LMU München

WS 2010/2011

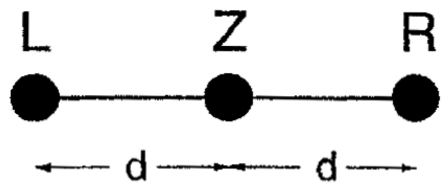
Lehrstuhl für Theoretische Nanophysik
Dr. A. Weichselbaum
Dr. F. Heidrich-Meisner

Abgabe: 1.2.2011, 10:15h

13. Übungsblatt Theoretische Physik im Querschnitt

27.1.2011

1: Lineares dreiatomiges Molekül



Betrachten Sie ein Valenzelektron in einem linearen dreiatomigen Molekül, in dem die Atomrümpfe L und R sich jeweils im Abstand d von Z befinden (siehe Skizze). Im Folgenden bezeichne $|\psi_L\rangle$, $|\psi_Z\rangle$ und $|\psi_R\rangle$ ein orthnormales System aus Zustandsvektoren, die den Zuständen eines beim Atom L, Z bzw. R lokalisierten Elektrons entsprechen. Der Hamiltonoperator für das Valenzelektron im Molekül habe bezüglich der Basis $(|\psi_L\rangle, |\psi_Z\rangle, |\psi_R\rangle)$ die Matrixdarstellung

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} b & -a & 0 \\ -a & b & -a \\ 0 & -a & b \end{pmatrix}$$

mit $a > 0$.

a. Verifizieren Sie (durch Einsetzen), dass die Vektoren der Energieeigenzustände von $\hat{H}$ wie folgt lauten

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \qquad |\psi_\pm\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix},$$

und bestimmen Sie die zugehörigen Eigenwerte E_0 und $E_\pm$.

b. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeiten P_L, P_Z und P_R dafür, dass das Elektron im Grundzustand $|\psi_-\rangle$ beim Atom L, Z bzw. R lokalisiert ist.

c. Bestimmen Sie den Erwartungswert $\langle\hat{H}\rangle$ und die Varianz $\mathrm{var}(\hat{H}) = \langle\hat{H}^2\rangle - \langle\hat{H}\rangle^2$ der Energieobservablen $\hat{H}$ im Zustand mit dem Vektor $|\psi_L\rangle$.

d. Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei das Valenzelektron beim Atomrumpf Z lokalisiert, es habe also den Zustandsvektor $|\psi(0)\rangle = |\psi_Z\rangle$. Geben Sie $|\psi(t)\rangle$ für $t \neq 0$ an, sowie die Wahrscheinlichkeit $P_Z(t)$, dass sich das Elektron zum Zeitpunkt t weiterhin beim Atomrumpf Z befindet.

2: Kontinuitätsgleichung

Vorgelegt sei die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit reellem Potential $V(\boldsymbol{x}, t)$,

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\boldsymbol{x}, t) \psi.$$

Vorgelegt sei außerdem eine eindimensionale Potentialstufe $V(x) = 0$ für $x < 0$ und $V(x) = V_0 > 0$ für $x > 0$. Es wird ein stationärer Strom von von links einfallenden Teilchen mit Energie $E > V_0$ betrachtet.

a. Lösen Sie die stationäre Schrödinger-Gleichung für $x < 0$ und $x > 0$, und bestimmen Sie die Stromdichten j_E des einfallenden Teilchenstroms un j_D des durchgehenden Teilchenstroms.

b. Welche Anschlussbedingungen gelten für die Wellenfunktion und ihre Ableitung an der Stufe? Bestimmen Sie unter Verwendung dieser Anschlussbedingungen und der Kontinuitätsgleichung die Stromdichte $j_R(x)$ der reflektierten Welle.

c. Bestimmen Sie den Transmissionskoeffizienten $T = j_D/j_E$, wobei j_E die einfallende und j_D die durchgehende Stromdichte bezeichnen. Wie verhält sich der Transmissionskoeffizient T für $E \to \infty$?

3: Eindimensionale Wellenfunktion

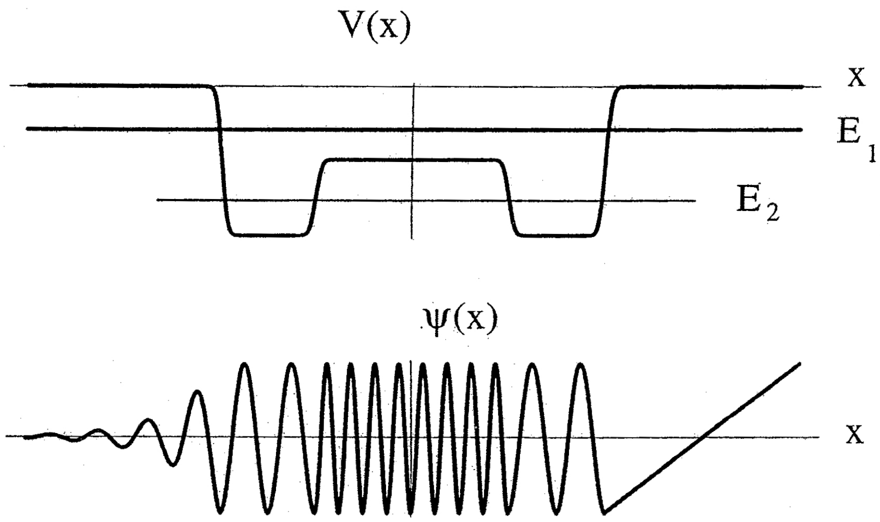
Ein quantenmechanisches Teilchen mit der Masse m und der Energie E laufe gegen eine eindimensionale Potentialstufe, $V(x) = 0$ für $x < 0$ und $V(x) = V_0 > 0$ für $x > 0$. Das Teilchen wird in den beiden Bereichen durch jeweils eine Überlagerung von Wellenfunktionen der Form $\psi(x) = Ae^{\mathrm{i}kx}$ beschrieben, wobei A und k komplexe Zahlen sind.

a. Berechnen Sie die Wellenzahlen k für die beiden Bereiche und skizzieren Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(x)|^2$ für $x > 0$, und zwar für die Fälle

   i. $0 < V_0 < E$

   ii. $0 < E < V_0$

b. Nun bewege sich das Teilchen im unten skizzierten eindimensionalen Potential $V(x)$. Seine reellwertige Wellenfunktion $\psi(x)$ sei ebenfalls unten skizziert. $\psi(x)$ soll eine Lösung der *stationären* Schrödinger-Gleichung zur Energie E_1 sein, deren Wert in der Skizze relativ zu $V(x)$ angegeben ist.



Die Skizze der Wellenfunktion $\psi(x)$ enthält einige Fehler.

i. Nennen Sie und begründen Sie mindestens vier solche Fehler.

ii. Skizzieren Sie eine mögliche Wellenfunktion zur Energie E_2.