Weihnachtsblatt zur Vorlesung PCII

WS 2003/2004 Ausgabe: 18.12.2003 Abgabe 5.1.2003 (10:15 Uhr)

<u>Aufgabe 1:</u>

Man zeige, dass der Bahndrehimpuls eines Teilchens die Vertauschungsrelation:

$\left[\hat{l}_x, \hat{l}_y\right] = i\hbar\hat{l}_z$ erfüllt. Man benutze die Heisenberg-Vertauschungsrelationen:

$[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{y}, \hat{z}] = [\hat{z}, \hat{x}] = 0$ $\left[\hat{p}_x, \hat{p}_y\right] = \left[\hat{p}_y, \hat{p}_z\right] = \left[\hat{p}_z, \hat{p}_x\right] = 0$

$[\hat{x}, \hat{p}_x] = \left[\hat{y}, \hat{p}_y\right] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$ und

$$\vec{\hat{l}} = \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{p}_x \\ \hat{p}_y \\ \hat{p}_z \end{pmatrix}$$

<u>Aufgabe 2:</u>

Gegeben seien die 2-dimensionalen Spinoperatoren in Matrixdarstellung:

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

und $\psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ die Eigenvektoren zu $\hat{s}_z$. Man berechne:

a) $\hat{s}_x^2 = \hat{s}_x \cdot \hat{s}_x$, weiter $\hat{s}_y^2$ und $\hat{s}_z^2$.

b) Wie sieht der Operator für $\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$ aus?

c) Zu welchen der vier unter (a) und (b) berechneten Operatoren sind ψ_1 und ψ_2 Eigenfunktionen ? Geben Sie jeweils den Eigenwert an.

Aufgabe 3:

Der Grundzustand des harmonischen Oszillators mit dem Hamiltonoperator:
$\hat{E} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{k}{2}\hat{x}^2$, ist gegeben durch die Gaussche Wellenfunktion:

$$\psi_0 = C \exp\left\{-gx^2\right\}$$

wobei *x* die Auslenkung vom Gleichgewicht und *k* die Kraftkonstante darstellen.

a) Zeigen Sie, dass die Funktion der Schrödinger-Gleichung genügt und geben Sie die Konstante g als Funktion der Masse m und der Kraftkonstante k an.
b) Bestimmen Sie die Energie des Grund- und des ersten angeregten Zustandes.

Aufgabe 4:

Die Energieeigenwerte E_n und die Wellenfunktion ψ_n eines Elektrons in einem durchkonjugierten Molekül der Länge L sind gegeben durch:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad \text{mit } n = 1,2,...$$

$$\psi_n = \sqrt{(2/L)}\sin(n\pi x/L)$$

Berechnen Sie die Energieaufspaltung zwischen den Niveaus in den Einheiten [J], [kJ/mol] und [eV] für:

(a) n=2 und n=1
(b) n=6 und n=5

und mit L = 1 nm.

Zeichnen Sie in ein Diagramm die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons entlang des Moleküls für den Grund- und die ersten drei angeregten Zuständen.