Theoretische Physik III
- Quantenmechanik (SoSe 2019) -

Übungsblatt 04 ($20 + \pi e + \pi^e$ Punkte)[1]

Ausgabe 29.04.19 – Abgabe 07.05.19 – Besprechung n.V.

Aufgaben mit Sternchen sind Klausurisomorph

▷ Aufgabe 1 (Tunneleffekt)* (8 Punkte)

Wir betrachten die Streuung an der Potentialbarriere

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases} \tag{1}$$

mit $V_0 > 0$.

(a) Mit welchen physikalischen Systemen kann ein derartiges Streuexperiment realisiert werden?

(b) Wie lautet die Streumatrix? Zeigen Sie, daß die Streumatrix unitär ist.

(c) Diskutieren Sie den Transmissionskoeffizienten als Funktion der Teilchenenergie. In welchem Parameterbereich ist der Transmissionskoeffizient näherungsweise exponentiell in der Breite der Barriere?

(d) Schauen Sie in Ihr Physikbuch, Stichwort "Tunnelmikroskopie". Entnehmen Sie typische Parameterwerte und berechnen den Wertebereich des Transmissionskoeffizienten.

Bemerkung: Die Aufgabe ist ein Klassiker der Quantenmechanik. Wer sie beherrscht hat etwas fürs Leben. Als kleine (nun ja …) Zusatzaufgabe (π Punkte) wäre noch die Orthogonalität und Vollständigkeit der Streulösungen zu zeigen.

▷ Aufgabe 2 (Doppelmuldenpotential)* (12 Punkte)

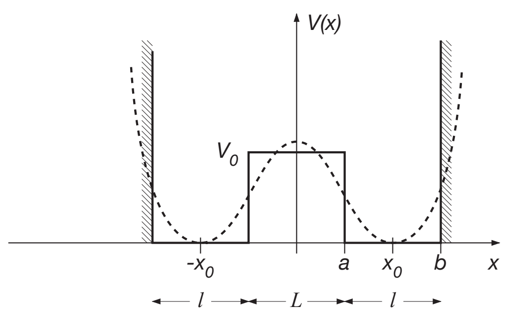
Das Ammnoniakmolekül NH_3 stellt man sich gerne als Pyramide vor mit den drei Wasserstoffatomen als Basis, und dem Stickstoff im Apex. Die drei Wasserstoffatome bilden eine Ebene P, die durch das Stickstoffatom führende Senkrechte zu dieser Ebene sei mit S bezeichnet. Die Lage des Stickstoffatoms auf der Geraden S wird mit der Koordinate x angegeben; der Wert $x = 0$ bezeichnet den Durchstosspunkt der Geraden S mit der Ebene P.

Die Abhängigkeit der potentiellen Energie des Ammnoniakmoleküls von der Konfigurationsvariablen x stellt sich folgendermaßen dar. In der Gleichgewichtslage $x = x_0 \approx 0.4$Angstrom hat das Potential ein Minimum. Für kleinere Werte wächst die potentielle Energie und nimmt für $x = 0$, wenn also das Stickstoffatom in der Basisebene liegt, ein lokales Maximum an. Wenn x negativ wird klappt das Molekül um "wie ein Schirm im

[1]Aufgaben mit transzendenter Punktezahl sind fakultative Nüsse. Nüsse sind bekanntlich nahrhaft …

Wind". Aus Gründen der Symmetrie erreicht das Molekül für $x = -x_0$ wieder eine stabile Gleichgewichtslage. Die beiden klassischen stabilen Konfigurationen des Ammoniakmoelküls heißen die R- und L-Konfiguration. Klassisch kann man das Molekül von der R- in die L-Konfiguration nur unter Aufbringung einer Energie $V_0 \approx 0.4$eV bringen. Quantenmechanisch reicht dafür – dank Tunneleffekt – viel weniger. Das Umklappen heißt in der Quantenchemie "Inversion". Da das Ammoniakmolekül polar ist, ist mit dem Umklappen ein oszillierendes Dipolmoment verknüpft: beim hin-und-her tunneln strahlt das Molekül, was im Ammoniak-Maser seine Anwendung findet.

Wir modellieren das Konfigurationspotential durch ein stückweise stetiges Doppelmuldenpotential, vgl Abbildung. Gestrichelt das "exakte Potential", durchgezogen das Modellpotential.



(a) Lösen Sie das Eigenwertproblem

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{2}$$

für das in Abb. skizzierte Modellpotential. Bestimmen Sie zunächst nur die Form der Eigenfunktionen und die transzendete Bestimmungsgleichung für die Eigenwerte.
<u>Hinweis:</u> Machen Sie frühzeitig von der Symmetrie des Potentials unter Raumspiegeleung Gebrauch, $V(x) = V(-x)$.

(b) Bestimmen Sie für den Fall der "genügend hohen und breiten Barierre"

$$V_0 \gg E, \frac{\hbar^2}{mL^2} \tag{3}$$

näherungsweise die Energiewerte und Eigenfunktionen des Grundzustands und ersten angeregten Zustands. Machen Sie sich ein Bild der W'keitsdichten $|\varphi_n(x)|^2$, $n = 0, 1$.

(c) Zum Zeitpunkt $t = t_0$ sei das Molekül nun in einem Zustand präpariert

$$\Psi(x, t_0) := \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_0(x) + \varphi_1(x)\right] . \tag{4}$$

Machen Sie sich ein Bild von $|\Psi(x, t_0)|^2$. Bestätigen Sie, dass sich das Molekül jetzt in einer R- (oder L-Konfiguration) befindet. Bestimmen Sie nun die zeitliche Entwicklung dieser Konfiguration. Nach welcher Zeit T_{inv} hat sich die Konfiguration invertiert?

▷ **Aufgabe 3 (Qubit)** (πe Punkte)

Das "Bit" ist bekanntlich das Elementarteilchen der Informatik: Sein Konfigurationsraum umfasst nur die beiden Zustände "gesetzt" (symbolisch $\mathtt{1}$) und "ungesetzt" (symbolisch $\mathtt{0}$). Die Manipulation eines Bits wird in der Informatik durch Gatter erreicht. Ein Gatter, das als Input ein Bit nimmt, und als Output wiederum ein Bit liefert, heißt unäres Gatter. Mathematisch formuliert ist ein unäres Gatter eine Abbildung

$$g : \{\mathtt{0}, \mathtt{1}\} \quad \to \quad \{\mathtt{0}, \mathtt{1}\} \tag{5}$$

(a) Zeigen Sie: es gibt genau 4 unäre Gatter.

(b) Zeigen Sie: Die einzigen reversiblen Gatter sind die Identität (hier bezeichnet IDT) und das logische NOT. Ein reversibles Gatter ist ein Gatter, bei dem Sie bei Kenntnis des Output auf den Input schließen können.

(c) Beweisen Sie den *Fundamentalsatz der Informatik*: Es gibt kein unäres Gatter $\sqrt{\mathrm{NOT}}$, das in Hintereinanderschaltung das NOT realisiert.

Wird das Bit quantisiert, erhält man das Elementarteilchen der Quanteninformatik, genannt "Qubit". Der Hilbertraum des Qubit ist zweidimensional – das Qubit ist gewissermaßen das kleinste nicht-triviale quantemechanische System. Physikalisch realisieren lassen sich Qubits durch den Spin eines Elektrons, den Polarisationsfreiheitsgrad eines Photons, oder zwei Energieniveaus eins Atoms.

Die Zustände des klassischen Bits, $\mathtt{1}$ und $\mathtt{0}$, werden im Hilbertraum $\mathcal{H}_{\text{qubit}}$ des Qubit durch die beiden orthonormalen Basisvektoren $|\mathtt{1}\rangle$ und $|\mathtt{0}\rangle$ dargestellt, genannt die "Computer-Basis". Gemäß Superpositionsprinzip ist aber auch die Superposition

$$|\psi\rangle = \psi_0|\mathtt{0}\rangle + \psi_1|\mathtt{1}\rangle\,, \tag{6}$$

ein möglicher Zustand des Qubit. Die Koeffizienten $\psi_i \in \mathbb{C}$ bilden die Darstellung in der Computer-Basis,

$$\psi_i = \langle i|\psi\rangle\,, \tag{7}$$

und werden folgendermaßen interpretiert:

$$|\psi_i|^2 = \text{W'keit, das Qubit gesetzt } (i = \mathtt{1}) \text{ bzw ungesetzt } (i = \mathtt{0}) \text{ zu finden} \tag{8}$$

Um sich das Leben (und Schreiben) etwas zu erleichtern, werden Qubits gerne in einer Matrixdarstellung beschrieben. Die Darstellung ist definiert durch eine Abbildung $\mathcal{H}_{\text{qubit}} \to \mathbb{C}^2$

$$|\mathtt{0}\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\,, \qquad |\mathtt{1}\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\,. \tag{9}$$

In der Quanteninformatik werden reversible unäre Gatter durch unitäre Operatoren dargestellt, und das Hintereinanderschalten von logischen Gattern entspricht der Multiplikation der zugeordneten Operatoren. In der Matrixdarstellung sind Gatter einfach unitäre 2×2-Matrizen. Hintereinanderschaltung ist also einfach Matrixmultiplikation.

(d) Zeigen Sie: Die Matrix

$$\hat{U}_{\mathrm{NOT}} := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{10}$$

ist unitär und realisiert das logische NOT für Qubits.

(e) Zeigen Sie: der Fundamentalsatz der Informatik wird mit Qubits außer Kraft gesetzt. Es gibt sehr wohl ein unäres Gatter $\hat{U}_{\sqrt{\mathrm{NOT}}}$, das in Hintereinanderschaltung das logische NOT realisiert, $\hat{U}_{\mathrm{NOT}} = \hat{U}_{\sqrt{\mathrm{NOT}}}\hat{U}_{\sqrt{\mathrm{NOT}}}$. Welche Matrix ist diesem Gatter zugeordnet?

Genießen Sie hier ruhig Ihren Erkenntnisvorsprung vor den Kollegen und Kolleginnen aus der Informatik. Und verbeugen sich in Demut vor der Einsicht: nicht alles, von dem man felsenfest überzeugt ist (weil man's so in der Uni gelernt hat) ist unter allen Umständen richtig. Werden Sie jetzt aber bloß nicht übermutig ...

▷ **Aufgabe 4 (Quantenhexerei)** (π^e Punkte)

Rechtzeitig zur Walpurgisnacht erreicht Sie eine SMS:

Take a friend, go to the bar, get a drink and play a game:

Place a coin head up in a box. Seal the box so that nobody can look inside. You will now take three turns, first you, then your friend, then you again. At each turn you (or your friend) can manipulate the coin: turn it around, or not turn it around. Of course neither you nor your friend can see the actual state of the coin (heads or tails up). Also, you can't see what action your friend takes (turn or not turn), nor can your friend see what action you take. Once you are done, you may open the box. You win if the coin is still head up in the end. Otherwise your friend wins.

(a) Convince your friend that there is no winning strategy for neither you nor your friend.

(b) Recall quantum mechanics (but don't tell your friend) and win the game – always!

Reference: D. Meyer, Phys. Rev. Lett. **82**, 1052.