Theoretische Physik III
- Quantenmechanik (SoSe 2019) -

Problemmset No 04 ($20 + \pi e + \pi^e$ Punkte)[1]
Emission 29.04.19 – Absorption 07.05.19 – Digestion tba
Problems with asterix are isomorphic to problems of the exam

▷ **Aufgabe 1 (Tunneling)*** (8 scores)

We consider the scattering off a potential barrier

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

where $V_0 > 0$.

(a) What physical system realizes such scattering scenario?

(b) Derive the scattering matrix. Show that the scattering matrix is unitary.

(c) Discuss the transmission coefficient as function of the particles energy. Under what conditions is the transmission coefficient approximately exponential in the barrier width?I

(d) Check your textbooks, keyword tunneling microscopy. For typical parameter values - what would be the range of the transmission coefficient?

Remark: This problem is an eternal classic of quantum mechanics. If you master it you have something for life. As an add on you may want to prove orthonormality and completeness of the scattering solutions (π scores)

▷ **Aufgabe 2 (Double well potential)*** (12 scores)

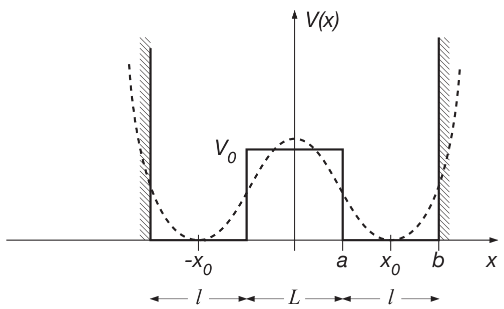
Das Ammnoniakmolekül NH_3 stellt man sich gerne als Pyramide vor mit den drei Wasserstoffatomen als Basis, und dem Stickstoff im Apex. Die drei Wasserstoffatome bilden eine Ebene P, die durch das Stickstoffatom führende Senkrechte zu dieser Ebene sei mit S bezeichnet. Die Lage des Stickstoffatoms auf 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 Wind". Aus Gründen der Symmetrie erreicht das Molekül für $x = -x_0$ wieder eine stabile Gleichgewichtslage. Die beiden klassischen stabilen Konfigurationen des Ammoniakmoleküls heißen die R- und L-Konfiguration. Klassisch kann man das Molekül von der R- in

[1] Problems with transcendental scores are facultative nuts. Nuts come high nutrition value ...

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. Hinweis: 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)

The "bit" can be considered 'the elementary particle' of the computer sciences. Its state space comprises the two states "set" ($\mathtt{1}$) and "unset" ($\mathtt{0}$). Bits are manipulated with gates. A logical gate which takes a bit as input and delivers one bit as output is called a unary gate – from the mathematics point of view simply a map

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

(a) Show that there are exactly four unary gates.

(b) Show that there are two reversible gates, the identity IDT and the NOT. A gate is called reversible if you can deduce the input from the output.

(c) Prove the fundamental theorem of the computer sciences: There is no unary gate $\sqrt{\text{NOT}}$, which upon concatenation yields the NOT.

The quantum version of the bit is dubbed "qubit". The qubit is kind of the elementary particle of quantum information - a novel branch of applied quantum mechanics which has gained quite some momentum over the past decade. Physically, the qubit is realized in the spin of elementary particles, like the electron or the neutron, but also in the polarization degree of freedom of photons, or even two energy eigen states of an atom.

The states of the classical bit, $\mathtt{1}$ and $\mathtt{0}$, are promoted the two orthonormal basis vectors $|\mathtt{1}\rangle$ and $|\mathtt{0}\rangle$ of the two-dimensional Hilbertspace of the qubit, $\mathcal{H}_{\text{qubit}}$.

According to the superposition principle, the qubit can be found in any of the basis states, but also in any superposition

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

The coefficients $\psi_i \in \mathbb{C}$ provide the qubit representation the computing basis,

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

and are interpreted as follows:

$$|\psi_i|^2 = \text{Probability to find the qubit "set" } (i = \mathtt{1}) \text{ resp. "unset" } (i = \mathtt{0}). \tag{8}$$

For practical reasons, quibts are frequently given in a matrix representation. The representation is defined by the vector space isomorphism $\mathcal{H}_{\text{qubit}} \rightarrow \mathbb{C}^2$

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

In quantum information, reversible unary gates are represented by unitary operators, and the concatenation of gates is realized by the operator multiplication. In the matrix representation a reversible unary is given by a unitary 2×2-matrix, and concatenation is just matrix multiplication.

(d) Please show: The matrix

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

is unitary and realizes the logical NOT for qubits.

(e) Please show: the computer science fundamental theorem is derailed in quantum information. There is a unary gate $\hat{U}_{\sqrt{\mathrm{NOT}}}$ which in concatenation realizes the logical NOT, i.e. $\hat{U}_{\mathrm{NOT}} = \hat{U}_{\sqrt{\mathrm{NOT}}}\hat{U}_{\sqrt{\mathrm{NOT}}}$. What would be a matrix representation of $\hat{U}_{\sqrt{\mathrm{NOT}}}$?

▷ **Aufgabe 4 (Quantum Witchery)** (π^e Punkte)

Right on time for Walpurgis NIght you receive a 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.