# Übungen zur Vorlesung
# Theoretische Chemie I

1. Gegeben seien der Grundzustand $\Psi_1$ mit dem Energieeigenwert $E_1$ sowie der erste angeregte Zustand $\Psi_2$ mit dem Energieeigenwert $E_2$ in einem Doppelminimumpotential $V(x)$:

$$V = \begin{cases} \infty & \text{für} \quad |x| > b \\ V_0 > E_2 & \text{für} \quad |x| < a \\ 0 & \text{für} \quad a < |x| < b \end{cases}$$

Betrachten Sie folgende Linearkombinationen der symmetrischen Funktion $\Psi_1$ und der antisymmetrischen Funktion $\Psi_2$:

$$\Psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 + \Psi_2)$$
$$\Psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 - \Psi_2)$$

(a) Zeigen Sie, dass $\Psi_a$ und $\Psi_b$ eine orthonormale Basis eines (zweidimensionalen) Vektorraums bilden.

(b) Zeigen Sie mittels qualitativer Überlegungen, dass die Funktionen $\Psi_a$ und $\Psi_b$ hauptsächlich in jeweils einem der beiden Potentialtöpfe lokalisiert sind. (Diese Aussage gilt im Grenzfall $V_0 \to \infty$ streng.)

(c) Die Tunnelaufspaltung ist $\Delta = E_2 - E_1$. Zum Zeitpunkt $t = 0$ befinde sich ein Teilchen in einer der Potentialmulden:

$$\Psi(t = 0) = \Psi_a$$

Bestimmen Sie die zeitliche Entwicklung des Systems. Geben Sie $\Psi(t)$ sowohl in der Basis $\{\Psi_1; \Psi_2\}$ als auch in der Basis $\{\Psi_a; \Psi_b\}$ an. Wann ist das Teilchen in einer der Mulden maximal lokalisiert, d.h., zu welchen Zeiten $t$ befindet sich das Teilchen im Zustand $\Psi_a$ bzw. $\Psi_b$?

**Hausaufgabe:**

2. In der Vorlesung wurde die formale Behandlung einer Spiegelung $\sigma$ durch einen Spiegelungsoperator $\hat{D}(\sigma)$ besprochen. Eine weitere wichtige Symmetrieoperation ist die Drehung $\sigma_n$ um eine vorgegebene Achse um einen Winkel $2\pi/n$. Der entsprechende Drehoperator sei $\hat{D}(\sigma_n)$.

   (a) Zeigen Sie die Identität $(\hat{D}(\sigma_n))^n = 1$.

   (b) Bestimmen Sie die $n$ möglichen Eigenwerte von $\hat{D}(\sigma_n)$. Beachten Sie, dass diese Eigenwerte im allgemeinen komplex sind.