



## Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I Übungsblatt Nr. 1, 24.10.2019

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

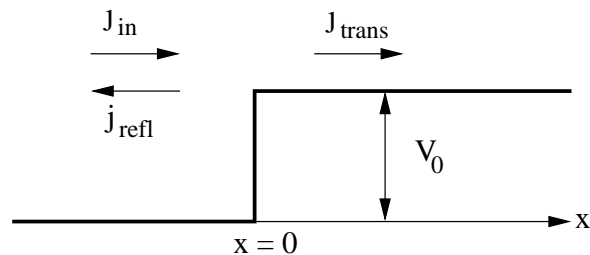
Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 05.11.2019

---

### Aufgabe 1: Stufen-Potential

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

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



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  $T = 0$ .

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

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

Zeigen Sie, dass die Transmissionswahrscheinlichkeit für sehr kleine kinetische Energien  $E \rightarrow 0$  gegen Null geht. Diese Quantenreflexion 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

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

und die Anti-Vertauschungsregeln

$$\{S_i, S_j\} = S_i S_j + S_j S_i = \frac{\hbar^2}{2} \delta_{ij}, \quad (2)$$

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

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

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

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

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

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

d.h.

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

**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  $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$  erzeugt werden.