Theoretische Physik III
- Quantenmechanik (SS 2010) -

Übungsblatt 6 ($20 + \pi + \gamma + e$ Punkte)[1]

Ausgabe 25.05.10 – Abgabe 01.06.10 – Besprechung n.V.

Aufgaben mit Sternchen sind Klausurisomorph

▷ Aufgabe 1 (Tunneleffekt)* ($5 + \pi$ 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) (4 Punkte)

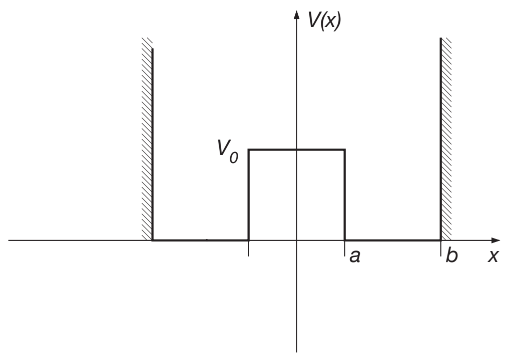
Das Ammnoniakmolekül NH_3 stellt man sich gerne als Pyramide vor mit den drei Wasserstoffatomen als Basis, und dem Stickstoff im Apex. Die drei Wasserstoffatome bilden eine Ebene P, die durch das Stickstoffatom führende Senkrechte zu dieser Ebene sei mit S bezeichnet. Die Lage des Stickstoffatoms auf 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 Ammoniakmoleküls heißen die R- und L-Konfiguration. Klassisch kann man das Molekül von der R- in die L-Konfiguration nur unter Aufbringung einer Energie $V_0 \approx 0.4\text{eV}$ 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.



(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 Doppelmuldenpotential. 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 $|\varphi_n(x)|^2$, $n = 0, 1$.

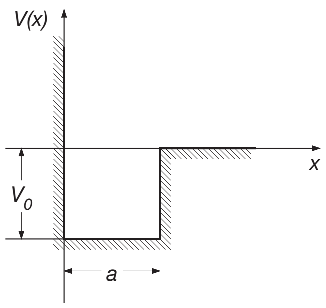
(c) Zum Zeitpunkt $t = t_0$ sei das Molekül nun in einem Zustand präpariert

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

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 (Gebundene Kernzustände)** (5 Punkte)

Nukleonen, das sind Protonen und Neutronen, sind im Atomkern gebunden. Das Bindungspotetnial ist in der untenstehenden Abbildung karikiert.



Zustände mit verschwindendem Drehimpuls werden durch einen Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}) \tag{5}$$

beschrieben, der offensichtlich die Bewegung eines Punktteilchens im ein-dimensionalen Konfigurationsraum $[0, \infty]$ beschreibt. Die Konfigurationskoordinate x darf hier mit der Radialkoordinate identifiziert werden.

Berechnen sie die Energien (=Eigenwerte des Hamiltonoperators) der gebunden Zustnde und bestimmen Sie die dazugehörigen Orbitale (= Eigenfunktionen). Für gegebene Tiefe des Potentialtopfes: welche Rechweite muss das Potential mindestens aufweisen, um überhaupt gebunde Zustände zuzulassen?

▷ **Aufgabe 4 (Wronski)** ($6 + \gamma + e$ Punkte)

Die stationäre Schrödingergleichung für den Massepunkt in einer Raumdimension ist Ihnen mittlerweile vertraut. Zur Erinnerung, in geeigneten Einheiten

$$\psi''(x) + [\epsilon - u(x)]\psi(x) = 0 \tag{6}$$

Ein nützliches Hilfsmittel bei der Analyse dieser Gleichung ist die sog *Wronskideterminante*,

$$W[f, g](x) := f'(x)g(x) - g'(x)f(x) \tag{7}$$

(a) Zeigen Sie

$$W[f, g] = 0 \Leftrightarrow f \text{ und } g \text{ sind linear abhängig}\,. \tag{8}$$

(b) Beweisen Sie das

Wronskische Theorem Sind f_1 und f_2 jeweils Lösungen der Gleichungen $f_1'' + F_1(x)f_1 = 0$ und $f_2'' + F_2(x)f_2 = 0$ in einem Intervall (a, b), in dem die Funktionen F_1 und F_2 stetig sind oder allenfalls Unstetigkeiten erster Art aufweisen, so gilt

$$W[f_1, f_2]\big|_a^b = \int_a^b [F_1(x) - F_2(x)] f_1(x) f_2(x) dx\,. \tag{9}$$

(c) Theoreme sind bekanntlich nur dazu da, um nützliche Korellare zu ermöglichen. Beweisen Sie das

Korrelar I Für zwei Lösungen ψ_1 und ψ_2 der stationären Schrödingergleichung (6) zu Energiewerten ϵ_1 und ϵ_2

$$W[\psi_1^*, \psi_2]\big|_a^b = \frac{2m}{\hbar^2}(\epsilon_1 - \epsilon_2) \int_a^b \psi_1^* \psi_2 dx \qquad (10)$$

(d) Benutzen Sie jetzt Korellar I für die Erkenntnis "Für ψ_1 und ψ_2 quadratintegrabel und $a \to -\infty$ und $b \to \infty$ gilt: Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal."

(e) Zwei Korellare sind mehr als ein Korellar. Beweisen Sie das (1 Punkt)

Korrelar II Sind ψ_1 und ψ_2 zwei Lösungen der stationären Schrödingergleichung (6) zum gleichen Eigenwert $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$, so ist ihre Wronskideterminante unabhängig von x, also $W[\psi_1, \psi_2] = constans$.

(f) Schlachten Sie jetzt Korellar II in Verbindung mit (8) aus für die Erkenntnis "Für ψ_1 und ψ_2 quadratintegrabel ist $W[\psi_1, \psi_2] = 0$, also ψ_1 und ψ_2 notwendigerweise linear abhängig. Das Spektrum der gebundenen Zustände ist einfach." (1 Punkt)

(g) Schlachten Sie weiter, und begründen die Erkenntnis "Aber auch für einseitig ungebundene Zustände ist $W = 0$, das dazugehörige Spektrum ist einfach." (γ Punkte)

(h) Und schließlich nehmen Sie sich die in der Vorlesung eingeführten Streulösungen $\varphi_{k,l}, \varphi_{k,r}$ und ihre konjugiert komplexen Schwestern zur Brust, das sind ja auch Lösungen von (6), bilden Wronskideterminanten, und beweisen einige nützliche Beziehungen zwischen den Koeffizienten der S-Matrix. (π Punkte)