Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

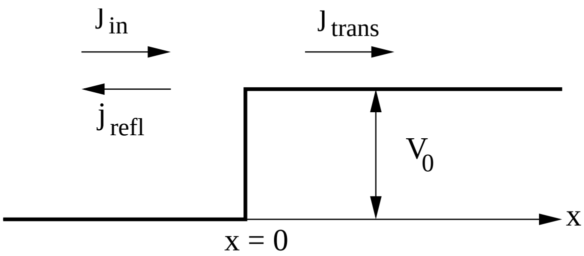
Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 1, 23.10.2018

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 08.11.2018

Aufgabe 1: Stufen-Potential
Eine Teilchenwelle, die von links mit der Energie $E > 0$ ankommt, trifft auf ein Stufen-Potential V:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & for \quad x < 0, \\ V_0 & for \quad x \geq 0. \end{cases}$$



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

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

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 $T = 0$.

c) Nun nehmen Sie an, dass das Potential bei $x = 0$ einen Sprung nach unten macht, d.h.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & for \quad x < 0, \\ -V_0 & for \quad x \geq 0. \end{cases}$$

Zeigen Sie, dass die Transmissionswahrscheinlichkeit für sehr kleine kinetische Energien $E \to 0$ gegen Null geht. Diese Quantenreflektion ist auch im Experiment beobachtet worden.

Aufgabe 2: Spin $\frac{1}{2}$ Zustände

Benutzen Sie die Orthonormalität der Spin-auf $|\uparrow\rangle$ und Spin-runter $|\downarrow\rangle$ Zustände, d.h. $\langle\uparrow|\uparrow\rangle = 1 = \langle\downarrow|\downarrow\rangle$ und $\langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0 = \langle\downarrow|\uparrow\rangle$,
um die Vertauschungsregeln

$$[S_i, S_j] = S_i S_j - S_j S_i = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} S_k, \tag{1}$$

und die Anti-Vertauschungsregeln

$$\{S_i, S_j\} = S_i S_j + S_j S_i = \frac{\hbar^2}{2} \delta_{ij}, \tag{2}$$

die Spin-Operatoren S_i zu beweisen, wobei die Spin-Operatoren gegeben sind durch

$$S_x = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|) \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

$$S_y = \frac{i\hbar}{2} (-|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|) \equiv \frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{5}$$

Beachten Sie: Der total anti-symmetrische Levi-Civita Tensor ε_{ijk} wird definiert mit Hilfe der Einheits-Basisvektoren $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$ eines rechtshändigen kartesischen Koordinatensystems

$$\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j = \sum_k \varepsilon_{ijk} \mathbf{e}_k \ , \tag{6}$$

d.h.

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 0 & \text{mindestens zwei Indices sind gleich} \\ 1 & ijk \text{ ist gerade Permutation von } 123 \\ -1 & ijk \text{ ist ungerade Permutation von } 123 \end{cases} \tag{7}$$

Hinweis: Es reicht, wenn Sie die unterschiedliche Fälle in den Gleichungen (1) und (2) jeweils für ein Paar von Indizes (z.B. $(i, j) = (1, 1), (1, 2)$ und $(2, 1)$) zeigen, da die anderen Fälle durch zyklische Permutation der Indizes $1 \to 2 \to 3 \to 1$ erzeugt werden.