Klausur zur Vorlesung Theoretische Chemie I

Lösen Sie bitte jede Aufgabe auf einem separaten Blatt. Verwenden Sie nur das zur Verfügung gestellte Papier. Schreiben Sie auf jedes Ihrer Lösungsblätter oben rechts Name, Vorname und Matrikelnummer. Lösen Sie die Aufgaben nachvollziehbar auf Grundlage der in der Vorlesung und in den Übungen besprochenen Sätze und Definitionen. Hilfsmittel sind nicht erlaubt.

---

1. (2 Punkte)

Echtes Myonium ist ein postuliertes, exotisches Atom, welches aus einem Myon (μ^-) und einem Antimyon (μ^+) besteht. Das Myon ist ein Elementarteilchen mit Ladung $-e$, Spin $\frac{1}{2}$, jedoch mit einer ca. 200 mal höheren Masse als das Elektron ($m_\mu \simeq 206 * m_e$). Das Antimyon ist das entsprechende Antiteilchen mit gleicher Masse, gleichem Spin und der Ladung $+e$. Die Grundzustandsenergie des echten Myoniums kann mit Hilfe der Analogie zum Wasserstoffatom abgeschätzt werden als:

$$E = -\frac{m_\mu e^4}{64\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}.$$

Welche Energie besitzt der erste angeregte Zustand des echten Myoniums und wievielfach ist er entartet ?

2. (5 Punkte)

Ein Wasserstoffatom befinde sich im $3\mathrm{d}_{xz}$-Zustand. Welche Messwerte erhält man mit welchen Wahrscheinlichkeiten, wenn man

(a) L_z (den Drehimpuls um die z-Achse)
(b) L_x (den Drehimpuls um die x-Achse)
(c) L^2 (das Betragsquadrat des Gesamtdrehimpulses)

misst?

3. (5 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \quad .$$

(a) Zeigen Sie, daß für diesen Hamiltonoperator

$$\psi(x) = c \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta x}, \qquad c, \beta \in \mathbb{C}$$

eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung ist. Geben Sie die Energie des Zustands an.

(b) Welche Messwerte erhalten Sie mit welcher Wahrscheinlichkeit, wenn Sie eine Impulsmessung durchführen?

(bitte wenden)

4. (10 Punkte)

Ein System befindet sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand

$$\Phi = c_1\Phi_0 + c_2\Phi_1$$

wobei Φ_0 und Φ_1 normierte Eigenzustände zum Hamiltonoperator sind. Hierbei gilt

$$\hat{H}\Phi_0 = (E_0 - \Delta)\Phi_0, \tag{1}$$
$$\hat{H}\Phi_1 = (E_0 + \Delta)\Phi_1. \tag{2}$$

(a) Wenn man zum Zeitpunkt $t = 0$ eine Energiemessung durchführen würde, welche Meßwerte erhielte man mit welchen Wahrscheinlichkeiten?

(b) Betrachten Sie den Fall $c_1 = 0, c_2 = 1$. Geben Sie die Wellenfunktion für Zeiten $t > 0$ an.
Welche Eigenwerte würden Sie mit welchen Wahrscheinlichkeiten bei einer Energiemessung zu einem Zeitpunkt $t > 0$ erhalten?

(c) Betrachten Sie den Fall $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}\cdot i}$, $c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Geben Sie die Wellenfunktion für Zeiten $t > 0$ an. Berechnen Sie den Energieerwartungswert für Zeiten $t > 0$.

5. (10 Punkte)

Betrachten Sie den Operator

$$\hat{J} = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

(a) Berechnen Sie die Kommutatoren $\left[\hat{x}, \hat{J}\right]$, $\left[\hat{x}^2, \hat{J}\right]$, $\left[\hat{y}^2, \hat{J}\right]$, $\left[\frac{\partial}{\partial x}, \hat{J}\right]$, $\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \hat{J}\right]$ und $\left[\frac{\partial^2}{\partial y^2}, \hat{J}\right]$.

(b) Gegeben sei der Hamiltonoperator eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators mit entarteten Schwingungsfrequenzen

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2)\ .$$

Berechnen Sie den Kommutator von $\hat{H}$ mit dem Operator $\hat{J}$.
Welche Bedeutung hat das Ergebnis für die möglichen Eigenfunktionen von $\hat{H}$?

6. (5 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator eines harmonischen Oszillators mit Störung:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_\mathrm{S}$$

wobei

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$
$$\hat{H}_S = \frac{eD}{m}\cdot\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{e^2D^2}{2m}$$

und D eine Konstante, m die Teilchenmasse, e die Elementarladung und ω eine Frequenzkonstante ist.

Hinweis: Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{b}^\dagger$ und $\hat{b}$ für den harmonischen Oszillator sind wie folgt definiert:

$$\hat{b}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} \qquad , \qquad \hat{b} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p},$$

wobei $\hat{x}$ der Ortsoperator und $\hat{p}$ der Impulsoperator sind. Ihre Wirkung auf die Eigenfunktionen Ψ_n ist:

$$\begin{aligned} \hat{b}^\dagger\ \Psi_n &= \sqrt{n+1}\ \Psi_{n+1}, \\ \hat{b}\ \Psi_n &= \sqrt{n}\ \Psi_{n-1}. \end{aligned}$$

(a) Drücken Sie $\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ durch $\hat{b}^\dagger$ und $\hat{b}$ aus.

(b) Bestimmen Sie die Energiekorrektur 1. Ordnung für den Grundzustand

$$E_0^{(1)} = \langle \Psi_0^{(0)} \mid \hat{H}_\mathrm{S} \mid \Psi_0^{(0)} \rangle$$

wobei $\Psi_0^{(0)}$ der Grundzustand von $\hat{H}_0$ ist.

Viel Erfolg!