9. Übungsblatt zur Vorlesung Quantenmechanik, SS 2010

Abgabe: Dienstag, 25. 05. 2010, 13:00 bzw. 15:15 Uhr

Aufgabe 30: Streuung an einem attraktiven δ-Potential *(5 Punkte)*

Ein von links einfallender Strom von Teilchen der Energie E trifft auf eine Potentialbarriere

$$V(x) \;=\; -\frac{\hbar^2}{m}\,\Omega\,\delta(x) \ .$$

Berechnen Sie die Wellenfunktion für $x < 0$ und $x > 0$ sowie den Reflektions- und den Transmissionskoeffizienten. Lösen Sie dazu die Schrödingergleichung im Ortsraum.

Aufgabe 31: Paritätsoperator *(5 Punkte)*

Der Paritätsoperator $\hat{S}$ ist durch $\hat{S}\,\psi(\vec{x}) = \psi(-\vec{x})$ definiert, äquivalent zu $\langle\vec{x}|\hat{S} = \langle-\vec{x}|$. Im Folgenden rechnen wir nur in 1 Dimension. Die Aufgaben lassen sich am Einfachsten in Bra- und Ket-Notation lösen, ohne Wellenfunktionen. Zeigen Sie:

(a) $\hat{S}$ ist hermitesch. *Anleitung:* Matrixelemente mit Basisvektoren $|x\rangle$,$|y\rangle$.
Es folgt, dass $\hat{S}\,|x\rangle = |-x\rangle$.

(b) $\langle p|\,\hat{S} = \langle -p|$. *Anleitung:* Einschieben einer Eins und Substitution $x' = -x$.

(c) $\hat{S}\hat{Q} = -\hat{Q}\hat{S}$ und $\hat{S}\hat{P} = -\hat{P}\hat{S}$. *Anleitung:* Spektraldarstellung, Substitution $x' = -x$.

(d) $\hat{S}\hat{V} = \hat{V}\hat{S}$ für ein symmetrisches Potential $\hat{V}$ mit $V(x) = V(-x)$. *Anleitung:* wie (c).
Aus (c) und (d) folgt, dass $\hat{S}$ mit $\hat{H}$ vertauscht, wenn das Potential symmetrisch ist.

(e) Wenn $|\psi_s\rangle$ Eigenzustand des Paritätsoperators ist, also $\hat{S}\,|\psi_s\rangle = s|\psi_s\rangle$, mit $s = \pm 1$, dann verschwinden die Erwartungswerte des Orts- und des Impulsoperators, d.h. es gilt $\langle\psi_s|\hat{Q}|\psi_s\rangle = 0$ und $\langle\psi_s|\hat{P}|\psi_s\rangle = 0$.

Aufgabe 32: Periodische Kette *(10 Punkte)*

Wir betrachten ein einzelnes Teilchen auf einem Ring von N Plätzen. Eine Orthonormalbasis des Vektorraums ist durch die Menge $\{|n\rangle\}$ mit $0 \le n \le N-1$ gegeben, wobei $|n\rangle$ dafür steht, dass sich das Teilchen am Platz n befindet. Die Periodizität kann man durch $|n+N\rangle \equiv |n\rangle$ ausdrücken. Im einfachsten Falle sei der Hamilton-Operator $\hat{H}$ durch

$$\hat{H} \;=\; \sum_{n=0}^{N-1} \{\omega|n\rangle\langle n| +\; t\;(|n+1\rangle\langle n| + |n-1\rangle\langle n|\;)\} \tag{1}$$

definiert. Weiters sei der Operator $\hat{T}$ durch

$$\hat{T}\,|n\rangle \;=\; a\,|n+1\rangle \;+\; b\,|n-1\rangle$$

gegeben. Er ,,transportiert" ein Teilchen von einem Platz n mit der komplexen Amplitude a nach $n+1$ und mit der Amplitude b nach $n-1$.

a) Schreiben Sie $\hat{T}$ als Linearkombination von Produkten der Form $|n_1\rangle\langle n_2|$, indem Sie zunächst $\hat{T}$ von rechts mit $\hat{\mathbb{1}}$ multiplizieren. Wählen Sie geignete a und b, und schreiben Sie den Hamiltonoperator mit Hilfe von T. Zeigen Sie, dass $[H,T]=0$.

b) Ein allgemeiner Vektor in diesem Vektorraum ist $|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} \psi_n\,|n\rangle$. Der mit $\hat{T}$ transformierte Vektor ist

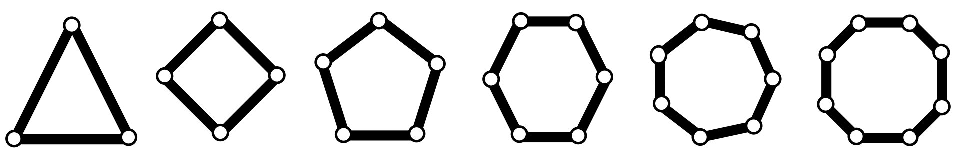
$$\hat{T}\,|\psi\rangle \;=\; \sum_{n=0}^{N-1} \phi_n\,|n\rangle \quad .$$

Bestimmen Sie die Koeffizienten ϕ_n für allgemeine a und b.

c) Zeigen Sie nun für den Fall $a=b=1$ (unter Benutzung von Teil b), dass die Basiszustände des Fourierraums $|k\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=0}^{N-1} \mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{N}\,k\,n}\,|n\rangle$ Eigenzustände von $\hat{T}$ sind.

d) Aus (b) und (c) folgt, dass $|k\rangle$ Eigenfunktionen von H sind. Drücken Sie H in der Eigenbasis aus. Benützen Sie dazu $\langle k|n\rangle = \frac{1}{N}e^{-n\frac{2\pi i}{N}k}$ und drücken Sie $\langle k|n\pm 1\rangle$ mithilfe von $\langle k|n\rangle$ aus.

e) *Anwendung auf zyklische Kohlenwasserstoffverbindungen.*



Wir betrachten die Kohlenstoffverbindungen als regelmäßige N-Polygone, an deren Ecken die Kohlenstoffatome sitzen. Ein π-Elektron kann sich frei auf diesen Ringen bewegen, d.h. es kann von einem Eckpunkt zum Nächsten springen und wird durch den Hamiltonoperator Gl.(1) beschrieben.

Berechnen Sie für zwei Moleküle $N=3$ und 4 das Eigenwertspektrum $E(k)$. Betrachten Sie weiters den *Grenzfall einer unendlichen Kette*. Stellen Sie dazu die Eigenwerte $E(k)$ (*Dispersionrelation*) für $N\to\infty$ dar. Bestimmen Sie, welche extremalen Energieeigenwerte angenommen werden können und geben Sie die entsprechenden k Werte an.

Hinweis: Sie können in der Regel so rechnen, als ob es keine oberen und unteren Grenzen für die Indizes gäbe. Die Periodizität bringt dann normalerweise alles in Ordnung. Es kann von Nutzen sein, Indizes umzubenennen, z.B. $\delta_{i+1,j}=\delta_{i,j-1}$.