Technische Universität
Wien

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

5. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2021/2022

TUTORIUM: Freitag, 12.11.2021.

13. Impulsdarstellung

1+1+1+1=4 Punkte

Gegeben sei der Hamilton-Operator des eindimensionalen harmonischen Oszillators im Ortsraum:

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

a) Berechnen Sie für den *ersten angeregten Zustand* die Varianz, $\langle\psi|(p - \langle\psi|p|\psi\rangle)^2|\psi\rangle$, des Impulsoperators vermöge der Wellenfunktion in der Ortsdarstellung $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$.

b) Berechnen Sie nun dieselben Erwartungswerte durch die Wellenfunktion in der Impulsdarstellung, $\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$, welche Sie durch eine Fouriertransformation aus $\psi(x)$ erhalten.

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

d) Geben Sie nun, auf Basis von **c)**, die Eigenenergien und Eigenfunktionen des Hamilton-Operators im Impulsraum an.

14. Basistransformationen und Messung

1+2+1+1+1=6 Punkte

Am Dienstag werden Sie in der Vorlesung Basistransformationen im Kontext der Quantenmechanik genauer studieren. Hier betrachten wir 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 nahe beieinander sind, ist es den Elektronen möglich, das Atom zu wechseln. Hier koppeln wir die Niveaus $|2\rangle$ und $|3\rangle$ durch einen solchen Prozess, der durch ein Hüpf-Integral t beschrieben ist. Der Hamiltonoperator des Systems in Dirac-Notation ergibt sich dann zu

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

Zunächst betrachten wir den Fall $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = -t$.

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 befinde sich nun im Zustand

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

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

Wie in der Vorlesung nächste Woche gezeigt wird, werden in der Quantenmechanik physkalische Observablen durch hermitesche Operatoren beschrieben. Wird eine *Messung* der Observablen $\hat{A}$ durchgeführt, so ist das Ergebnis ein Eigenwert a_n von $\hat{A}$. Für ein System, welches sich vor der Messung in einem Zustand $|\psi\rangle$ befindet, ist die Wahrscheinlichkeit, dass a_n gemessen wird, gegeben durch das Betragsquadrat des Überlapps $|\langle\phi_n|\psi\rangle|^2$, wobei $|\phi_n\rangle$ der Eigenzustand zum Eigenwert a_n von $\hat{A}$ ist.

c) Welche möglichen Messwerte können Sie bei einer Messung der Energie (Observable H) für den obigen Zustand (3) 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 transformieren Sie $|\psi\rangle$ in die Basis der Eigenfunktionen von $\hat{A}$.*) Geben Sie die möglichen Messwerte a_n und deren Wahrscheinlichkeiten p_n an. Berechnen Sie auch den Erwartungswert $\langle\hat{A}\rangle \equiv \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$. Machen Sie sich klar, dass dieser den Mittelwert einer Messung, d.h. $\langle\hat{A}\rangle = \sum_n p_n a_n$, angibt.

e) Durch eine kleine Änderung der Umgebung von Atom 3 (z.B. durch eine “atomic force microscopy”-Spitze, die sich dem Atom nähert), ändere sich ϵ_3 von $-t$ auf $-\alpha t$. Welche der Zustände $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle\}$ aus **a)** werden nun keine Eigenzustände mehr sein? Verifizieren Sie Ihre Antwort, indem Sie mit der unitären Transformation aus **b)** die Matrixdarstellung des Hamilton-Operators $\tilde{H}$ — der durch H aus (2) mit $\epsilon_1 = \epsilon_2 = -t$ und $\epsilon_3 = -\alpha t$ in der Basis $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ direkt gegeben ist — in der Eigenbasis $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle\}$ explizit angeben.