



Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I Übungsblatt Nr. 1, 25.10.2012

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 06.11.2012

Aufgabe 1: Kastenpotential

Zeigen Sie, dass die möglichen Wellenzahlvektoren q der symmetrischen gebundenen Lösungen im Kastenpotential

$$V(x) = V_0 \theta(|x| - a) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ V_0, & |x| \geq a \end{cases} \quad V_0 > 0 \text{ reell}, \quad (1)$$

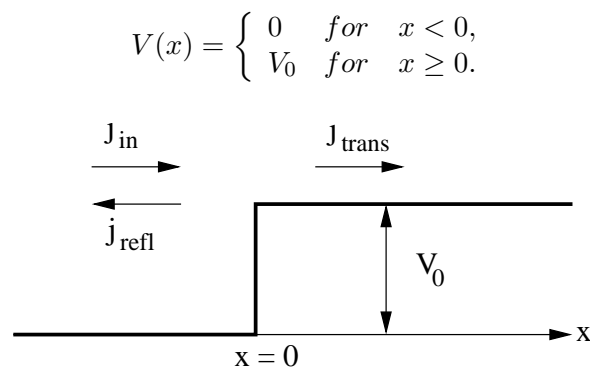
die transzendente Gleichung

$$\tan qa = \frac{\kappa}{q} = \frac{\sqrt{\lambda^2 - (qa)^2}}{qa} \quad (2)$$

mit $\lambda = a\sqrt{2mV_0}/\hbar$ erfüllen.

Aufgabe 2: Stufen-Potential

Eine Teilchenwelle, die von links mit der Energie $E > 0$ ankommt, trifft auf ein Stufen-Potential V :



a) Zeigen Sie, dass für $E > V_0$ der Transmissionskoeffizient $T(E)$ gegeben ist durch

$$T(E) = \frac{4\sqrt{(E - V_0)E}}{(\sqrt{E} + \sqrt{(E - V_0)})^2}.$$

Hinweis: Beachten Sie die Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung bei $x = 0$ und leiten Sie dadurch eine Bestimmungsgleichung für T ab.

b) Zeigen Sie, dass für $0 < E < V_0$ gilt: $R = 1$ und $T = 0$.