

# Übungsblatt 5 zur “Einführung in die Quantentheorie”

WS 2012/13 Prof. H. Köppel

Abgabetermin 26.11.2012 (11:00)

## Aufgabe 1 (Eigenwertproblem analytisch).

Es sei  $\psi(x) = e^{-\alpha x^2}$ ,  $\alpha > 0$  eine Wellenfunktion für eine eindimensionale Bewegung. Wie muss  $\alpha$  gewählt werden, damit  $\psi(x)$  Eigenfunktion des Operators

$$\hat{A} = kx^2 - \frac{1}{k} \frac{d^2}{dx^2}$$

wird, wobei  $k$  ein positiver Parameter ist? Wie lautet der zugehörige Eigenwert? (4P)

## Aufgabe 2 (Tunneleffekt)

In der Vorlesung wurde der Transmissionskoeffizient  $T(E)$  für einen rechteckförmigen Potentialwall der Breite  $a$  und Höhe  $V_0$  angegeben zu

$$T(E) = \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right),$$

wobei  $m$  die Masse des Teilchens ist und  $E$  seine Energie darstellt.

a) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit für einen Menschen der Masse 70 kg, der sich mit 7 km/h auf eine 5 m hohe und 0.3 m dicke Wand zubewegt, diese quantenmechanisch zu durchtunneln? (1P)

b) Die Inversionsbewegung in Ammoniak wird durch ein Doppelmuldenpotential mit einer Potentialhöhe von  $V_0 = 0.25$  eV und Minima bei  $\pm a$  ( $a = 0.04$  nm) beschrieben (siehe Vorlesung und angehängtes Beiblatt). Die Barriere soll im Folgenden durch ein rechteckiges ( $V_R$ ) und ein dreieckiges ( $V_D$ ) Modellpotential angenähert werden.

$$V_R(x) = \begin{cases} V_0 & x \in [-\frac{1}{2}a, \frac{1}{2}a] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad V_D(x) = \begin{cases} V_0 + \frac{V_0}{a}x & x \in [-a, 0] \\ V_0 - \frac{V_0}{a}x & x \in [0, a] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

- Skizzieren Sie die beiden Barrierenverläufe und das Doppelmuldenpotential deutlich unterscheidbar in einem Diagramm. (2P)

- Berechnen Sie die Tunnelwahrscheinlichkeit für ein Proton, das sich mit der kinetischen Energie  $E=0.06$  eV bewegt, für das rechteckige Modellpotential  $V_R$ . Vergleichen Sie das

Ergebnis mit dem Quotienten aus Tunnelaufspaltung  $\Delta E_0$  ( $= 0.79 \text{ cm}^{-1} \text{ hc}$ ) und entsprechendem Schwingungsquantum  $E_{vib}$  ( $= 950 \text{ cm}^{-1} \text{ hc}$ ). Führen Sie die analoge Rechnung und den Vergleich für den ersten angeregten Schwingungszustand mit  $E = 0.18 \text{ eV}$  und  $\Delta E_1$  ( $= 38 \text{ cm}^{-1} \text{ hc}$ ) durch. (3P)

- Will man die Tunnelwahrscheinlichkeit für ein allgemeines Potential  $V(x)$ ,  $x_1 \leq x \leq x_2$  ermitteln, nähert man dieses als hintereinanderliegende rechteckige Potentialwälle an und erhält im Limes für  $T(E)$ :

$$T(E) = \prod_j T_j(E) = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx \right\}$$

Berechnen Sie die Tunnelwahrscheinlichkeit für das oben angegebene Dreieckspotential  $V_D$ . Beachten Sie, dass die Integrationsgrenzen  $x_1$  und  $x_2$  von der Energie  $E$  des tunnelnden Teilchens abhängen. Wichtig ist also der Ort, an dem das Teilchen auf den Potentialwall trifft. Werten Sie anschließend den Ausdruck für ein Proton mit einer kinetischen Energie von  $0.06 \text{ eV}$  und  $0.18 \text{ eV}$  aus. (5P)

- Vergleichen Sie die Tunnelwahrscheinlichkeiten für das rechteckige und dreieckige Potential und interpretieren Sie das Resultat. (2P)

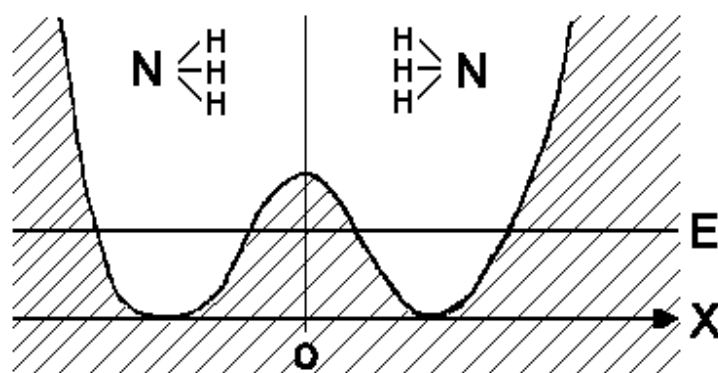
### Aufgabe 3 (Orthogonale Funktionensysteme).

In Aufgabe 4 von Blatt 3 wurde aus einem Satz linear unabhängiger Vektoren ein Orthonormalsystem konstruiert. Dasselbe ist auch für einen Satz linear unabhängiger Funktionen möglich. Aus den Polynomen  $p_n(x) = x^n$ ,  $n = 0, 1, 2$  sind auf  $[0, 1]$  unter Zuhilfenahme des Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahrens orthonormierte Polynome  $q_n(x)$ ,  $n = 0, 1, 2$  zu erzeugen. Das entsprechende Skalarprodukt für (reelle) Funktionen lautet (beachten Sie die Integrationsgrenzen!)

$$\langle f|g \rangle = \int_0^1 f(x)g(x) dx .$$

Die  $q_n(x)$  erfüllen demnach  $\langle q_n|q_m \rangle = \delta_{mn}$ . Stellen Sie umgekehrt  $p_2(x)$  als Linearkombination der  $q_n(x)$  dar. (5P)

# Ammoniak und die genaue Zeit

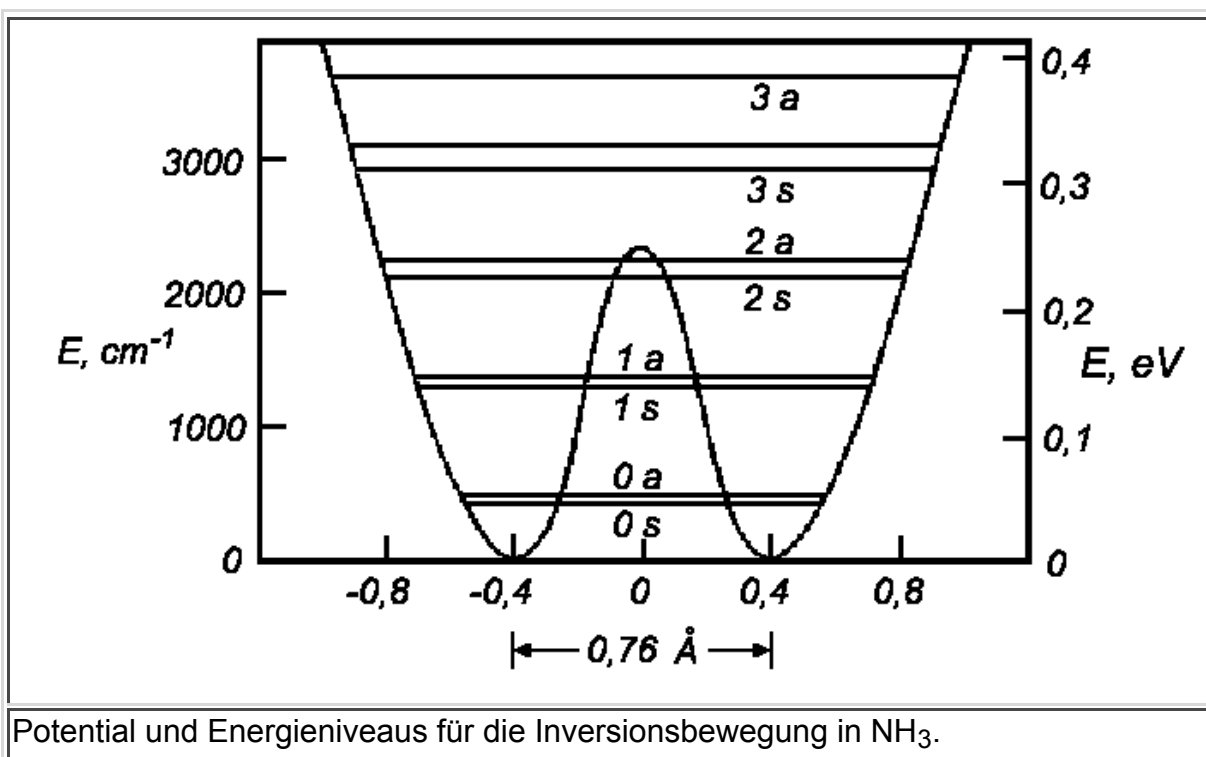


## Ammoniak $V(x)$ für N-Bewegung:

Die H-Atome definieren beim Ammoniak eine Ebene. Falls das Stickstoffatom ursprünglich auf der rechten Seite der Potentialbarriere ist, dann gibt es eine Chance, dass es die Barriere durchdringt und auf der linken Seite erscheint. (Tatsächlich bewegen sich die H-Atome und das N-Atom gegeneinander, wobei die Auslenkung des N-Atoms sogar kleiner ist als die der H-Atome.)

Die Bewegung des N-Atoms setzt sich zusammen aus einer Oszillation auf der rechten bzw. linken Seite des Potentials plus einer viel langsameren Bewegung zwischen diesen beiden Zonen. Die Frequenz dieser zweiten Bewegung ist  $2,3789 \cdot 10^{10}$  Hz (für den niedrigsten Zustand) und definierte früher unsere Zeit! Es war ein Zeitstandard für atomare Uhren. [So misst man die Zeit heute.](#)

Für zeitunabhängige (stationäre) Zustände sind die Energieniveaus leicht aufgespalten. Die H-Atome auf der rechten Seite "merken" etwas vom Potential auf der linken Seite. Im nächsten Kapitel werden wir eine interessante und extrem nützliche Beschreibung kennen lernen, die zum Grundhandwerkszeug des Quantenchemikers gehört.



Niveau	cm <sup>-1</sup>	eV
3 a	2681	0,3547
3 s	2380	0,2950
2 a	1910	0,2367
2 s	1597,4	0,1980
1 a	989,00	0,1222
1 s	950,16	0,1178
0 a	0,79	$9,84 \cdot 10^{-5}$
0 s	0,00	0,00

Vibrationsniveaus für die  
Axialbewegung des N-Atoms im  
NH<sub>3</sub>-Molekül relativ zum Grundzustand.