FREIE UNIVERSITÄT BERLIN

Fachbereich Physik

Übungen zur Vorlesung

''Einführung in die Physik der Atome und Moleküle I'' (SoSe 2008)

- Prof. Karsten Heyne -

Aufgabenblatt 3 vom 01.05.2008

Abgabe bei der Vorlesung oder per E-Mail an: fidder@physik.fu-berlin.de
vor Donnerstag 08.05.2008, 12h30.

Aufgabe 3–1 (1 + 1 Punkte)

(a) Zeigen Sie, dass für die Zeitabhängigkeit eines Erwartungswertes gilt:

$$\frac{d}{dt} < u >= \frac{1}{i\hbar} < [u, H] > + < \frac{\partial u}{\partial t} >$$

Hinweis: der Hamiltonian H ist hermitisch.

(b) Berechnen Sie $\frac{d}{dt} < p >$, wobei $p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ und $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$.

Aufgabe 3–2 (1 + 1 + 1 Punkte)

Die Wahrscheinlichkeit T, mit der ein Teilchen der Masse m und der kinetischen Energie E eine rechteckige Potentialbarriere der Höhe V_0 und der Breite a durchtunneln kann, ist gegeben durch:

$$T = \left(1 + \frac{sinh^2[{v_0}^{1/2}(1-r)^{1/2}]}{4r(1-r)}\right)^{-1}.$$

Dabei ist $v_0 = 2mV_0a^2/\hbar^2$ und $r = E/V_0$.

(a) Berechnen Sie den Grenzwert von T für $r \to 1$.

(b) Tragen Sie $T(r)$ gegen r für $v_0 = 1/2$, 1 und 2 auf. Diskutieren Sie das Ergebnis.

(c) Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit T, mit der ein Elektron mit der kinetischen Energie 8.0×10^{-21} J eine Potentialbarriere (V_0= 12.0 $\times 10^{-21}$ J, a = 1.0 nm) durchtunneln kann.

Aufgabe 3–3 (0.5 + 0.5 + 1 + 2.5 + 0.5 Punkte)

Betrachten Sie die beiden folgenden Situationen:
1) Ein 1-dimensionaler Potentialkasten mit der Länge 2L und dem Potential V=0 innerhalb des Kastens und V$\to \infty$ an den Kastenwänden.
2) Dergleiche Kasten, jedoch gespalten in zwei 1-dimensionale Potentialkästen, beide mit der beide Länge L, wobei ebenfalls bei der zentralen Wand (bei $x = L$) gilt V$\to \infty$.

(a) Geben Sie die 4 niedrigsten Energien für die Eigenzustände jedes Kastens an, und zeichnen Sie die jeweiligen Wellenfunktionen und Energieniveaus in die drei Kästen ein.

In der Statistischen Mechanik ist die Entropie (S) definiert als: $S = -k \sum p_i ln p_i$, wobei k die Boltzmann-Konstante ist und p_i die Wahrscheinlichkeit, dass das System sich im Zustand i befindet. (Verwenden Sie das Label $|n_{2L}\rangle$ für die Eigenzustände des Potentialkastens mit der Länge 2L.)

(b) Ordnen Sie die folgenden Wellenfunktionen nach abnehmender Entropie und berechnen Sie die Entropie S dieser Wellenfunktionen.

$|\Psi_1\rangle = 1/\sqrt{3}\,|1_{2L}\rangle + 1/\sqrt{3}\,|2_{2L}\rangle + 1/\sqrt{3}\,|3_{2L}\rangle$
$|\Psi_2\rangle = |3_{2L}\rangle$
$|\Psi_3\rangle = 1/\sqrt{2}\,|1_{2L}\rangle + 1/\sqrt{3}\,|2_{2L}\rangle + 1/\sqrt{6}\,|3_{2L}\rangle$

(c) Berechnen Sie die Energieerwartungswerte für die Wellenfunktionen in (b). Bedeutet ein hoher Energieerwartungswert eine hohe Entropie?

(d) Nehmen Sie an, dass das System der zwei 1-dimensionalen Potentialkästen der Länge L zunächst so präpariert ist, dass im linken Kasten nur der niedrigste Zustand $|1_{L-links}\rangle$ besetzt ist, während der rechte Kasten leer ist.
Jetzt stören wir das System durch Wegnahme der zentralen Wand, ohne die Energie des gesamten Systems zu ändern. Nach dieser Änderung wird das System seine Entropie maximieren.

Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, das System in den Eigenzuständen $|n_{2L}\rangle$ mit n=1,2,3 anzutreffen, nachdem das System seine Entropie maximiert hat. Nehmen Sie für die Eigenzustände $|n_{2L}\rangle$ mit $n > 3$ die Wahrscheinlichkeit $p_n = 0$ an.

Hinweis: Verwenden Sie Normierung und Energieerhaltung, um die Wahrscheinlichkeiten p_1 und p_2 als Funktion von p_3 zu finden. Dann maximieren Sie die Entropie, um die Werte von p_3 zu bestimmen (und am Ende S zu berechnen).

(e) Das quantenmechanische System konnte nicht relaxieren, bevor die zentrale Wand weggenommen wurde. Die in (d) berechnete Verteilung muss nicht die thermische Verteilung sein. Durch Energieabgabe zum Strahlungsfeld kann das System seine Energie noch weiter senken.
Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeiten p_n mit n=1,2,3 ($p_n = 0$ für $n > 3$) für eine thermische Verteilung über diese Zustände, wobei wir $kT = \frac{h^2}{32mL^2}$ verwenden.