Physikalisches Institut
Universität Bonn
Theoretische Physik

Blatt 5
09 Mai 2014
SS 2014

Übungen zur Quantenmechanik und statistischen Physik

Priv.-Doz. Dr. Stefan Förste

http://www.th.physik.uni-bonn.de/people/forste/exercises/la_tp2/

–Anwesenheitsaufgaben–

A 3.1 Teilchen im Zweizentrenpotential

Die Funktion

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{für } |x| > (l+a)/2 \\ 0, & \text{für } (l-a)/2 \leq |x| \leq (l+a)/2 \\ V_0, & \text{für } |x| < (l-a)/2 \end{cases}, \tag{1}$$

mit $a < l \in \mathbb{R}$, beschreibe näherungsweise das Potential für ein Elektron, welches durch ein eindimensionales zweiatomiges Molekül generiert wird. Wir betrachten nur Elektronen, die an jeweils ein Atom gebunden sind, d.h. die Energie E des Elektrons beträgt $0 < E < V_0$.

(a) Zeichne das Potential in einen Graphen ein.

(b) Löse die zeitunabhängige Schrödinger Gleichung

$$E\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{X})\right)\psi(x) \tag{2}$$

für die fünf Bereiche.

(c) Die Wellenfunktion und ihre Ableitung muss an den Stellen $x = \pm(l \pm a)$ stetig sein. Nutze die Stetigkeitsbedingung, um die freien Parameter der Wellenfunktionen zu bestimmen.

(d) Das Potential besitzt eine $\mathbb{Z}_2$-Symmetrie (Parität). D.h. die Theorie ist invariant unter der Transformation

$$\hat{P} : \, x \to -x. \tag{3}$$

Zeige, dass die Wellenfunktionen Eigenfunktionen des Paritätsoperators $\hat{P}$ sind. Warum ist das so? Dies ist ein Beispiel dafür, dass Symmetrien einer quantenmechanischen Theorie sich in den Wellenfunktionen ankündigen.

(e) Betrachte den Abstand der Atome als sehr groß,d.h. $l \to \infty$. Bestimme die Differenzen $\Delta_1 = E_1 - E_0$ und $\Delta_2 = E_2 - E_0$, wobei E_0 die Energie für zwei vollständig getrennte Atome ist $l \to \infty, V_0 \to \infty$ (siehe Potential mit unendlich hohen Wänden) und E_1, E_2 die Energieeigenwerte der Wellenfunktionen für $l \to \infty, V_0 < \infty$ sind.
Hinweis: Betrachte nur die unteren Energiezustände, d.h. $\sqrt{2m(V_0 - E_i)/\hbar}(l-a) \gg 1$.

H 5.1 Streuung an einer Potentialbarriere *(9,5 points)*

Wir wollen in dieser Aufgabe ein eindimensionales Streuproblem untersuchen. Es sei das zeitunabhängige Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{für } |x| < a/2 \\ 0, & \text{für } |x| \geq a/2 \end{cases}, \tag{4}$$

mit $V_0 > 0$ und $a > 0$ gegeben.

(a) Zeichne das Potential in einen Graphen ein. *(0,5 points)*

Ein Teilchen mit der Energie $E_0 < V_0$ befinde sich im Gebiet $x = \{x < -a/2 | x \in \mathbb{R}\}$ und bewege sich nach rechts.

(b) Was würde man klassisch für das Verhalten des Teilchens bei $x = -a/2$ erwarten? Quantenmechanisch wirst du finden, dass die einfallende Welle, welches mit dem Teilchen assoziiert wird, von einer reflektierten Welle überlagert wird und dass ein Teil der einfallenden Welle das Potential durchdringt[1]. *(0,5 points)*

Ein quantenmechanisches Teilchen wird durch eine Wellenfunktion $\psi(x,t)$ beschrieben, welche die Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{X})\right)}_{\hat{H}} \psi(x,t) \tag{5}$$

erfüllen muss. Da das Potential zeitunabhängig ist, kann man für die Wellenfunktion den Separationsansatz $\psi(x,t) = \psi(x)\psi(t)$ verwenden.

(c) Berechne $\psi(t)$. *(1 point)*

Um $\psi(x)$ zu bestimmen müssen wir die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$E\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{X})\right)\psi(x) \tag{6}$$

lösen, wobei E die Energie des Teilchens ist.

(d) Zeige, dass die Funktion

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi(x)_{\mathrm{I}} := A_1 \mathrm{e}^{i\eta x} + A_2 \mathrm{e}^{-i\eta x}, & \text{für } x < -a/2 \\ \psi(x)_{\mathrm{II}} := B_1 \mathrm{e}^{\kappa x} + B_2 \mathrm{e}^{-\kappa x}, & \text{für } -a/2 \leq x \leq a/2 \\ \psi(x)_{\mathrm{III}} := C_1 \mathrm{e}^{i\eta x} + C_2 \mathrm{e}^{-i\eta x}, & \text{für } x > a/2 \end{cases}, \tag{7}$$

mit $\eta = \sqrt{\frac{2mE_0}{\hbar^2}}$ und $\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E_0)}{\hbar}}$, die zeitunabhängige Schrödingergleichung mit dem gegebenen Potential $V(x)$ löst. *(2 points)*

[1] Siehe dazu die Vorlesung am Dienstag.

(e) Was gilt für C_2, wenn wir ein Teilchen betrachten, welches ursprünglich von links eintrifft? Was sind die physikalischen Interpretationen der beiden Terme in $\psi(x)_{\mathrm{I}}$ und $\psi(x)_{\mathrm{II}}$? *(1,5 points)*

$R = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2}$ ($T = \frac{|C_1|^2}{|A_1|^2}$) wird als Reflexionskoeffizient (Transmissionskoeffizient) bezeichnet. Der Wert für A_1 ist ein freier Parameter, welchen wir der einfachheitshalber $A_1 = 1$ setzen.

(f) Die Wellenfunktion $\psi(x)$ und ihre erste Ableitung $\psi'(x)$ müssen stetig sein. Diese Bedingung liefert uns vier Randbedingungen

$$\begin{aligned} \psi_{\mathrm{I}}(-a/2) &= \psi_{\mathrm{II}}(-a/2), \quad \psi_{\mathrm{II}}(a/2) = \psi_{\mathrm{III}}(a/2), \\ \psi'_{\mathrm{I}}(-a/2) &= \psi'_{\mathrm{II}}(-a/2), \quad \psi'_{\mathrm{II}}(a/2) = \psi'_{\mathrm{III}}(a/2). \end{aligned} \tag{8}$$

Nutze diese Randbedingungen, um die Parameter B_1, B_2 zu bestimmen. *(3 points)*

(g) Bestimme durch Einsetzen der Werte für B_1, B_2 den Transmissions- und Reflexionskoeffizienten. *(1 point)*

H 5.2 Unschärferelation *(5 points)*

Berechne die Unschärferelationen für folgende Operatoren

(i) $\hat{L}_i$ und $\hat{L}_j$,

(ii) $\hat{L}_i$ und $\hat{\vec{L}}^2$,

(iii) $\hat{P}$ und $\hat{V}(\hat{X})$,

(iv) $\hat{E}$ und $\hat{T} = t$, wobei t die Zeit ist.

*Hinweis: Die Operatoren sind in Aufgabe **H 4.1** defniert.*

H 5.3 Eigenwerte und Eigenvektoren *(5,5 points)*

Die Matrix $\hat{A}$ sei im kartesischen Koordinatensystem des $\mathbb{R}^3$ gegeben durch

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 2 \end{pmatrix}. \tag{9}$$

(a) Bestimme die Eigenwerte von $\hat{A}$. *(1 point)*

(b) Finde die Eigenvektoren von $\hat{A}$ und normiere sie auf die Länge 1. *(1 point)*

(c) Finde die Transformationsmatrix $\hat{U}$, von der Basis des kartesischen Koordinatensystems in die Eigenbasis. *(1,5 points)*

(d) Welche Darstellung hat $\hat{A}$ in der Eigenbasis? *(0,5 points)*

(e) Was für eine Eigenschaft hat die Matrix $\hat{U}$, wenn $\hat{A}$ hermitisch oder unitär ist? *(1,5 points)*