Übungen zur Vorlesung
Theoretische Chemie I

1. Wir betrachten ein Teilchen in einem eindimensionalen Kasten der Länge L. Der Zustand des Teilchens sei durch die Wellenfunktion $\Psi(x) = a \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ gegeben mit $0 \leq x \leq L, a > 0$.

   (a) Bestimmen Sie die Konstante a so, daß die Wellenfunktion $\Psi(x)$ normiert ist, d.h. $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$.

   (b) Berechnen Sie den Erwartungwert des Ortes $\langle\hat{x}\rangle = \langle\Psi|\hat{x}|\Psi\rangle$ im Zustand $|\Psi\rangle$.

   (c) Berechnen Sie $\langle\hat{x}^2\rangle$ und die Standardabweichung des Ortes $\Delta x = \sqrt{\langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2}$ im Zustand $|\Psi\rangle$.

   (d) Berechnen Sie den Erwartungswert des Impulses $\langle\hat{p}\rangle$ im Zustand $|\Psi\rangle$.

   (e) Berechnen Sie $\langle\hat{p}^2\rangle$ und die Standardabweichung des Impulses Δp im Zustand $|\Psi\rangle$.

   (f) Berechnen Sie schließlich $\Delta x \Delta p$ und verifizieren Sie die Heisenbergsche Unschärferelation.

   Hinweis: Führen Sie geeignete Substitutionen der Integrationsvariablen durch und benutzen Sie die folgenden Integrale:

$$\int_0^\pi dy\ \sin^2(y) = \frac{\pi}{2}, \qquad \int_0^\pi dy\ y \sin^2(y) = \frac{\pi^2}{4}, \qquad \int_0^\pi dy\ y^2 \sin^2(y) = \frac{\pi^3}{6} - \frac{\pi}{4}$$

Hausaufgabe:

2. Wir betrachten den Hamiltonoperator

$$\hat{H} \quad = \quad \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 + \alpha \hat{x}^4 .$$

Dabei bezeichnen m, ω und α positive Konstanten.

(a) Berechnen Sie die Kommutatoren $[\hat{H}, \hat{x}]$ und $[\hat{H}, \hat{p}]$.

(b) Die Gleichungen für die zeitliche Entwicklung der quantenmechanischen Erwartungswerte $\langle \hat{x} \rangle$ und $\langle \hat{p} \rangle$ lauten:

$$\frac{d \langle \hat{x} \rangle}{dt} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{x}] \rangle \qquad\qquad \frac{d \langle \hat{p} \rangle}{dt} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle$$

Setzen Sie die in Teilaufgabe (a) berechneten Kommutatoren in diese Bewegungsgleichungen ein.

(c) Betrachten Sie den Spezialfall $\alpha = 0$ (harmonischer Oszillator mit der Masse m und Frequenz ω). Vergleichen Sie die Bewegungsgleichungen für die Erwartungswerte $\langle \hat{x} \rangle$ und $\langle \hat{p} \rangle$ aus (b) mit den klassischen Bewegungsgleichungen für den Ort $x(t)$ und den Impuls $p(t) = m \frac{d}{dt} x(t)$ eines Teilchens im Potential $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$.

(d) Betrachten Sie nun $\alpha \neq 0$. Welche Unterschiede ergeben sich zu Ihrem Ergebnis aus Teilaufgabe (c)? (Beachten Sie, dass im Allgemeinen $\langle x \rangle^3 \neq \langle x^3 \rangle$.)