Übungen zur Vorlesung
Theoretische Chemie I

1. Ein System befinde sich in einem Eigenzustand zu $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ mit $l = 1$ und $m = 1$. Es wird der Drehimpuls um die x-Achse (L_x) gemessen. Welche Messergebnisse erwarten Sie mit welcher Wahrscheinlichkeit?

2. In dieser Aufgabe soll die Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms durch einen nichtlinearen Variationsansatz abgeschätzt werden.

   Der Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms lautet in Kugelkoordinaten:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

   Als Testwellenfunktion wird eine normierte Gaußfunktion gewählt:

$$\Phi(\alpha) = N \cdot e^{-\alpha r^2}, \qquad N = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{3/4}$$

   Diese Funktion ist kugelsymmetrisch und damit eine Eigenfunktion zu $\hat{L}^2$ mit dem Eigenwert 0.

   Für die Integration einer kugelsymmetrischen Funktion $f(r)$ über den gesamten Raum gilt:

$$\int_V dV\, f(r) = 4\pi \int_0^\infty dr\, r^2\, f(r)$$

   (a) Berechnen Sie den Energieerwartungswert $\langle E\rangle(\alpha) = \langle \Phi(\alpha) \mid \hat{H} \mid \Phi(\alpha)\rangle$. Verwenden Sie dazu die Integrale:

$$\begin{aligned}
\langle \Phi(\alpha) \mid \Phi(\alpha)\rangle &= 1 \\
\langle \Phi(\alpha) \mid r^2 \mid \Phi(\alpha)\rangle &= \frac{3}{4\alpha} \\
\langle \Phi(\alpha) \mid \frac{1}{r} \mid \Phi(\alpha)\rangle &= \sqrt{\frac{8\alpha}{\pi}}
\end{aligned}$$

   (b) Bestimmen Sie den Parameter α so, dass die Energie minimal wird.

   (c) Berechnen Sie den Energieerwartungswert am Minimum und vergleichen Sie diesen Wert mit der exakten Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms.

Hausaufgabe:

3. Wir betrachten die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms

$$\begin{aligned}\Psi_{211}(r,\theta,\phi) &= \frac{a_0^{-5/2}}{8\sqrt{\pi}}\, re^{-\frac{r}{2a_0}}\sin(\theta)\, e^{i\phi}\\ \Psi_{21-1}(r,\theta,\phi) &= \frac{a_0^{-5/2}}{8\sqrt{\pi}}\, re^{-\frac{r}{2a_0}}\sin(\theta)\, e^{-i\phi}\end{aligned}$$

Diese sind Eigenfunktionen von $\hat{H}$ (Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms), $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$. Aus den beiden komplexen Eigenfunktionen kann man die folgende reelle Funktion bilden

$$\Psi_{2p_y} = \frac{-i}{\sqrt{2}}(\Psi_{211} - \Psi_{21-1})$$

(a) Zeigen Sie, dass Ψ_{2p_y} eine Eigenfunktion zu $\hat{H}$ und $\hat{L}^2$ ist und geben Sie die jeweiligen Eigenwerte an.

(b) Zeigen Sie, dass Ψ_{2p_y} eine Eigenfunktion zu $\hat{L}_y$ ist. (Hinweis: Führen Sie die Rechnung in kartesischen Koordinaten durch.)

(c) Angenommen, das System wurde im Zustand Ψ_{2p_y} präpariert. Was sind die möglichen Messwerte bei einer Messung der z-Komponente des Drehimpulses? Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeiten, diese Eigenwerte zu finden.