Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Blatt 5

Übungen zur Vorlesung
Theoretische Chemie I

1. Wir betrachten ein Teilchen der Masse m in einem eindimensionalen Kasten der Länge L. Zu Beginn ($t < 0$) sei der Kasten durch eine Trennwand in zwei gleich große Hälften unterteilt und das Teilchen befinde sich im linken Teilraum, beschrieben durch die Wellenfunktion

$$\Psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{4}{L}}\,\sin\!\left(\dfrac{2\pi x}{L}\right) & 0 \le x \le L/2 \\[2ex] 0 & L/2 \le x \le L. \end{cases}$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ werde die Trennwand entfernt, so dass sich das Teilchen nun im gesamten Kasten frei bewegen kann.

(a) Welche Werte sind bei einer Energiemessung zur Zeit $t > 0$ möglich?

(b) Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeiten, die möglichen Energiewerte bei einer Messung zu erhalten. Welche dieser Wahrscheinlichkeiten sind Null?

(c) Angenommen, bei der Messung wurde der Energieeigenwert E_n gefunden. Was ist die Wellenfunktion des Teilchens nach der Messung?

(d) Nach der Energiemessung wird eine Ortsmessung durchgeführt. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Bereich $0 \le x \le L/4$ zu finden, und vergleichen Sie diese mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit unmittelbar nach Entfernen der Trennwand.

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

$$\int_0^{\pi/2} dy\ \sin(ny)\ \sin(2y) = \begin{cases} \dfrac{2\sin(n\pi/2)}{4-n^2} & \text{falls } n \neq 2 \\[2ex] \dfrac{\pi}{4} & \text{falls } n = 2 \end{cases}$$

$$\int_0^{\pi/4} dy\ \sin^2(ny) = \frac{\pi}{8} - \frac{\sin(n\pi/2)}{4n}$$

Hausaufgabe:

2. Gegeben seien die Eigenwerte und Eigenfunktionen eines Operators $\hat{A}$,
   d.h. $\hat{A}|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$.
   Zeigen Sie, daß $|\phi_n\rangle$ auch Eigenfunktion des Operators $e^{\hat{A}}$ ist und bestimmen Sie den zugehörigen Eigenwert.
   Hinweis: Benutzen Sie dazu die Reihenentwicklung $e^{\hat{A}} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\hat{A})^m}{m!}$.