Prof. D. Egorova

WS 2011/2012
26.12.2011

# Zwischentest zur Vorlesung
# Theoretische Chemie, Teil I: Quantenmechanik

Abgabe am 10.01.2012 oder nach Vereinbarung. Bitte geben Sie an, wie lange Sie für die Lösung gebraucht haben.

1. Warum sind Operatoren physikalischen Größen hermitesch?

   (1 Punkt)

2. Geben Sie die Eigenwertgleichung eines zeitunabhängigen Hamiltonsoperators an.

   (1 Punkt)

3. Es sei $\Psi(x)$ eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung zum Eigenwert $E$. Wie lautet die zugehörige Lösung $\Psi(x,t)$ der zeitabhängigen Schrödingergleichung?

   (1 Punkt)

4. Ein freies Teilchen bewegt sich entlang der $x$-Achse und besitzt den Impuls $p_x$. Was können Sie über

   (a) die Koordinate des Teilchens

   (b) die Energie des Teilchens

   aussagen (Begründung!)?

   (2 Punkte)

5. Wir betrachten ein Teilchen in einem zweidimensionalen Kastenpotential.
   Der Hamiltonoperator für dieses System sei gegeben als

   $$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + V_x + V_y \quad .$$

   Die Potentialfunktionen $V_x$ und $V_y$ seien wie folgt definiert:

   $$V_x = \begin{cases} 0 & \text{falls} \quad 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \qquad V_y = \begin{cases} 0 & \text{falls} \quad 0 \leq y \leq b \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

   Als Lösungsansatz für die Gesamtwellenfunktion nehmen wir

   $$\Psi_{l,n}(x,y) = \varphi_l(x)\varphi_n(y)$$

   an, wobei $\varphi_l(x)$ und $\varphi_n(y)$ die Eigenfunktionen der entsprechenden eindimensionalen Kästen seien.

   (a) Zeigen Sie, daß $\Psi_{l,n}$ Eigenfunktionen zu $\hat{H}$ sind. Geben Sie die Eigenwerte von $\hat{H}$ an. Unter welcher Bedingung können entartete Eigenwerte auftreten, d. h. $E_{n,l} = E_{n',l'}$ ($n \neq n'$ und $l \neq l'$)?

   (b) Geben Sie die Grundzustandswellenfunktion an.

   (5 Punkte)

6. Der Zustand eines Systems sei mittels der Wellenfunktion $\Psi(t)$ beschrieben. Zum Zeitpunkt $t = 0$ gilt $\Psi(t = 0) = \Psi_0$. Darüber hinaus sind auch die Eigenfunktionen, $\phi_n$, und Eigenwerte, $E_n$, des Hamiltonoperators, $H$, des Systems bekannt.

   (a) Drücken Sie $\Psi(t)$ durch $\Psi_0$, $\phi_n$ und $E_n$ aus. Benutzen Sie dafür die zeitabhängige Schrödingergleichung um zu zeigen, dass $\Psi(t) = e^{-iHt}\Psi_0$, und stellen Sie $\Psi_0$ als lineare Kombination der stationären Zuständen $\phi_n$ dar.

   (b) Geben Sie die Wahrscheinlichkeit die Energie $E_n$ zu messen an.

(6 Punkte)

7. Geben Sie die Übergangsenergie $E_m - E_n$ für den eindimensionalen harmonischen Oszillator an.

(1 Punkt)

8. Berechnen Sie $\Delta x \Delta p$ und verifizieren Sie die Heisenbergsche Unschärferelation für den eindimensionalen harmonischen Oszillator in einem stationären Zustand $\phi_n$. Die dimensionslose Koordinate $\xi$ und Impuls $p_\xi$ sind durch $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ und $p_\xi = p/\sqrt{m\omega\hbar}$ defeniert, wobei $m$ und $\omega$ die Masse und die Frequenz bezeichnen. Stellen Sie die Operatoren $\hat{\xi}$ und $\hat{p}_\xi$ durch Vernichter und Erzeuger $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\xi} + i\hat{p}_\xi)$ bzw. $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\xi} - i\hat{p}_\xi)$ dar und berücksichtigen Sie $\hat{a}|\phi_n\rangle = \sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle$ und $\hat{a}^\dagger|\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\phi_{n+1}\rangle$. Die Varianz einer Größe $f$ ist defeniert durch $\Delta f = \sqrt{\langle \hat{f}^2\rangle - \langle \hat{f}\rangle^2}$.

(11 Punkte)

9. Wir betrachten das Wasserstoffatom.

   (a) Geben Sie alle möglichen Kombinationen der Quantenzahlen $l$ und $m$ für die Hauptquantenzahl $n = 4$ an.

   (1 Punkt)

   (b) Geben Sie Übergangsenergie $E_m - E_n$ an.

   (1 Punkt)

   (c) Gegeben sei die Wellenfunktion

   $$\Psi_{3d_{xy}} = \frac{-i}{\sqrt{2}}\left(\Psi_{32m=2} - \Psi_{32m=-2}\right)$$

   Dabei bezeichnen $\Psi_{32m}$ Eigenfunktionen der Operatoren $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ zu den Quantenzahlen $n = 3$, $l = 2$, $m$.

   Das System sei im Zustand $\Psi_{3d_{xy}}$ präpariert. Dann wird eine Messung der Drehimpulskomponente in $z$-Richtung, $\hat{L}_z$, durchgeführt.

      i. Geben Sie die möglichen Meßwerte an.

      ii. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeiten, mit denen diese Meßwerte auftreten.

(3 Punkte)