PEP 3 – Übungsblatt 9 – WS 2013/2014

Besprechung am 19./20. Dezember 2013

9.1 Radialpotential (10)

Durch die Stetigkeitsbedingung der Wellenfunktion ergibt sich die Quantisierung der Energie gebundener Zustände. Betrachten Sie dazu ein Teilchen in einem Potentialtopf der Form

$V(\vec{r}) = 0$, für $|\vec{r}| \leq r_0$ und

$V(\vec{r}) = \infty$, für $|\vec{r}| > r_0$.

(a) Zeigen Sie, daß die Wellenfunktion $\psi(r) = a \cdot \frac{\sin kr}{kr}$ eine Lösung der Schrödingergleichung (Radialgleichung, keine Abhängigkeit von ϕ und θ, i.e. $l = 0$) dieses Systems ist, die lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r})\right] + V(r) = E\psi.$$

Prüfen Sie insbesondere die Stetigkeit der Wellenfunktion bei $r = r_0$.

(b) Welche Werte ergeben sich für k und die Energie E des Teilchens?

Lösung:

$\psi(r) = a \cdot \frac{\sin kr}{kr}$, unabhängig von θ und ϕ, also $l = m = 0$.

$$\frac{d\psi}{dr} = a\frac{krk\cos(kr) - \sin(kr)k}{k^2r^2} = a\frac{kr\cos(kr) - \sin(kr)}{kr^2}.$$

$$r^2\frac{d\psi}{dr} = \frac{a}{k}(kr\cos(kr) - \sin(kr)).$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi}{dr}\right) = \frac{a}{k}(k\cos(kr) - k^2r\sin(kr) - k\cos(kr)) = -akr\sin(kr).$$

$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}(-akr\sin(kr)) + 0 = Ea\frac{\sin(kr)}{kr}$, für $r \leq r_0, V = 0$,

$\frac{\hbar^2k^2}{2m}a\frac{\sin(kr)}{kr} = Ea\frac{\sin(kr)}{kr}$, damit folgt

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}.$$

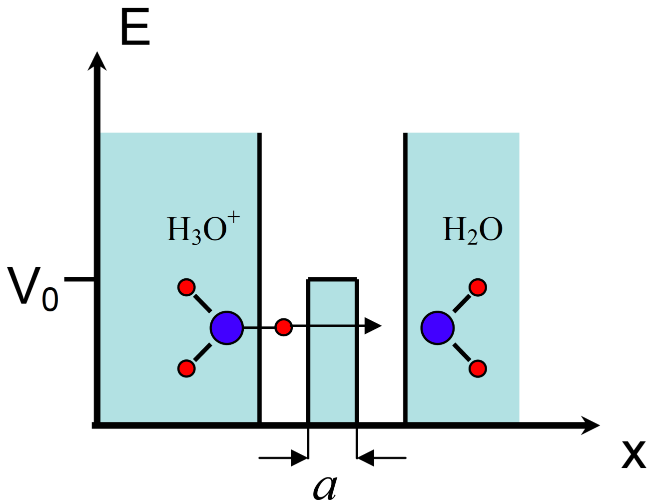
k aus $\psi(r_0) = 0$, daraus folgt $a\frac{\sin(kr)}{kr} = 0$,

$kr_0 = n\pi, n = 1, 2, 3, ...$

$$k = \frac{n\pi}{r_0}.$$

9.2 Protonen-Tunneln in chemischen Reaktionen (10)

Die Fähigkeit von positiven Wasserstoff-Ionen (Protonen), eine Potentialbarriere durch Tunneln zu überwinden, bestimmt die Geschwindigkeit von Protonen-Transferreaktionen in Lösungen und damit z.B. die Eigenschaften von Säuren und Basen. In der Abbildung ist als Beispiel die Transferreaktion eines Protons von einem Hydronium-Ion (H_3O^+) zu einem benachbarten Wassermolekül skizziert.



In deuterierten Proben sind Protonen durch Deuteronen ersetzt (ein Deuteron hat etwa die doppelte Masse eines Protons). Überlegen Sie, welchen Einfluß das auf die Reaktionsraten hat.

(a) Qualitativ: Welche Transferreaktion wird die größere Rate aufweisen?

(b) Quantitativ: Berechnen Sie die relative Wahrscheinlichkeit, daß ein Proton und ein Deuteron durch dieselbe Barriere der Höhe $V_0 = 1eV$ und Länge $a = 100$ pm tunnelt, wenn deren Energie jeweils 0.9 eV beträgt ($m_p \approx 1u$ und $m + d \approx 2u$).

Lösung:

(a)

(b) $T = e^{-2ka}, k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)},$

$V_0 = 1eV,$

$E = 0.9eV,$

$a = 100pm,$

$m_p = 1u,$

$m_d = 2u.$

$\frac{T_p}{T_d} = e^{-2k_pa+2k_da} = e^{-2k_pa+2k_pa\cdot\sqrt{2}} = e^{2k_pa(\sqrt{2}-1)} = 303.$

9.3 Klassischer zweidimensionaler harmonischer Oszillator (10)

Betrachten Sie ein Teilchen der Masse m im harmonischen Potential $V(x,y) = \frac{m}{2}\omega^2(x^2+y^2)$. Aus der Bewegungsgleichung ergibt sich allgemein $x(t) = x_M \cos(\omega t - \phi_x)$ und $y(t) = y_M \cos(\omega t - \phi_y)$, mit x_M, y_M den Amplituden und $\phi_{x,y}$ den dazugehörigen Phasen.

(a) Wie lauten die Impulse $p_x(t)$ und $p_y(t)$?

(b) Die Drehimpulskomponente in $z-$Richtung ist eine Erhaltungsgröße, $L_z = xp_y - yp_x$, hängt also nicht von der Zeit t ab. Beweisen Sie dies.

(c) Für welche relative Phasenbeziehung $\phi_y - \phi_x$ ist L_z positiv (Teilchen der Masse m bewegt sich gegen den Uhrzeigersinn), für welche negativ?

(d) Für welche relative Phasenbeziehung $\phi_y - \phi_x$ ist L_z gleich Null, für welche Werte maximal, bzw. minimal?

Hinweis: Verwenden Sie die Identität $\cos\alpha\sin\beta - \sin\alpha\cos\beta = -\sin(\alpha-\beta)$.

Lösung:

(a) $p_x(t) = m\dot{x} = -m\omega x_M \sin(\omega t - \phi_x)$,
$p_y(t) = m\dot{y} = -m\omega y_M \sin(\omega t - \phi_y)$.

(b) $L_z = xp_y - yp_x$ ...(Identität),
$L_z = m\omega x_M y_M \sin(\phi_y - \phi_x) = const.$

(c) $0 < \phi_y - \phi_x < \pi, L_z$ ist positiv, die Bewegung läuft also gegen den Uhrzeigersinn.
$-\pi < \phi_y - \phi_x < 0, L_z$ ist negativ, die Bewegung läuft also gegen den Uhrzeigersinn.

(d) zwei geradlinige Moden, $\phi_y - \phi_x = \pm\pi$ und$\phi_y - \phi_x = 0, L_z = 0$.
L_z ist maximal, wenn $\phi_y - \phi_x = \pm\pi/2$.

9.4 Weihnachtsaufgabe: Zweidimensionaler harmonischer Oszillator (10 Extrapunkte)

Folgende Funktionen in Polarkoordinaten sind Eigenfunktionen des zweidimensionalen harmonischen Oszillators

$$\chi_{2,0}(\rho, \phi) = \frac{\beta}{\sqrt{2\pi}}(\beta\rho)^2 e^{-\beta^2\rho^2/2} e^{2i\phi}$$

$$\chi_{1,1}(\rho, \phi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}}[(\beta\rho)^2 - 1] e^{-\beta^2\rho^2/2}$$

$$\chi_{0,2}(\rho, \phi) = \frac{\beta}{\sqrt{2\pi}}(\beta\rho)^2 e^{-\beta^2\rho^2/2} e^{-2i\phi}$$

mit $\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ und

$x = \rho\cos\phi, \rho \geq 0,$

$y = \rho\sin\phi, 0 \leq \phi < 2\pi.$

(a) Bestimmen Sie die Eigenwerte L und L_z des Drehimpulsoperators für alle drei Eigenfunktionen.

(b) Zeichnen Sie den Bahndrehimpuls L und L_z in ein gemeinsames Schaubild.

Hinweis: In Polarkoordinaten gilt: $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$ und $L^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$.

Lösung:

(a) $L_z = +2, 0, -2$ für die drei Eigenfunktionen,
$L^2 = m^2, L = |m| = 2.$