Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I
WS 2018/19 – Übungsblatt 6

Ausgabe: Freitag 23. November, Besprechung: Dienstag 4. Dezember

1. Betrachten Sie die Eigenfunktionen $\varphi_n(x)$ eines Teilchens im Kasten der Länge L auf dem Intervall $[0, L]$,

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \qquad , \qquad n \in \mathbb{N}$$

mit den Eigenenergien,

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \qquad , \qquad n \in \mathbb{N}$$

a) Zeigen Sie, dass

$$\psi_n(x,t) = \varphi_n(x) \exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar} t\right)$$

eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung des Teilchens im Kasten darstellt.

b) Betrachten Sie nun eine beliebige, normierte Superposition der ersten beiden Eigenzustände,

$$\Psi(x,t) = c_1 \psi_1(x,t) + c_2 \psi_2(x,t) \qquad , \qquad c_1, c_2 \in \mathbb{R}$$

Bestimmen Sie die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ und die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x,t)|^2$ als Funktion der Zeit. Ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte zeitlich konstant? Falls nicht, mit welcher Frequenz oszilliert sie? Prüfen Sie auch den Sonderfall $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

c) Berechnen Sie den (gegebenenfalls zeitabhängigen!) Ortserwartungswert

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_0^L \chi^*(x,t) \hat{x} \chi(x,t) \mathrm{d}x$$

für die erste Eigenfunktion, $\chi(x,t) = \psi_1(x,t)$, sowie für die Superposition aus Aufgabenteil b), $\chi(x,t) = \Psi(x,t)$. Prüfen Sie erneut den Sonderfall $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Fortsetzung auf der nächsten Seite!

Hilfreiche Formeln

$$\int_0^a \sin^2(jx)\mathrm{d}x = \frac{a}{2} - \frac{\sin(2aj)}{4j}$$

$$\int_0^a \sin(jx)\sin(kx)\mathrm{d}x = \frac{k\sin(aj)\cos(ak) - j\cos(aj)\sin(ak)}{j^2 - k^2} \qquad , \qquad j^2 \neq k^2$$

$$\int_0^a x\sin^2(jx)\mathrm{d}x = \frac{2a^2j^2 - 2aj\sin(2aj) - \cos(2aj) + 1}{8j^2}$$