

# Übungsblatt 4 zur “Einführung in die Quantentheorie”

WS 2012/13 Prof. H. Köppel

Abgabetermin 19.11.2012 (11:00)

---

## Aufgabe zum Teilchen im Kasten.

Für einige Systeme aus der Praxis (z.B. organische Farbstoffe) liefert das Modell eines Teilchens, welches in einem eindimensionalen Raumbereich mit unendlich hohen Potentialwänden eingeschlossen ist, brauchbare Beschreibungen. Das Teilchen (Elektron) kann sich demnach nur innerhalb des vom Potential  $V(x)$  umschlossenen Bereichs aufhalten, da außerhalb seine potentielle Energie unendlich groß wäre. Für das Potential  $V(x)$  und die zugehörige Wellenfunktion  $\psi(x)$  des Elektrons gilt somit:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & : x \leq 0 \\ 0 & : 0 < x < L \\ \infty & : x \geq L \end{cases} \quad \longrightarrow \quad \psi(x) = 0 \quad \text{für} \quad \begin{cases} x \leq 0 \\ x \geq L \end{cases}$$

Die Bedingungen für  $\psi(x)$  nennt man daher auch *Randbedingungen*.

a) Skizzieren Sie das Potential. (1P)

b) Wie lautet für den physikalisch interessanten Bereich  $0 < x < L$  die zugehörige Schrödingergleichung? (2P)

**Hinweis:** Im Bereich  $0 < x < L$  liegt die Situation eines freien Teilchens vor !

c) Wählen Sie aus der allgemeinen Lösung  $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$  diejenige aus, die mit den Randbedingungen verträglich ist und bestimmen Sie daraus die möglichen Werte für  $k$ . Dies liefert den Satz erlaubter Wellenfunktionen. (2P)

d) Normieren Sie die Wellenfunktionen  $\psi_n(x)$ . Was fällt bezüglich der  $n$ -Abhängigkeit der Normierungskonstanten  $N_n$  auf? (2P)

e) Berechnen Sie die vier niedrigsten Eigenwerte und skizzieren Sie die dazugehörigen Wellenfunktionen. (4P)

f) Vergleichen Sie die Wellenfunktionen im Hinblick auf die Anzahl der Nullstellen und die Symmetrie unter der Punktspiegeloperation am Punkt  $L/2$ . (2P)

g) Zeigen Sie, dass die Wellenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten  $E_n$  und  $E_m$  orthogonal zueinander sind. (4P)

h) Anwendung: Lichtabsorption eines Cyaninfarbstoffs der Struktur



und der molekularen (Kasten)ausdehnung  $L = 1.06\text{nm}$ . In diesem System beteiligen sich 8 Elektronen an der Konjugation, die entsprechend dem Pauli-Prinzip die untersten 4 Niveaus besetzen. Berechnen Sie die Absorptionswellenlänge des zugehörigen HOMO  $\rightarrow$  LUMO-Übergangs mit dem Kastenmodell, d.h.  $E_{HOMO} \equiv E_4$ ,  $E_{LUMO} \equiv E_5$ . (3P)

---