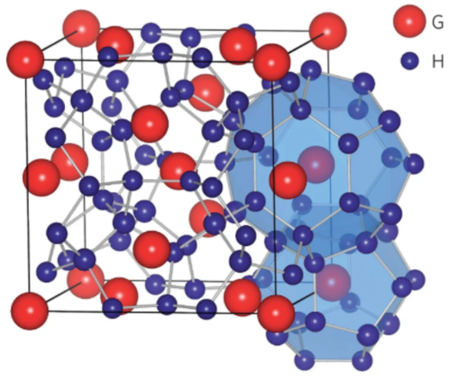

Abbildung 1: Kristallstruktur der Clathraten, aus Prokofiev *et al.* Nature Materials 12, 1096 (2013) `https://www.nature.com/articles/nmat3756`. Im konkreten Fall handelt es sich bei "G" um dreifach positiv geladenes Cer, Ce^{3+}.

9. Rüttel-Moden in Clathraten

1+1+1+1=4 Punkte

Thermoelektrische Materialien besitzen die Eigenschaft, bei Anlegen eines Temperaturgradienten eine elektrische Spannung zu generieren. Eine in dieser Hinsicht aussichtsreiche Materialklasse sind die sogenannten Clathrate (siehe Abb. 1), in denen in einem Käfig aus Wirtsatomen ("H"ost) Gastatome "G" eingesperrt werden.
Betrachten Sie einen einzelnen Clathrat-Käfig. Wir nehmen ein Gastatom der Masse m an und nähern den Käfig der Wirtsatome durch ein eindimensionales harmonisches Potential mit der Frequenz ω.

a) Wie lautet der Hamiltonoperator für obiges System? Wenn eine thermoelektrische Spannung erzeugt wird, ist der Käfig einem externen Feld E ausgesetzt. Tragen Sie diesem durch einen Zusatzterm im Hamilton Operator Rechnung.

b) Berechnen Sie nun 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 $\langle p \rangle$.