
Seminar zur Vorlesung Quantenmechanik
Übungsblatt 7
Teilchen im Kasten und Harmonischer Oszillator

Wintersemester 15/16

1 Teilchen im Kasten

a) Gegeben sei ein Teilchen (Masse m) im eindimensionalen Kasten mit dem Potential $V(x)$:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x \leq 0 \\ 0 & \text{für } 0 < x < 2L \\ \infty & \text{für } x \geq 2L \end{cases} \quad (1)$$

(i) Berechnen Sie k durch Betrachtung der Randbedingungen ($\psi(0)$ und $\psi(2L)$). Verwenden Sie als Ansatz für die Wellenfunktion $\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$.

(ii) Normieren Sie die Wellenfunktion.

(iii) Berechnen Sie durch Einsetzen der Wellenfunktion in die Schrödinger-Gleichung des Teilchens innerhalb des Kastens die Energie des n -ten Zustands (E_n).

b) (i) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle \hat{x} \rangle$ und $\langle \hat{p}_x \rangle$ für das Teilchen im eindimensionalen Kasten.

(ii) Skizzieren Sie das Potential $V(x)$ sowie die Wellenfunktionen für den ersten und zweiten Zustand.

(iii) Wie groß ist die Energiedifferenz (in eV) zwischen dem ersten und zweiten Zustand für ein Elektron ($m = 9.1094 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$) bei einer Kastenbreite von 0.8 nm .

Wichtige Integrale und andere Hinweise für die Aufgabe:

$$\begin{aligned} \int \sin^2(ax) \, dx &= \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a} \\ \int x \sin^2(ax) \, dx &= \frac{x^2}{4} - \frac{x \sin(2ax)}{4a} - \frac{\cos(2ax)}{8a^2} \\ \int \sin(ax) \cos(ax) \, dx &= \frac{\sin^2(ax)}{2a} \end{aligned}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$1 \text{ eV} = 1.60218 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

2 Schwingungszustände

Die Wellenfunktion des harmonischen Oszillators mit der Auslenkung x hat die Form:

$$\psi_n(y) = N_n H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \quad (2)$$

mit der Normierungskonstanten N_n , dem Hermite-Polynom $H_n(y)$, $y = \sqrt{\alpha}x$ und $\alpha = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$. Die Hermite-Polynome können über

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad (3)$$

berechnet werden. Für die Hermite-Polynome gilt außerdem die Rekursionsformel:

$$H_{n+1} = 2yH_n - 2nH_{n-1} \quad (4)$$

Des Weiteren ist die Orthogonalitätsrelation Gl. (5) nützlich:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} H_n(y) H_m(y) dy = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm} \quad (5)$$

Die Intensität I eines spektroskopischen Übergangs zwischen den Schwingungszuständen $\psi_n(y)$ und $\psi_m(y)$ ist proportional zum Quadrat des Integrals μ_{mn} (Übergangsdipolmoment):

$$I \sim |\mu_{mn}|^2 \quad \text{mit} \quad \mu_{mn} = -e \langle \psi_m | y | \psi_n \rangle = -e \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* y \psi_n dy \quad (6)$$

- a) (i) Berechnen Sie die Hermite-Polynome H_0 , H_1 und (mittels Gl. (4) !) H_2 .
- (ii) Wie lautet die allgemeine Normierungskonstante N_n ? Verwenden Sie Gleichung (5).
- (iii) Geben Sie die normierten Wellenfunktionen ψ_0 und ψ_1 an. Skizzieren Sie diese zusammen mit dem Potential $V(x)$ des Harmonischen Oszillators.
- b) (i) Geben Sie die Gleichung zur Berechnung von E_n für den Harmonischen Oszillator an.
- (ii) Wie groß ist die Nullpunktsenergie (in Hartree) eines harmonischen Oszillators von $^{35}\text{Cl}^{35}\text{Cl}$ mit einer Kraftkonstante k von 319 N/m hat?
- (iii) Die Anregung der Grundschiwingung eines zweiatomigen Moleküls, wie CO, erfolgt durch den energetischen Übergang vom Grund- zum ersten angeregten Schwingungszustand des Harmonischen Oszillators. Geben Sie eine Formel an, mit der man die Energiedifferenz eines solchen Übergangs berechnen kann!
- Die Nullpunktsenergie für CO beträgt $2.12847 \cdot 10^{-20}$ J. Wie groß ist die Energiedifferenz (in Hartree), die Wellenzahl $\tilde{\nu}$ (in cm^{-1}) sowie die Kraftkonstante (in N/m) für CO? Ist die CO-Bindung stärker oder schwächer als die von $^{35}\text{Cl}^{35}\text{Cl}$?

Hinweise:

Schwingungsfrequenz 2-atomiges Molekül	$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ mit $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ und $\nu = \tilde{\nu} \cdot c$
Benötigte Massen in u	$m_C = 12.011$ $m_O = 15.999$ $m_{^{35}\text{Cl}} = 34.969$
Masseneinheit	$u = 1.66054 \cdot 10^{-27}$ kg
Plancksches Wirkungsquantum	$h = 6.62607 \cdot 10^{-34}$ Js
Einheit Hartree	$1 \text{ Ha} = 4.35974 \cdot 10^{-18}$ J
Lichtgeschwindigkeit	$c = 2.99792 \cdot 10^8$ m/s

- c) (i) Beweisen Sie die Auswahlregel für Schwingungsübergänge im Harmonischen Oszillator, welche besagt dass ein solcher Übergang nur für $\Delta\nu = \pm 1$ (d.h. $m = n \pm 1$) möglich ist.
Hinweise: Für einen erlaubten Übergang ist das Übergangsdipolmoment $\neq 0$. Setzen Sie die Wellenfunktion (Gl. (2)) für m und n in Gl. (6) ein, lösen Sie Gl. (4) nach yH_n auf und substituieren Sie dies dann in Gl. (6). Zerlegen Sie dann das erhaltene Integral geschickt.
- (ii) Berechnen Sie μ_{mn} für den Fall $m = n + 1$.
- (iii) Warum könnten im Experiment dennoch Übergänge mit $\Delta\nu = \pm 2, \pm 3, \dots$ auftreten?