

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I Sommersemester 2017

10. Übungsblatt

05.7.2017

1. Was unterscheidet Ψ_{nlm} von $\Psi_{nlm}^* \cdot \Psi_{nlm}$ und welche physikalische Bedeutung haben sie. Die Wellenfunktionen beim H-Atom existieren von 0 bis ∞ . Wie ist es möglich, dass elektronische Zustände eine räumliche Struktur besitzen? Wie ist ein Orbital definiert?
2. Bestimmen Sie das Maximum der radialen Dichteverteilungsfunktion im 1s- Orbital als den Abstand des Elektrons vom Kern, an dem es am häufigsten anzutreffen ist.

$$P(r) = 4\pi r^2 \psi_{100}^2$$

3. Die Spin-Funktionen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ sind nicht explizit angegeben, jedoch sind die Kommutatorbeziehungen zwischen den Operatoren und die Wirkung der Operatoren auf die Funktionen bekannt (s. Vorlesung). Es gilt

$$\hat{s}^2|\alpha\rangle = s(s+1)\hbar^2|\alpha\rangle \quad s = \frac{1}{2}$$

$$\hat{s}^2|\beta\rangle = s(s+1)\hbar^2|\beta\rangle \quad s = \frac{1}{2}$$

$$\hat{s}_z|\alpha\rangle = m_s\hbar|\alpha\rangle \quad m_s = \frac{1}{2}$$

$$\hat{s}_z|\beta\rangle = m_s\hbar|\beta\rangle \quad m_s = -\frac{1}{2}$$

$$\hat{s}_x|\alpha\rangle = \frac{1}{2}\hbar|\beta\rangle \quad \hat{s}_x|\beta\rangle = \frac{1}{2}\hbar|\alpha\rangle$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\beta|\beta\rangle = 1 \quad \langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle = 0$$

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar\hat{s}_z \quad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hbar\hat{s}_x \quad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hbar\hat{s}_y$$

- (a) Berechnen Sie die Erwartungswerte von \hat{s}^2 und \hat{s}_z^2 jeweils in den Zuständen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$.
- (b) Offenbar ist $\langle\hat{s}_z^2\rangle = \frac{1}{3}\langle\hat{s}^2\rangle$. Wie groß ist $\langle\hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2\rangle$ in den Zuständen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$?
- (c) Berechnen Sie $\langle\hat{s}_x^2\rangle$ direkt mit den obigen Angaben für $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$.