Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß

Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 11, 04.02.2009

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

`http://www.uni-ulm.de/theochem/`

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 11.02.2009

Aufgabe 15: Optisches Potential

Betrachten Sie ein System mit einem komplexen Potential, d.h., der Hamiltonoperator sei gegeben durch

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_1(\mathbf{x}) + iV_2(\mathbf{x}) \ ,$$

wobei V_1 und V_2 reelle Funktionen von $\mathbf{x}$ seien. Leiten Sie die Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum ab. Welchen Effekt hat das imaginäre, sogenannte optische Potential iV_2?

Zusatzufgabe 16: Teilchen in einem geteilten Kasten

Ein Kasten, der ein Teilchen enthält, ist in eine rechte und linke Hälfte geteilt durch eine dünne Trennwand. Falls das Teilchen im rechten (linken) Teil mit Sicherheit ist, wird das System durch den Zustand $|R\rangle$ ($|L\rangle$) charakterisiert (wir vernachlässigen räumliche Variationen der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der jeweiligen Hälfte des Kastens).

Ein allgemeiner Zustandsvektor kann geschrieben werden als

$$|\alpha\rangle = \langle\alpha|\, R\rangle\, |R\rangle + \langle\alpha|\, L\rangle\, |L\rangle \, ,$$

wo $\langle\alpha|\, R\rangle$ und $\langle\alpha|\, L\rangle$ als “Wellenfunktionen” angesehen werden können.

Das Teilchen kann durch die Trennwand tunneln; dieser Tunneleffekt wird durch den Hamiltonoperator

$$H = \Delta\, [|L\rangle\, \langle R| + |R\rangle\, \langle L|] \, ,$$

beschrieben, wobei Δ eine reelle Zahl der Dimension Energie ist.

a) Finden Sie die normierten Eigenzustände. Was sind die entsprechenden Energieeigenwerte?

b) Im Schrödinger-Bild sind die Basiszustände $|R\rangle$ und $|L\rangle$ konstant, und der Zustandsvektor verändert sich mit der Zeit. Nehmen Sie an, zum Zeitpunkt $t = 0$ würde das System sich im oben beschriebenen allgemeinen Zustand $|\alpha\rangle$ befinden. Bestimmen Sie den Zustandsvektor $|\alpha, t_0 = 0, t\rangle$ für $t > 0$, indem Sie den entsprechenden Zeitentwicklungsoperator auf $|\alpha\rangle$ anwenden.

c) Nun nehmen wir an, dass das Teilchen sich bei $t = 0$ mit Sicherheit in der rechten Hälfte des Kastens befindet. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in der linken Hälfte zu finden als Funktion der Zeit.

d) Stellen Sie die gekoppelten Schrödingergleichungen für die Wellenfunktione $\langle R|\, \alpha, t_0 = 0, t\rangle$ und $\langle L|\, \alpha, t_0 = 0, t\rangle$ auf. Zeigen Sie, das die Lösung der gekoppelten Schrödingergleichung dem entspricht, was man von b) erwartet.

e) Nehmen Sie an, dass der Drucker einen Fehler gemacht hätte und den Hamiltonoperator H als

$$H = \Delta\, |L\rangle\, \langle R| \, .$$

geschrieben hätte. Bestimmen Sie die Zeitentwicklung für einen allgemeinen Zustand und zeigen Sie, dass die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit für diesen Hamiltonoperator verletzt ist.