

Übungen zur Quantenmechanik I

Prof. J. S. Briggs

Blatt 5

SoSe 2005

Aufgabe 1: Morse-Oszillator

Die Schwingung eines zweiatomigen Moleküls mit der reduzierten Masse m kann man näherungsweise mit dem Morse-Potential

$$V(r) = D(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})$$

mit $x = (r - r_0)/r_0$ beschreiben. r_0 ist der Gleichgewichtsabstand des Moleküls.

- Skizzieren Sie das Potential.
- Wie hängt für kleine Oszillationen um r_0 die Eigenfrequenz der Schwingung von den Parametern des Potentials ab? Geben Sie das Energiespektrum an.

Aufgabe 2: Harmonischer Oszillator im homogenen elektrischen Feld

Ein Teilchen der Ladung q bewegt sich eindimensional unter dem Einfluss eines harmonischen Potentials $V_{\text{osc}}(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ entlang der x-Achse. Zusätzlich wirkt ein konstantes elektrisches Feld der Feldstärke F auf dieses Teilchen.

- Wie lautet der Hamiltonoperator dieses Systems?
- Bestimmen Sie die Eigenenergien und Eigenfunktionen des Systems.
Hinweis: Durch quadratische Ergänzung kann der Hamiltonoperator auf den eines verschobenen harmonischen Oszillators gebracht werden.
- Bestimmen Sie den Erwartungswert $\langle d \rangle$ des Dipoloperators in einem Energieeigenzustand. Der Dipoloperator $d = qx$ ist definiert als Produkt aus der Ladung q mit dem Ortsoperator x .
- Das System befinde sich im Grundzustand und das elektrische Feld werde plötzlich abgeschaltet. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, nach dem Abschalten die Energie $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ zu messen?

Hinweis: Verwenden Sie dazu die Beziehung für die erzeugende Funktion der Hermite-Polynome $e^{-\lambda^2+2\lambda z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} H_n(z)$.

Antwort: $P_n = e^{-\xi} \xi^n / n!$ mit $2\xi = \frac{m\omega}{\hbar} \left(\frac{qE}{m\omega^2} \right)^2$.

Aufgabe 3: Parität in einem Modell der Molekülbindung

Das Doppeldeltapotential $V(x) = -\beta[\delta(x + \frac{a}{2}) + \delta(x - \frac{a}{2})]$ mit $\beta > 0$ kann als einfachstes Modell für das H_2^+ -Ion betrachtet werden, an dem sich einige Grundzüge der Molekülbindung studieren lassen. Dabei bewegt sich das Elektron der Masse m im Potential $V(x)$ und der (fixierte) Abstand zwischen den Kernen beträgt a .

- Zeigen Sie: aus der Invarianz des Hamiltonoperators gegenüber der Paritätsoperation $x \rightarrow -x$ (d.h. $H(-x) = H(x)$) folgt: die Eigenfunktionen von $H(x)$ sind entweder symmetrisch oder antisymmetrisch bezüglich Ortsspiegelung, d.h. $\psi_S(x) = \psi_S(-x)$ oder $\psi_A(x) = -\psi_A(-x)$.
- Schreiben Sie einen Ansatz für die Lösung der Schrödingergleichung in den Gebieten $x < -\frac{a}{2}$, $|x| < \frac{a}{2}$ und $x > \frac{a}{2}$ für die symmetrische Lösung $\psi_S(x)$ und die antisymmetrische Lösung $\psi_A(x)$ an.
- Lösen Sie die Gleichungen für die Amplituden der geraden Eigenfunktion, indem sie (i) die Stetigkeitsbedingung für die Wellenfunktion und (ii) die Sprungbedingung für die 1. Ableitung der Wellenfunktion bei $x = \pm a$ beachten (letztere wurde auf Blatt 4, Aufgabe 2 abgeleitet).
- Führen Sie die entsprechende Rechnung wie in c) für die ungerade Eigenfunktion durch. Für welchen Wert von a existiert keine ungerade Lösung mehr?
- Diskutieren Sie die Energieeigenwerte E_S und E_A als Funktion des Kernabstands a und interpretieren Sie das Ergebnis im Sinne der Molekülbindung.