

Theoretische Physik für das Lehramt III: Quantenmechanik und Statistische Physik (WS 05/06)

Blatt 03 – Ausgabe 15.11.05, Abgabe 28.11.05, Besprechung N.V (20 + (π) Punkte)¹

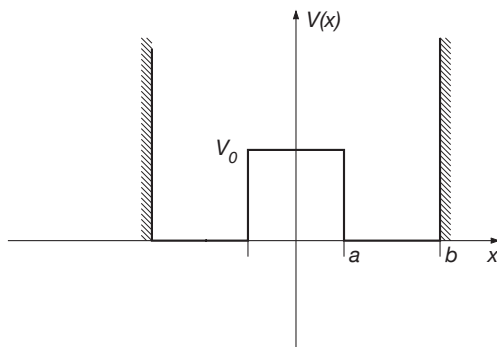
▷ Aufgabe 1 (Doppelmuldenpotential)

(10 Punkte)

Das Ammoniakmolekül 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 Ammoniakmoleküls von der Konfigurationsvariablen x stellt sich folgendermaßen dar. In der Gleichgewichtslage $x = x_0 \approx 0.4 \text{ \AA}$ 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 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

(3 Punkte)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

¹Aufgaben mit transzendenter Punktezahl sind fakultative Nüsse. Nüsse sind bekanntlich nahrhaft ...

für das in Abb. skizzierte Doppelmuldenpotential. Bestimmen Sie zunächst nur die Form der Eigenfunktionen und die transzendente Bestimmungsgleichung für die Eigenwerte.

Hinweis: Machen Sie frühzeitig von der Symmetrie des Potentials unter Raumspiegelung Gebrauch, $V(x) = V(-x)$.

(b) Bestimmen Sie für den Fall der “genügend hohen und breiten Barriere”

$$V_0 \gg E, \frac{\hbar^2}{mL^2} \quad (2)$$

näherungsweise die Energiewerte und Eigenfunktionen des Grundzustands und ersten angeregten Zustands. Machen Sie sich ein Bild der Wahrscheinlichkeitsdichten $|\varphi_n(x)|^2$, $n = 0, 1$. (4 Punkte)

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

$$\Psi(x, t_0) := \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_0(x) + \varphi_1(x)] . \quad (3)$$

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? (3 Punkte)

▷ **Aufgabe 2 (Ein kleiner Satz)** (2 Punkte)

Sei \hat{T} linearer Operator in \mathcal{H} , und \hat{T}^\dagger der zu \hat{T} adjungierte Operator. Beweisen Sie die nützliche Ungleichung

$$\langle \hat{T}^\dagger \hat{T} \rangle \geq 0 . \quad (4)$$

▷ **Aufgabe 3 (Unschärferelationen)** (4 Punkte)

Sie erinnern sich an die Varianz (Unschärfe) eines Operators, $\delta A := [\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle]^{1/2}$.

Seien nun \hat{A} , \hat{B} zwei selbstadjungierte Operatoren mit Kommutator

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} . \quad (5)$$

Beweisen Sie die folgend wichtige Ungleichung für das Produkt der Varianzen

$$\delta A \delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle| . \quad (6)$$

Hinweis: Machen Sie von Aufgabe 1 Gebrauch. Setzen Sie dort $\hat{T} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle + i\lambda(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)$ und minimieren bezüglich λ .

▷ **Aufgabe 4 (Zustand minimaler Unschärfe)** (4 Punkte)

Für ein Punktteilchen im \mathbb{R} mit kanonischem Kommutator $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ wird aus Aufgabe 2 die *Heisenberg'sche Unschärferelation*,

$$\delta q \delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (7)$$

Ein Zustand bei dem hier Gleichheit herrscht heißt *Zustand minimaler Unschärfe* (engl: minimum uncertainty state). Zeigen Sie, daß der allgemeinste Zustand minimaler Unschärfe in der Ortsdarstellung durch eine Gaussfunktion beschrieben wird.

Hinweis: Betrachte Beweis zu Aufgabe 2. Setze o.B.d.A. $\langle \hat{q} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$; minimal heißt dann neben $\lambda = \hbar/(2\delta p^2)$ auch $\langle \hat{T}^\dagger \hat{T} \rangle = 0$, also $\hat{T}\psi_{\min} = 0$. Auswertung dieser Gleichung in Ortsdarstellung liefert den gesuchten Beweis.

▷ **Aufgabe 5 (Quantendiffusion)**

(π Punkte)

Ihr Freundin ist besorgt. Sie schläft in einem Hochbett und befürchtet, aufgrund der Quantendiffusion ihres Wellenpaketes morgens auf dem Boden aufzuwachen (möglicherweise, so ihre konkrete Befürchtung, mit blauen Flecken).

- (a) Versuchen Sie, Ihre Freundin zu beruhigen.

Hinweis: Modellieren Sie Ihre Freundin als Gauss'sches Wellenpaket. Benutzen Sie die Relation $m\Delta v^2/2 \sim k_B T$, die Sie in der statistischen Mechanik kennenlernen werden, um die anfängliche Geschwindigkeits-Unschärfe Ihrer Freundin der Masse m mit ihrer Körpertemperatur T in Beziehung zu setzen (k_B ist die Boltzmann-Konstante).

- (b) Wie lange müsste Ihre Freundin gewohnheitsmäßig schlafen, um im Mittel jedes zweite mal neben ihrem Bett aufzuwachen?
- (c) Geben Sie eine Einschätzung ob die unter (b) gefundene Antwort realistisch erscheint. Begründen Sie Ihre Einschätzung. Sollten Sie zum Schluss kommen "unrealistisch" – woran könnte das liegen, also: an welcher Stelle ist das Modell inadequat?