# Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I Sommersemester 2017

## 5. Übungsblatt

24.5.2017

1. Ein isoliertes Teilchen im Kasten $[0; L]$ besitzt folgende *normierte* Wellenfunktionen:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)$$

mit $n = 1, 2, 3, \ldots$. Der Zustand mit $n = 1$ heißt *Grundzustand*, der Zustand mit $n = 2$ *erster angeregter Zustand*, der Zustand mit $n = 3$ *zweiter angeregter Zustand*, etc.

Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Zustand $n$ in einem bestimmten Intervall $[x_1; x_2]$ zu finden, und zwar

(a) $x_1 = 0; x_2 = L/6; n = 1$ (erstes Sechstel der Box im Grundzustand)

(b) $x_1 = L/6; x_2 = L/3; n = 1$ (zweites Sechstel der Box im Grundzustand)

(c) $x_1 = L/3; x_2 = L/2; n = 1$ (drittes Sechstel der Box im Grundzustand)

(d) Für die obigen drei Intervalle der Box im *ersten angeregten Zustand*.

(e) Für die obigen drei Intervalle der Box im *zweiten angeregten Zustand*.

(f) Für die obigen drei Intervalle der Box im 9., 19., und 29. angeregten Zustand.

(g) Skizzieren Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der drei Intervalle in Abhängigkeit von der Quantenzahl $n$. Was beobachten Sie?

Please turn page!!

2. Gegeben sind die beiden Funktionen

$$\psi_0(x) = N_0 \cdot e^{-\frac{x^2}{2}}$$

$$\psi_1(x) = N_1 \cdot x \cdot e^{-\frac{x^2}{2}}$$

(a) Zeigen Sie, dass die beiden Funktionen Eigenfunktionen des Operators

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2$$

sind und bestimmen Sie die dazugehörigen Eigenwerte.

(b) Bestimmen Sie die multiplikativen Normierungsfaktoren $N_0$ und $N_1$.

(c) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle \frac{\partial}{\partial x} \rangle$, und $\langle -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rangle$ für die beiden Zustände. Der Erwartungswert $\langle O \rangle_{\psi_i}$ im Zustand $\psi_i$ ist hier definiert als

$$\langle O \rangle_{\psi_i} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) \hat{O} \psi_i(x) \mathrm{d}x \,.$$

<u>Hinweis:</u> Die auftretenden Integrale lauten (siehe auch "Stammfunktion" Nr. 16):

$$\begin{aligned}
I_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2)\mathrm{d}x = \sqrt{\pi} \\
I_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot \exp(-x^2)\mathrm{d}x = 0 \\
I_2 &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \cdot \exp(-x^2)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} \\
I_3 &= \int_{-\infty}^{\infty} x^3 \cdot \exp(-x^2)\mathrm{d}x = 0 \\
I_4 &= \int_{-\infty}^{\infty} x^4 \cdot \exp(-x^2)\mathrm{d}x = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}
\end{aligned}$$