Theoretische Physik III
- Quantenmechanik (SoSe 2018) -

Übungsblatt 03 ($20 + \pi^e$ Punkte)[1]

Ausgabe 23.04.18 – Abgabe 02.05.18 – Besprechung n.V.

Aufgaben mit Sternchen sind Klausurisomorph

▷ Aufgabe 1 (Rechenregeln Operatoren) (5 Punkte)

Bestätigen Sie die folgenden Rechenregeln für Operatoren. Fragen nach Definitionsbereichen dürfen Sie im ersten Anlauf non-chalant ignorieren ....

$$(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger \tag{1}$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \tag{2}$$

$$[\hat{A},\hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger,\hat{A}^\dagger] \tag{3}$$

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1} \tag{4}$$

$$(\hat{A}^\dagger)^{-1} = (\hat{A}^{-1})^\dagger \tag{5}$$

Bermerkung: Die Aufgabe ist zwar nicht klausurisomorph, aber diese Rechenregeln werden dauernd gebraucht und es ist dringend angeraten, sie mal selbst zu beweisen ...

▷ Aufgabe 2 (Initiationsritus Quantenmechanik) (3 Punkte)

Seit Menschengedenken werden Studierende der Grundlagen der Quantenmechanik gebeten, zu beweisen:

(a) Im unitären Raum gilt die sog *Schwarz'sche Ungleichung*[2]

$$|\langle\psi,\chi\rangle| \le \|\psi\|\|\chi\|\,, \tag{6}$$

(b) die sog *Parallelogramm-Gleichung*

$$\|\psi+\chi\|^2 + \|\psi-\chi\|^2 = 2\|\psi\|^2 + 2\|\chi\|^2\,. \tag{7}$$

(c) und das Skalarprodukt kann durch die Norm ausgedrückt werden,

$$4\langle\psi,\chi\rangle = \|\psi+\chi\|^2 - \|\psi-\chi\|^2 + i\|i\psi+\chi\|^2 - i\|i\psi-\chi\|^2\,. \tag{8}$$

▷ Aufgabe 3 (Tunneleffekt)* (12 Punkte)

Wir betrachten die Streuung an der Potentialbarriere

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| \le \frac{a}{2} \\ 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases} \tag{9}$$

mit $V_0 > 0$.

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

[2] Für den "technischen Jargon" vgl. die Handreichung zu Hilberträumen, Operatoren etc. auf der Netzseite des Kurses ...

(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.

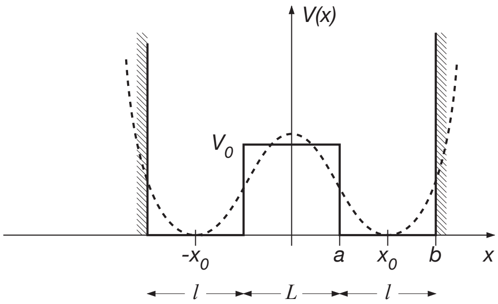
Bemerkung: Die Aufgabe ist ein Klassiker der Quantenmechanik. Wer sie beherrscht hat etwas fürs Leben. Als kleine (nun ja . . .) Zusatzaufgabe (π Punkte) wäre noch die Orthogonalität und Vollständigkeit der Streulösungen zu zeigen.

▷ Aufgabe 4 (Doppelmuldenpotential)* (π^e 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 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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{10}$$

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"

$$V_0 \gg E, \frac{\hbar^2}{mL^2} \tag{11}$$

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

$$\Psi(x, t_0) := \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_0(x) + \varphi_1(x)\right] . \tag{12}$$

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?