1 Wiederholung Mathematik

1. Seminar – Aufgabe 1: Euler-Gleichung

1.1 Aus der gegebenen Gleichung

$$e^{\pm i\phi} = \cos\phi \pm i \cdot \sin\phi \tag{1}$$

folgt

$$\boxed{\cos\phi = \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2}} \tag{2}$$

$$\boxed{\sin\phi = \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2i}} \tag{3}$$

1. Seminar – Aufgabe 2: Differentialgleichungen

2.1 Differentialgleichungen 2. Ordnung werden beispielsweise bei der Beschreibung von Schwingungen verwendet.

2.2 (a) Die Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}^2 y}{dx^2} = \frac{1}{4} y \tag{4}$$

ist für die Testfunktion

$$y = e^{\lambda \cdot x} \tag{5}$$

erfüllt. Einsetzen dieses Ansatzes in die Differentialgleichung liefert:

$$\lambda^2 \cdot e^{\lambda \cdot x} = \frac{1}{4} \cdot e^{\lambda \cdot x} \tag{6}$$

Daraus folgt

$$e^{\lambda \cdot x} \cdot \left(\lambda^2 - \frac{1}{4}\right) = 0 \tag{7}$$

Da $e^{\lambda} \cdot x$ nicht null sein kann, muss der rechte Term verschwinden, woraus folgt

$$\lambda = \pm\frac{1}{2} \tag{8}$$

Eingesetzt in die Testfunktion folgt

$$y = e^{\pm\frac{x}{2}} \tag{9}$$

Die allgemeine Lösung lautet damit

$$y = A \cdot e^{\frac{x}{2}} + B \cdot e^{-\frac{x}{2}}$$

Durch Einsetzen der Randbedingungen $y(0) = 2$ und $y'(0) = 10$ lassen sich A und B bestimmen:

$$\begin{aligned} y(0) &= A \cdot e^{\frac{0}{2}} + Be^{-\frac{0}{2}} \\ 2 &= A + B \\ y'(0) &= \frac{A}{2} \cdot e^{\frac{0}{2}} - \frac{B}{2} e^{-\frac{0}{2}} \\ 10 &= \frac{A}{2} - \frac{B}{2} \end{aligned}$$

Es sind

$$A = 11$$
$$B = -9$$

Daraus folgt die Lösung

$$\boxed{y(x) = 11 \cdot e^{\frac{x}{2}} - 9 \cdot e^{-\frac{x}{2}}} \tag{10}$$

(b) Hier gilt:

$$\begin{aligned} 0 &= 3\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}y - \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}y - y \\ &= \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}y - \frac{1}{6}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}y - \frac{1}{3}y \\ &= \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + p \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + q\right) y \end{aligned} \tag{11}$$

Die allgemeine Lösung ist

$$\begin{aligned} y(x) &= A \cdot e^{-\frac{p}{2}+\sqrt{\frac{p^2}{4}-q}} + B \cdot e^{-\frac{p}{2}-\sqrt{\frac{p^2}{4}-q}} \\ &= A \cdot e^{\frac{2}{3}\cdot x} + B \cdot e^{-\frac{1}{2}\cdot x} \end{aligned}$$

Die Randbedingungen $y(0) = 1$ und $y''(0) = 2$ führen zu:

$$\begin{aligned} y(0) &= A \cdot e^{\frac{2}{3}\cdot 0} + B \cdot e^{-\frac{1}{2}\cdot 0} \\ 1 &= A + B \\ y''(0) &= \frac{4}{9} \cdot A \cdot e^{\frac{2}{3}\cdot 0} + \frac{1}{4}B \cdot e^{-\frac{1}{2}\cdot 0} \\ 2 &= \frac{4}{9} \cdot A + \frac{1}{4}B \end{aligned}$$

und damit

$$A = 9$$
$$B = -8$$

Die Lösung der Differentialgleichung mit den Randbedingungen ist folglich:

$$\boxed{y(x) = 9 \cdot e^{\frac{2}{3}\cdot x} - 8 \cdot e^{-\frac{1}{2}\cdot x}} \tag{12}$$

1. Seminar – Aufgabe 3: Kugelkoordinaten

3.1 Kugelkoordinaten lassen sich sinnvoll anwenden, wenn ein physikalisch-mathematisches Problem Kugelsymmetrie aufweist, etwa die Beschreibung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Wasserstoffatom.

3.2

3.3 Es gilt

$$x = r \cdot \sin\theta \cdot \cos\phi \tag{13}$$
$$y = r \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi \tag{14}$$
$$z = r \cdot \cos\theta \tag{15}$$

3.4 Die JACOBI-Matrix ist

$$J = \frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\theta,\phi)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial x}{\partial \phi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \phi} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \phi} \end{pmatrix} \tag{16}$$

Unter Verwendung von Gleichungen 13, 14 und 15 wird Gleichung 16 zu:

$$J = \begin{pmatrix} \sin\theta \cdot \cos\phi & r \cdot \cos\theta \cdot \cos\phi & -r \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi \\ \sin\theta \cdot \sin\phi & r \cdot \cos\theta \cdot \sin\phi & r \cdot \sin\theta \cdot \cos\phi \\ \cos\theta & -r \cdot \sin\theta & 0 \end{pmatrix} \tag{17}$$

Die Determinante der JACOBI-Matrix (JACOBI-Determinante) ist

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_J &= \begin{vmatrix} \sin\theta \cdot \cos\phi & r \cdot \cos\theta \cdot \cos\phi & -r \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi \\ \sin\theta \cdot \sin\phi & r \cdot \cos\theta \cdot \sin\phi & r \cdot \sin\theta \cdot \cos\phi \\ \cos\theta & -r \cdot \sin\theta & 0 \end{vmatrix} \\ &= r^2 \cdot \sin\theta \cdot \begin{vmatrix} \sin\theta \cdot \cos\phi & \cos\theta \cdot \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\theta \cdot \sin\phi & \cos\theta \cdot \sin\phi & \cos\phi \\ \cos\theta & -\sin\theta & 0 \end{vmatrix} \\ &= r^2 \cdot \sin\theta \cdot \left(\sin^2\theta \cdot \sin^2\phi + \sin^2\theta \cdot \cos^2\phi + \cos^2\theta \cdot \sin^2\phi + \cos^2\theta \cdot \cos^2\phi\right) \\ &= r^2 \cdot \sin\theta \end{aligned} \tag{18}$$

Damit für das Volumenelement aus

$$\begin{aligned} \mathrm{d}V &= \mathrm{d}x \cdot \mathrm{d}y \cdot \mathrm{d}z \\ &= \mathbf{D}_J \cdot \mathrm{d}r \cdot \mathrm{d}\theta \cdot \mathrm{d}\phi \end{aligned} \tag{19}$$

die Gültigkeit von

$$\boxed{\mathrm{d}V = r^2 \cdot \sin\theta \cdot \mathrm{d}r \cdot \mathrm{d}\theta \cdot \mathrm{d}\phi} \tag{20}$$

1. Seminar – Aufgabe 4: Integration

4.1 (a) Um das Integral

$$\int_0^\infty x^2 \cdot e^{-x} \mathrm{d}x \tag{21}$$

zu lösen, suchen wir zunächst die Stammfunktion. Diese lässt sich leicht durch partielle Integration bestimmen:

$$\begin{aligned} \int x^2 \cdot e^{-x} \mathrm{d}x &= -x^2 \cdot e^{-x} - \int -2x \cdot e^{-x} \mathrm{d}x \\ &= -x^2 \cdot e^{-x} - 2x \cdot e^{-x} - \int -2e^{-x} \mathrm{d}x \\ &= -x^2 \cdot e^{-x} - 2x \cdot e^{-x} - 2e^{-x} \end{aligned}$$

$$\boxed{\int x^2 \cdot e^{-x} \mathrm{d}x = -(x^2 + 2x + 2) \cdot e^{-x}} \tag{22}$$

Aus Gleichung 21 wird mit Gleichung 22:

$$\int_0^\infty x^2 \cdot e^{-x} \mathrm{d}x = -(x^2 + 2x + 2) \cdot e^{-x} \Big|_0^\infty = \underline{\underline{2}} \tag{23}$$

(b) Zur Lösung des Integrals

$$\int_0^\infty x \cdot e^{-x^2} \mathrm{d}x \tag{24}$$

differenzieren wir zunächst e^{-x^2}:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} e^{-x^2} = -2x \cdot e^{-x^2} \tag{25}$$

Multiplikation mit $\mathrm{d}x$ und Integration führt zu

$$\int \mathrm{d}e^{-x^2} = \int -2x \cdot e^{-x^2} \mathrm{d}x$$

Die Integration auf der linken Seite ist trivial. Division durch -2 liefert die Stammfunktion zu Gleichung 24:

$$\boxed{\int x \cdot e^{-x^2} \mathrm{d}x = -\frac{1}{2} e^{-x^2}} \tag{26}$$

Mit der Stammfunktion ergibt sich

$$\int_0^\infty x \cdot e^{-x^2} \mathrm{d}x = -\frac{1}{2} e^{-x^2} \Big|_0^\infty = \underline{\underline{\frac{1}{2}}} \tag{27}$$

(c) Zur Bestimmung der Stammfunktion von

$$\int_0^\pi \cos^3 x \, \mathrm{d}x \tag{28}$$

drücken wir $\cos x$ mithilfe von Gleichung 3 aus:

$$\int \cos^3 x \, \mathrm{d}x = \int \left(\frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \right)^3 \mathrm{d}x$$

Ausmultiplizieren des Integranden liefert

$$\int \cos^3 x \, \mathrm{d}x = \int \frac{e^{3ix} + 3e^{ix} + 3e^{-ix} + e^{-3ix}}{8} \, \mathrm{d}x$$

Dies lässt sich unterteilen in

$$\int \cos^3 x \, \mathrm{d}x = \int \frac{e^{3ix} + e^{-3ix}}{8} + \frac{3e^{ix} + 3e^{-ix}}{8} \, \mathrm{d}x$$

Nochmalige Anwendung von Gleichung 3 liefert:

$$\int \cos^3 x \, \mathrm{d}x = \int \frac{1}{4} \cdot \cos(3x) + \frac{3}{4} \cdot \cos(x) \, \mathrm{d}x$$

$$\boxed{\int \cos^3 x \, \mathrm{d}x = \frac{1}{12} \cdot \sin(3x) + \frac{3}{4} \cdot \sin(x)} \tag{29}$$

Damit ergibt sich

$$\int_0^\pi \cos^3 x \, \mathrm{d}x = \frac{1}{12} \cdot \sin(3x) + \frac{3}{4} \cdot \sin(x) \Big|_0^\pi = \underline{\underline{0}} \tag{30}$$

Dieses Ergebnis ist auch angesichts der Punktsymmetrie der Cosinusfunktion in Bezug auf $x = \frac{\pi}{2}$ zu erwarten.

(d) Analog zu Aufgabe 4.1(c) kann auch zur Lösung des Integrals

$$\int \sin^3 x \; \mathrm{d}x \tag{31}$$

eine Gleichung der Form

$$\boxed{\int \sin^3 x \; \mathrm{d}x = \frac{1}{12} \cdot \cos(3x) - \frac{3}{4} \cdot \cos(x)} \tag{32}$$

hergeleitet werden. Eingesetzt ergibt sich

$$\int \sin^3 x \; \mathrm{d}x = \frac{1}{12} \cdot \cos(3x) - \frac{3}{4} \cdot \cos(x)\Big|_0^\pi = \underline{\underline{\frac{4}{3}}} \tag{33}$$

2 Historie und Bra-Ket-Notation

2. Seminar – Aufgabe 1: Der Photoelektrische Effekt

1.1 Eine Metallkathode wird mit Licht einer bestimmten Wellenlänge bestrahlt. Elektronen, die (gegebenenfalls) aus der Kathode herausgelöst werden, fliegen auf die Anode zu und verursachen so einen Stromfluss. Positiviert man nun die Kathode durch Anlegen einer Spannung und beobachtet, was bei Änderung der Spannung mit der Stromstärke passiert, kann auf die Verteilung der kinetischen Energie der Elektronen geschlossen werden.

1.2 Folgende Erwartungen bestanden:

- Bei Einstrahlung von Licht sollten Elektronen aus dem Metall herausgelöst werden.
- Die Frequenz des Lichts sollte keinen Einfluss darauf haben, ob und wieviele Elektronen herausgelöst werden.
- Die kinetische Energie der Elektronen sollte von der Intensität des Lichts (Bestrahlungssttärke) abhängen.
- Der Effekt sollte verzögert auftreten – je geringer die Lichtintensität desto später – und abklingen.

1.3 Beobachtet wurde dagegen:

- Bei Einstrahlung von Licht wurden Elektronen aus dem Metall herausgelöst.
- Dabei wurde der Effekt erst ab einer für das jeweilige Metall spezifischen Frequenz beobachtet.
- Die kinetische Energie der Elektronen war unabhängig von der Intensität des Lichts. Sie hing jedoch von der Frequenz des Lichts ab.
- Der Effekt trat instantan auf und klang ebenso schnell wieder ab.

Licht tritt quantisiert auf. Es wechselwirkt immer genau ein Lichtquant mit einem Elektron. Ist die Energie des Lichtquants größer als die Austrittsarbeit W_A des Elektrons, so wird ein Elektron herausgelöst. Die restliche Energie des Photons geht in kinetische Energie $\frac{m}{2} \cdot v^2$ des Elektrons über. Es gilt:

$$h \cdot \nu = W_A + \frac{m}{2} \cdot v^2 \tag{34}$$

1.4 Ab der Frequenz, ab der der photoelektrische Effekt beobachtet wird, ist die Anzahl der herausgelösten Elektronen proportional zur Intensität der eingestrahlten Lichts.

1.5 Es gilt

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{h \cdot c}{E} = \frac{6{,}626\,069 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J\,s} \cdot 299\,792\,458\,\mathrm{m\,s^{-1}}}{2{,}75\,\mathrm{eV}} = 451\,\mathrm{nm} \tag{35}$$

2. Seminar – Aufgabe 2: Der schwarze Strahler

2.1
- Oberflächenelektronen verhalten sich wie harmonische Oszillatoren.
- Alle Freiheitsgrade sind gleich besetzt ($k_B \cdot T$).
- Dies führt zur Ultraviolettkatastrophe.
- Die Quantisierung von PLANCK löst das Problem.

2.2

2.3 Es gilt

$$\begin{aligned}\lim_{h\to 0} E(\nu)\,\mathrm{d}\nu &= \lim_{h\to 0} \frac{8\pi \cdot h \cdot \nu^3}{c^3 \cdot \left(e^{h\cdot\nu/k\cdot T} - 1\right)}\,\mathrm{d}\nu \\ &= \frac{8\pi \cdot \nu^3}{c^3} \cdot \lim_{h\to 0} \frac{h}{e^{h\cdot\nu/k\cdot T} - 1}\end{aligned}$$

Für $h \to 0$ verschwinden sowohl Zähler als auch Nenner. Die Aufgabe wird jedoch bei Aufstellung einer TAYLOR-Reihe lösbar, wenn die Entwicklung nach h an der Stelle 0 erfolgt:

$$\begin{aligned}\lim_{h\to 0} E(\nu)\,\mathrm{d}\nu &= \frac{8\pi \cdot \nu^3}{c^3} \cdot \lim_{h\to 0} \frac{T_{h=0}(h)}{T_{h=0}\left(e^{h\cdot\nu/k\cdot T} - 1\right)} \\ &= \frac{8\pi \cdot \nu^3}{c^3} \cdot \lim_{h\to 0} \frac{0 + 1 \cdot h + \ldots}{0 + \frac{\nu}{k\cdot T} \cdot e^{\frac{h\cdot v}{k\cdot T}} \cdot h + \ldots}\end{aligned}$$

Das nullte Glied verschwindet (was überhaupt der Grund ist, aus dem die Reihenentwicklung vorgenommen wurde). Für den Grenzwert gegen die Entwicklungsstelle verschwindet das zweite Glied, wenn das erste Glied nicht verschwindet. Dies ist hier der Fall, sodass die Reihenentwicklung nach dem ersten Glied abgebrochen werden kann:

$$\begin{aligned}\lim_{h\to 0} E(\nu)\,\mathrm{d}\nu &= \frac{8\pi \cdot \nu^3}{c^3} \cdot \lim_{h\to 0} \frac{h}{\frac{\nu}{k\cdot T} \cdot e^{\frac{h\cdot v}{k\cdot T}} \cdot h} \\ &= \frac{8\pi \cdot \nu^3}{c^3} \cdot \lim_{h\to 0} \frac{k \cdot T}{\nu \cdot e^{\frac{h\cdot v}{k\cdot T}}} \\ &= \frac{8\pi \cdot k \cdot T \cdot \nu^2}{c^3},\end{aligned}$$

was zu zeigen war.

2. Seminar – Aufgabe 3: Bra-Ket-Notation

Im folgenden werden die Zusammenhänge

$$\begin{aligned}
\sin(ix) &= \frac{e^{i\cdot(ix)} - e^{-i\cdot(ix)}}{2i} \\
&= \frac{i}{2}\cdot\left(e^{x} - e^{-x}\right) \\
&= i\cdot\sinh(x) && (36) \\
\cos(ix) &= \frac{e^{i\cdot(ix)} + e^{-i\cdot(ix)}}{2} \\
&= \frac{e^{x} + e^{-x}}{2} \\
&= \cosh(x) && (37)
\end{aligned}$$

genutzt.

3.1

$$\begin{aligned}
\int \psi_i^* \cdot \psi_j \;\mathrm{d}x &= \langle \psi_i | \psi_j \rangle \\
\int e^{-ix} \cdot e^{ix} \;\mathrm{d}x &= \langle e^{ix} | e^{ix} \rangle \\
\int \cos(ix) \cdot \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \sin(ix) \;\mathrm{d}x &= \int \cosh(x) \cdot i \cdot \sinh(x) \; dx \\
&= \langle \cosh x | i \cdot \sinh x \rangle
\end{aligned}$$

3.2

$$\begin{aligned}
\langle f | h \rangle &= \int e^{-3ix} \cdot i \cdot \sinh(2x) \;\mathrm{d}x \\
\langle g | h \rangle &= \int x^2 \cdot i \cdot \sinh(2x) \;\mathrm{d}x \\
\langle h | g \rangle^* &= \int x^2 \cdot i \cdot \sinh(2x) \;\mathrm{d}x \\
\hat{H}_2 | g \rangle &= \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} x^2 = 2 \\
\langle h | \hat{H}_1 | h \rangle &= \int -i \cdot \sinh(2x) \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \bigg(i \cdot \sinh(2x) \bigg) \;\mathrm{d}x \\
&= \int 2\sinh(2x) \cdot \cosh(2x) \;\mathrm{d}x \\
\langle f | \hat{H}_2^\dagger | h \rangle &= \int \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} e^{-3ix} \right) \cdot \sin(2ix) \mathrm{d}x \\
&= \int -9 \cdot e^{-3ix} \cdot \sin(2ix) \mathrm{d}x
\end{aligned}$$

3 Die Wellenfunktion

3. Seminar – Aufgabe 1: Wellencharakter von Teilchen

Clinton Davisson und Lester Germer wiesen 1927 die Beugung von Elektronen nach.
Claus Jönsson führte 1961 das Doppelspaltexperiment mit Elektronen durch.

3. Seminar – Aufgabe 2: Welle-Teilchen-Dualismus

2.1 Die Energie eines Photons lässt sich einmal quantenphysikalisch als

$$E = h \cdot \nu$$

und einmal relativistisch als

$$E = m \cdot c^2$$

beschreiben. Gleichsetzen liefert

$$m \cdot c^2 = h \cdot \nu$$

Unter Verwendung der Gleichungen für den Impuls eines lichtschnellen Teilchens und die Lichtgeschwindigkeit

$$p = m \cdot c$$
$$c = \lambda \cdot \nu$$

ergibt sich

$$p \cdot \lambda \cdot \nu = h \cdot \nu$$

Umstellen liefert die Gleichung

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{38}$$

De Broglie postulierte, dass diese Beziehung auch für Materie-Teilchen wie Elektronen gilt.

2.2 Für die Energie gilt

$$E = \frac{h \cdot c}{\lambda} \tag{39}$$

Wird diese Energie in kinetische Energie eines vorher ruhenden Protons umgewandelt, so gilt

$$E = \frac{m}{2} \cdot v^2$$
$$v = \sqrt{\frac{2 \cdot E}{m}} \tag{40}$$

Mit den Konstanten

$$h = 6{,}626\,069 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J\,s}$$
$$c = 299\,792\,458\ \mathrm{m\,s^{-1}}$$
$$m_p = 1{,}672\,622 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{kg}$$

Wellenlänge λ	Energie $\frac{E}{\mathrm{J}}$	Energie E	Energie $\frac{E}{\mathrm{mol}}$	Geschwindigkeit $\frac{v}{\mathrm{m\,s^{-1}}}$
1 cm	$1{,}99 \cdot 10^{-23}$	124 µeV	12,0 J	$1{,}54 \cdot 10^{2}$
600 nm	$3{,}31 \cdot 10^{-19}$	2,07 eV	199 kJ	$1{,}99 \cdot 10^{4}$
200 nm	$9{,}93 \cdot 10^{-19}$	6,20 eV	598 kJ	$3{,}44 \cdot 10^{4}$
150 pm	$1{,}32 \cdot 10^{-15}$	827 keV	798 MJ	$1{,}26 \cdot 10^{6}$

3. Seminar – Aufgabe 3: Heisenbergsche Unschärferelation

3.1 Die HEISENBERGsche Unschärferelation

$$\langle \Delta p_x^2 \rangle \cdot \langle \Delta x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \tag{41}$$

besagt, dass das Produkt aus Unbestimmtheit des Ortes und Unbestimmtheit des Impulses eines Teilchens einen bestimmten Wert nicht unterschreiten kann.

3.2 Es gilt

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \tag{42}$$

$$\begin{aligned} \Delta v &\geq \frac{\hbar}{2m_e \cdot \Delta x} \\ &\geq \frac{1{,}054\,57 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}}{2 \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg} \cdot 10\,\mathrm{pm}} \\ &\geq 5{,}79 \cdot 10^{6}\,\mathrm{m\,s^{-1}} \end{aligned} \tag{43}$$

3. Seminar – Aufgabe 4: Eigenschaften der Wellenfunktion

4.1 Die Wellenfunktion muss folgende Eigenschaft haben:

- (eindeutig, da sonst keine Funktion)
- stetige Differenzierbarkeit überall im Raum
- normierbar
  - Konvergenz gegen null für alle Unendlichkeiten
  - Werte, die von null verschieden sind

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist als $\psi^* \cdot \psi$ definiert.

4.2 Es gilt für eine normierte Funktion mit dem Normierungsfaktor N allgemein

$$\langle N\psi | N\psi \rangle = 1, \tag{44}$$

sodass der Normierungsfaktor sich nach

$$N = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}} \tag{45}$$

berechnen lässt.

(a) Zunächst ist das Integral der Wellenfunktion zu bestimmen:

$$\int\limits_0^\infty 4x \cdot e^{-2x}\,\mathrm{d}x = -4 \cdot (2x^2 + 2x + 1) \cdot e^{-2x} \Big|_0^\infty = 4 \tag{46}$$

Damit ist $N = 1/2$.

(b) Es ist

$$\int\limits_0^{2\pi} e^{2i\cdot x} \cdot e^{-2i\cdot x}\,\mathrm{d}x = \int\limits_0^{2\pi} 1\,\mathrm{d}x = 2\pi \tag{47}$$

und damit $N = \sqrt{1/2\pi}$.

(c) Das Integral im zu normierenden Bereich ist

$$\int_0^{\pi} \sin^2 x \;\mathrm{d}x = \int_0^{\pi/2} \sin^2 x \;\mathrm{d}x + \int_{\pi/2}^{\pi} \sin^2 x \;\mathrm{d}x \tag{48}$$

$$= \int_0^{\pi/2} \sin^2 x \;\mathrm{d}x + \int_0^{\pi/2} \sin^2 \left(x + \frac{\pi}{2}\right) \;\mathrm{d}x \tag{49}$$

$$= \int_0^{\pi/2} \sin^2 x + \cos^2 x \;\mathrm{d}x \tag{50}$$

$$= \frac{\pi}{2} \tag{51}$$

Demzufolge ist der Normierungsfaktor $\sqrt{2/\pi}$.

4.3 Die Wellenfunktionen Ψ_a und Ψ_b sind orthogonal, wenn gilt

$$\langle \Psi_a | \Psi_b \rangle = \int \Psi_a \cdot \Psi_b \;\mathrm{d}x = \delta_{ab} \tag{52}$$

Orthonormiert sind die Funktionen, wenn Ψ_a und Ψ_b normiert und orthogonal sind.

4.4 (a) Aus Symmetriegründen sollten die Funktionen orthogonal sein. Das Integral über das Funktionsprodukt sollte folglich verschwinden:

$$I_a = \int_0^{l} \sin \frac{\pi \cdot x}{l} \cdot \sin \frac{2\pi \cdot x}{l} \;\mathrm{d}x$$

Nun gilt das Additionstheorem

$$\begin{aligned} \sin\varphi \cdot \sin 2\varphi &= \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i} \cdot \frac{e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi}}{2i} \\ &= \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} - \frac{e^{3i\varphi} + e^{-3i\varphi}}{2} \right) \\ &= \frac{\cos\varphi - \cos 3\varphi}{2} \end{aligned} \tag{53}$$

Damit wird aus dem Integral

$$\begin{aligned} I_a &= \frac{1}{2} \cdot \int_0^{l} \cos \frac{\pi \cdot x}{l} - \cos \frac{3\pi \cdot x}{l} \;\mathrm{d}x \\ &= \frac{l}{6\pi} \cdot \left(3 \sin \frac{\pi \cdot x}{l} - \sin \frac{3\pi \cdot x}{l} \right) \Big|_0^{l} \\ &= 0, \end{aligned}$$

was zu zeigen war.

(b) Diese Funktionen sind beide im gesamten Intervall positiv, sodass sie nicht orthogonal sein können:

$$\begin{aligned} I_b &= \int_{-\pi}^{\pi} x^2 \cdot \cos x \\ &= (x^2 - 2) \cdot \sin x + 2x \cdot \cos x \Big|_{-\pi}^{\pi} \\ &= -4\pi \end{aligned}$$

(c) Es ist

$$\begin{aligned}
I_c &= \int\limits_0^{2\pi} e^{-i\cdot x} \cdot e^{-2i\cdot x} \ \mathrm{d}x \\
&= \int\limits_0^{2\pi} e^{-3i\cdot x} \ \mathrm{d}x \\
&= \frac{i}{3} \cdot e^{-3i\cdot x}\Big|_0^{2\pi} \\
&= 0
\end{aligned}$$

4.5 Sei N der Normierungsfaktor, so muss für das Integral über das Skalarprodukt der Funktion die Gleichung

$$\int \Big(N \cdot \Psi(x)\Big)^* \cdot \Big(N \cdot \Psi(x)\Big) \ \mathrm{d}x = 1$$

erfüllt sein. Einsetzen der Wellenfunktion liefert

$$\int \left(N \cdot \sum_{a=1}^{n} c_a \cdot \psi_a(x)\right)^* \cdot \left(N \cdot \sum_{a=1}^{n} c_a \cdot \psi_a(x)\right) \ \mathrm{d}x = 1$$

$$\int \left(N^* \cdot \sum_{a=1}^{n} c_a^* \cdot \psi_a^*(x)\right) \cdot \left(N \cdot \sum_{a=1}^{n} c_a \cdot \psi_a(x)\right) \ \mathrm{d}x = 1$$

$$N^* \cdot N \cdot \int \left(\sum_{a=1}^{n} c_a^* \cdot \psi_a^*(x)\right) \cdot \left(\sum_{a=1}^{n} c_a \cdot \psi_a(x)\right) \ \mathrm{d}x = 1$$

Da die Funktionen $\psi_a(x)$ orthogonal sind, vereinfacht sich der Integrand:

$$N^* \cdot N \cdot \int \left(\sum_{a=1}^{n} c_a^* \cdot \psi_a^*(x) \cdot c_a \cdot \psi_a(x)\right) \ \mathrm{d}x = 1$$

Summation und Integration lassen sich vertauschen:

$$N^* \cdot N \cdot \sum_{a=1}^{n} \left(\int c_a^* \cdot \psi_a^*(x) \cdot c_a \cdot \psi_a(x) \ \mathrm{d}x\right) = 1$$

$$N^* \cdot N \cdot \sum_{a=1}^{n} \left(c_a^* \cdot c_a \cdot \int \psi_a^*(x) \cdot \psi_a(x) \ \mathrm{d}x\right) = 1$$

Da $\psi_a(x)$ normiert sind, folgt

$$N^* \cdot N \cdot \sum_{a=1}^{n} (c_a^* \cdot c_a) = 1$$

und damit

$$|N| = \left(\sum_{a=1}^{n} (c_a^* \cdot c_a)\right)^{-1/2}$$

4 Operatoren und das Teilchen im Kasten

4. Seminar – Aufgabe 1: Eigenschaften von Operatoren und Eigenwertgleichung

1.1 (a) Für den Impulsoperator gilt:

$$\begin{aligned}
\hat{p}\Psi &= -i \cdot \hbar \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \cos(a \cdot x) \\
&= i \cdot \hbar \cdot \sin(a \cdot x)
\end{aligned}$$

Damit gilt

$$p \cdot \cos(a \cdot x) = i \cdot \hbar \cdot \sin(a \cdot x)$$

Es handelt sich also nicht um eine Eigenfunktion

Für den Energieoperator gilt:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x} \cos(a \cdot x) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot a^2 \cdot \cos(a \cdot x) \end{aligned}$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} E \cdot \cos(a \cdot x) &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot a^2 \cdot \cos(a \cdot x) \\ E &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot a^2 \end{aligned}$$

Die Wellenfunktion ist Eigenfunktion des HAMILTON-Operators.

(b) Die Funktion lässt sich mithilfe der EULER-Beziehung als

$$\Psi = e^{-i \cdot a \cdot x}$$

schreiben.

Für den Impulsoperator gilt:

$$\begin{aligned} \hat{p}\Psi &= -i \cdot \hbar \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} e^{-i \cdot a \cdot x} \\ &= i^2 \cdot a \cdot \hbar \cdot e^{-i \cdot a \cdot x} \end{aligned}$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} p \cdot e^{-i \cdot a \cdot x} &= i^2 \cdot a \cdot \hbar \cdot e^{-i \cdot a \cdot x} \\ p &= -\hbar \cdot a \end{aligned}$$

und die Wellenfunktion ist Eigenfunktion des Impulsoperators.

Für den HAMILTON-Operator gilt:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x} e^{-i \cdot a \cdot x} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot a^2 \cdot e^{-i \cdot a \cdot x} \end{aligned}$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} E \cdot e^{-i \cdot a \cdot x} &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot a^2 \cdot e^{-i \cdot a \cdot x} \\ E &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot a^2 \end{aligned}$$

Die Wellenfunktion ist Eigenfunktion des HAMILTON-Operators.

1.2 Für die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}t} = \hat{H}(x)\Psi(x,t)$$

machen wir den Separationsansatz

$$\Psi(x,t) = \phi(x) \cdot \theta(t)$$

und setzen ihn ein:

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\mathrm{d}\phi(x) \cdot \theta(t)}{\mathrm{d}t} = \hat{H}(x)\Big(\phi(x) \cdot \theta(t)\Big)$$

Ausführen der Operatoren liefert:

$$i \cdot \hbar \cdot \phi(x) \cdot \frac{\mathrm{d}\theta(t)}{\mathrm{d}t} = \theta(t) \cdot \hat{H}(x)\Big(\phi(x)\Big)$$

Separation der Variablen liefert

$$\frac{i \cdot \hbar}{\theta(t)} \cdot \frac{\mathrm{d}\theta(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\hat{H}(x)\Big(\phi(x)\Big)}{\phi(x)}$$

Da die Gleichung für beliebige x und t gelten muss, müssen beide Terme konstant sein. Der rechte Term ist der Quotient aus dem auf die stationäre Wellenfunktion angewandten $\text{H}\scriptstyle\text{AMILTON}$-Operator und der stationären Wellenfunktion, also gleich dem Eigenwert des $\text{H}\scriptstyle\text{AMILTON}$-Operators (der Energie E). Damit ist auch der linke Term gleich der E:

$$\frac{i \cdot \hbar}{\theta(t)} \cdot \frac{\mathrm{d}\theta(t)}{\mathrm{d}t} = E$$

Trennung der Variablen

$$\frac{\mathrm{d}\theta(t)}{\theta(t)} = \frac{E}{i \cdot \hbar} \cdot \mathrm{d}t$$

und Integration liefert

$$\ln \frac{\theta}{\theta_0} = \frac{E \cdot t}{i \cdot \hbar}$$
$$\theta = \theta_0 \cdot \exp(-\frac{i}{\hbar} \cdot E \cdot t)$$

1.3 Für einen linearen Operator $\hat{O}$ gilt die Additivität

$$\hat{O}(f+g) = \hat{O}f + \hat{O}g$$

und die Homogenität

$$\hat{O}(\alpha \cdot f) = \alpha \cdot \hat{O}f$$

Lineare Operatoren sind beispielsweise Multiplikationsoperatoren $\hat{O}x = n \cdot x$, Differentiations- und Integrationsoperatoren. Nicht linear sind der Additionsoperator $\hat{O}x = x + n$, Potenzoperatoren $\hat{O}x = x^n$, Exponentitiationsoperatoren $\hat{O}x = n^x$ und der Fakultätsoperator $\hat{O}x = n!$.

1.4 Der Kommutator ist

$$[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = \hat{O}_1\hat{O}_2 - \hat{O}_2\hat{O}_1$$

(a) Es gilt

$$\begin{aligned}[\hat{O}_1, \hat{O}_2]f &= \left[-i \cdot \hbar \frac{\partial}{\partial x}\left(-i \cdot \hbar \frac{\partial f}{\partial y}\right)\right] - \left[-i \cdot \hbar \frac{\partial}{\partial y}\left(-i \cdot \hbar \frac{\partial f}{\partial x}\right)\right] \\ &= \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y \cdot \partial x} - \frac{\partial^2 f}{\partial x \cdot \partial y}\right)\end{aligned}$$

Wegen des Satzes von SCHWARZ ist

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \cdot \partial x} = \frac{\partial^2 f}{\partial x \cdot \partial y}$$

und damit

$$[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = 0$$

(b) Es gilt

$$\begin{aligned}
[\hat{O}_1, \hat{O}_2] f &= x \cdot \left(-i \cdot \hbar \frac{\partial f}{\partial x}\right) - \left(-i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial (x \cdot f)}{\partial x}\right) \\
&= i \cdot \hbar \cdot \left[\frac{\partial (x \cdot f)}{\partial x} - x \cdot \frac{\partial f}{\partial x}\right] \\
&= i \cdot \hbar \cdot \left[\left(x \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + f \cdot \frac{\partial x}{\partial x}\right) - x \cdot \frac{\partial f}{\partial x}\right] \\
&= i \cdot \hbar \cdot f \\
[\hat{O}_1, \hat{O}_2] &= i \cdot \hbar
\end{aligned}$$

1.5 Allgemein gilt für einen Operatoren $\hat{O}$ und den adjungierten Operator $\hat{O}^+$

$$\langle \Psi_i | \hat{O} | \Psi_j \rangle = (\langle \Psi_j | \hat{O}^+ | \Psi_i \rangle)^*$$

und für HERMITEsche Operatoren

$$\hat{O} = \hat{O}^+$$

Laut Aufgabenstellung gilt

$$\hat{O}\Psi = E \cdot \Psi$$

Zu zeigen ist, dass E immer reell ist, genau dann wenn $\hat{O}$ ein HERMITEscher Operator ist. Es gilt für den HERMITEschen Operator

$$\langle \Psi_i | \hat{O} | \Psi_j \rangle = \langle \Psi_i | \hat{O}^+ | \Psi_j \rangle$$

Für die linke Seite der Gleichung gilt

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_i | \hat{O} | \Psi_j \rangle &= \langle \Psi_i | E \cdot \Psi_j \rangle \\
&= E \cdot \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle
\end{aligned}$$

und für die rechte

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_i | \hat{O}^+ | \Psi_j \rangle &= \langle E \cdot \Psi_i | \Psi_j \rangle \\
&= E^* \cdot \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle
\end{aligned}$$

Damit gilt für den HERMITEschen Operator auch

$$E \cdot \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = E^* \cdot \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle$$

und damit im allgemeinen

$$E = E^*$$

Die Eigenwerte eines HERMITEschen Operators sind damit reell.

1.6 Für HERMITEsche Operatoren gilt

$$\langle \hat{A} f | g \rangle = \langle f | \hat{A} g \rangle$$

Mit der Eigenwertgleichung und den Eigenwerten a und b folgt

$$\begin{aligned} \langle a \cdot f | g \rangle &= \langle f | b \cdot g \rangle \\ a^* \cdot \langle f | g \rangle &= b \cdot \langle f | g \rangle \end{aligned}$$

Da $\hat{A}$ HERMITEsch ist, ist a reell und damit $a^* = a$. Es folgt

$$(a - b) \cdot \langle f | g \rangle = 0$$

Damit muss für unterschiedliche Eigenwerte a und b das Skalarprodukt verschwinden. Die Funktionen sind dann also orthogonal.

4. Seminar – Aufgabe 2: Teilchen im Kasten

2.1 Die SCHRÖDINGER-Gleichung ist

$$\hat{H} \Psi = E \cdot \Psi$$

Dabei ist Ψ die Wellenfunktion, E der Eigenwert und $\hat{H}$ der HAMILTON-Operator

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \\ \hat{V} &= 0 \text{ für } 0 \leq x \leq l \\ \hat{V} &= \infty \text{ sonst} \end{aligned}$$

In dem Bereich, in dem das Potential ∞ ist, ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit null. Aufgrund der Stetigkeitsbedingung muss deshalb auch für $x = 0$ und $x = l$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte null sein, also

$$\begin{aligned} \Psi^*(0) \cdot \Psi(0) = \Psi^*(l) \cdot \Psi(l) &= 0 \\ \Psi(0) = \Psi(l) &= 0 \end{aligned}$$

2.2 Die allgemeine Lösung der homogenen Differentialgleichung 2. Ordnung ist

$$\Psi = A \cdot \cos(k \cdot x) + B \cdot \sin(k \cdot x)$$

Bei $x = 0$ sind

$$\begin{aligned} \cos(k \cdot 0) &= 1 \\ \sin(k \cdot 0) &= 0 \end{aligned}$$

Aus der Randbedingung $\Psi(0) = 0$ folgt deshalb, dass $A = 0$ gelten muss. Aus der Randbedingung $\Psi(l) = 0$ folgt außerdem, dass

$$B \cdot \sin(k \cdot l) = 0$$

Damit muss $k \cdot l$ ein ganzzahliges n-faches von π sein:

$$k = \frac{n}{l} \cdot \pi$$

Einsetzen von Ψ in die Eigenwertgleichung liefert

$$\begin{aligned}
E \cdot B \cdot \sin\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(B \cdot \sin\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right)\right) \\
E \cdot B \cdot \sin\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot B \cdot \sin\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) \cdot \left(\frac{n}{l} \cdot \pi\right)^2 \\
E &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{n}{l} \cdot \pi\right)^2 \\
&= \frac{2h \cdot n^2}{l^2}
\end{aligned}$$

2.3 Die Normierungsbedingung ist

$$\begin{aligned}
\int_0^l \Psi^* \cdot \Psi \,\mathrm{d}x &= 1 \\
\int_0^l \left(N \cdot \sin\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right)\right)^2 \mathrm{d}x &= 1
\end{aligned}$$

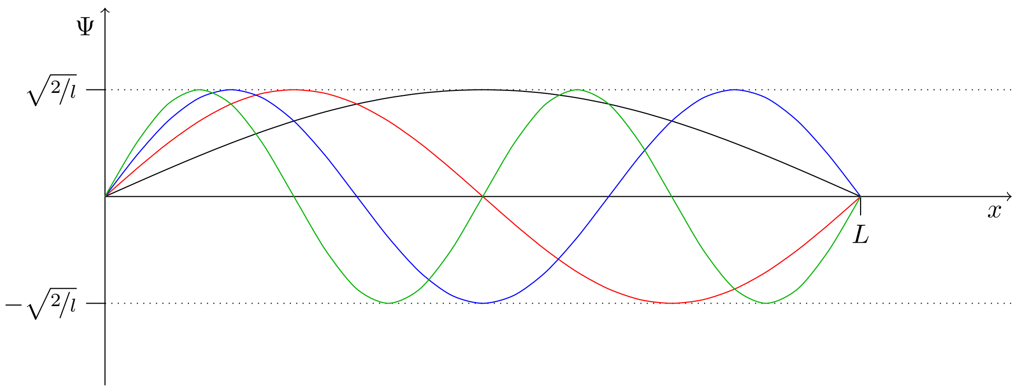
Nehmen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, dass N reell sein soll, so ist

$$\begin{aligned}
N &= \left(\int_0^l \sin^2\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) \mathrm{d}x\right)^{-1/2} \\
&= \sqrt{2/l}
\end{aligned}$$

Damit ist die normierte Wellenfunktion

$$\Psi = \sqrt{2/l} \cdot \sin\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right)$$

2.4



2.5 Der Erwartungswert eines Operators ist der experimentelle Mittelwert der Observablen, der sich bei unendlich häufiger Messung ergeben würde.

2.6 Es ist

$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

Da die Funktion normiert ist vereinfacht sich dies zu

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle &= \langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle \\
&= \int_0^l \Psi^* \cdot x \cdot \Psi \, \mathrm{d}x \\
&= \int_0^l x \cdot \frac{2}{l} \cdot \sin^2\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) \mathrm{d}x \\
&= \int_0^l x \cdot \frac{2}{l} \cdot \frac{1 - \cos\left(\frac{2n}{l} \cdot \pi \cdot x\right)}{2} \mathrm{d}x
\end{aligned}$$

Da die Cosinus-Funktion über eine volle Anzahl an Perioden integriert wird, verschwindet dieser Teil des Integrals. Übrig bleibt nur

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle &= \int_0^l \frac{x}{l} \, \mathrm{d}x \\
&= \frac{l}{2}
\end{aligned}$$

2.7 Es ist (wobei die Normiertheit bereits verwendet wurde)

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p}_x \rangle &= \langle \Psi | \hat{p}_x | \Psi \rangle \\
&= \int_0^l \sqrt{2} \cdot \sin\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(\sqrt{2} \cdot \sin\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) \right) \mathrm{d}x \\
&= 2 \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{n}{l} \cdot \pi \cdot \int_0^l \sin\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) \cdot \cos\left(\frac{n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) \, \mathrm{d}x \\
&= 2 \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{n}{l} \cdot \pi \cdot \int_0^l \frac{\sin\left(\frac{2n}{l} \cdot \pi \cdot x\right)}{2} \, \mathrm{d}x \\
&= \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{n}{l} \cdot \pi \cdot \int_0^l \sin\left(\frac{2n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) \, \mathrm{d}x \\
&= i \cdot \hbar \cdot \frac{n}{l} \cdot \pi \cdot \cos\left(\frac{2n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) \cdot \frac{l}{2 \cdot n \cdot \pi} \Bigg|_0^l \\
&= \frac{i \cdot \hbar}{2} \cdot \cos\left(\frac{2n}{l} \cdot \pi \cdot x\right) \Bigg|_0^l \\
&= 0
\end{aligned}$$

Dies bedeutet, dass eine Bewegung in positive Richtung genauso wahrscheinlich ist wie eine Bewegung in negative Richtung.

5 Varianz und harmonischer Oszillator

5. Seminar – Aufgabe 1: Varianz der Operatoren

1.1 Die Varianz stellt ein Maß für die Streuung der Messwerte, beziehungsweise der Unsicherheit dar.

1.2 Es ist

$$\begin{aligned}
\sigma_{\hat{O}}^2 &= \langle\Psi|(\hat{O}-\langle\hat{O}\rangle)^2|\Psi\rangle \\
&= \langle\Psi|\hat{O}^2 - 2\hat{O}\cdot\langle\hat{O}\rangle + \langle\hat{O}\rangle^2|\Psi\rangle \\
&= \langle\Psi|\hat{O}^2|\Psi\rangle + \langle\Psi| - 2\hat{O}\cdot\langle\hat{O}\rangle|\Psi\rangle + \langle\Psi|\langle\hat{O}\rangle^2|\Psi\rangle \\
&= \langle\Psi|\hat{O}^2|\Psi\rangle - 2\cdot\langle\hat{O}\rangle\cdot\langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle + \langle\hat{O}\rangle^2\cdot\langle\Psi|\Psi\rangle
\end{aligned}$$

Unter Verwendung der Normiertheit ($\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$) und der Definition $\langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle = \langle\hat{O}\rangle$ ergibt sich

$$\begin{aligned}
&= \langle\hat{O}^2\rangle - 2\cdot\langle\hat{O}\rangle\cdot\langle\hat{O}\rangle + \langle\hat{O}\rangle^2 \\
&= \langle\hat{O}^2\rangle - \langle\hat{O}\rangle^2
\end{aligned}$$

1.3 Gegeben ist

$$\hat{O}|\Psi\rangle = E\cdot|\Psi\rangle$$

Nun ist

$$\begin{aligned}
\sigma_{\hat{O}}^2 &= \langle\hat{O}^2\rangle - \langle\hat{O}\rangle^2 \\
&= \langle\Psi|\hat{O}^2|\Psi\rangle - (\langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle)^2 \\
&= \langle\Psi|\hat{O}\hat{O}|\Psi\rangle - (\langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle)^2 \\
&= \langle\Psi|\hat{O}E|\Psi\rangle - (\langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle)^2 \\
&= \langle\Psi|E\cdot E|\Psi\rangle - (\langle\Psi|E|\Psi\rangle)^2 \\
&= E^2\cdot\langle\Psi|\Psi\rangle - (E\cdot\langle\Psi|\Psi\rangle)^2 \\
&= E^2\cdot 1 - (E\cdot 1)^2 \\
&= 0
\end{aligned}$$

1.4 Es ist

$$\begin{aligned}
\langle\Psi|\hat{x}^2|\Psi\rangle &= \int_0^l \Psi^*\cdot x^2\cdot\Psi \,\mathrm{d}x \\
&= \int_0^l x^2\cdot\frac{2}{l}\cdot\sin^2\left(\frac{n\cdot\pi}{l}\cdot x\right) \\
&= \int_0^l x^2\cdot\frac{2}{l}\cdot\frac{1-\cos\left(\frac{2n\cdot\pi}{l}\cdot x\right)}{2} \\
&= \frac{x^3}{3l}\Big|_0^l - \int_0^l \frac{x^2}{l}\cdot\cos\left(\frac{2n\cdot\pi}{l}\cdot x\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{x^3}{3l} - \frac{1}{2n\cdot\pi}\cdot\left(\left(x^2 - \frac{2l^2}{4n^2\cdot\pi^2}\right)\cdot\sin\left(\frac{2n\cdot\pi}{l}\cdot x\right) + \frac{2x\cdot l}{2n\cdot\pi}\cdot\cos\left(\frac{2n\cdot\pi}{l}\cdot x\right)\right)\Big|_0^l \\
&= l^2\cdot\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\cdot\pi^2}\right)
\end{aligned}$$

Und damit

$$\begin{aligned}
\sigma_{\hat{x}}^2 &= \langle\hat{O}^2\rangle - \langle\hat{O}\rangle^2 \\
&= l^2\cdot\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\cdot\pi^2}\right) - \frac{l^2}{4} \\
&= l^2\cdot\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\cdot\pi^2}\right)
\end{aligned}$$

1.5 Es ist zu prüfen, ob

$$\begin{aligned}
\sigma_{\hat{x}}^2 \cdot \sigma_{\hat{p}_x}^2 &\overset{!}{\geq} \frac{\hbar^2}{4} \\
l^2 \cdot \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2 \cdot \pi^2}\right) \cdot \frac{\hbar^2 \cdot n^2 \cdot \pi^2}{l^2} &\overset{!}{\geq} \frac{\hbar^2}{4} \\
\frac{\hbar^2}{4} \cdot \left(\frac{n^2 \cdot \pi^2 - 6}{3}\right) &\overset{!}{\geq} \frac{\hbar^2}{4}
\end{aligned}$$

Dies ist erfüllt, da $n \geq 1$ und damit der rechte Faktor auf der linken Seite minimal

$$\frac{1^2 \cdot \pi^2 - 6}{3} = 1{,}289 \ldots$$

annimmt.

5. Seminar – Aufgabe 2: Harmonischer Oszillator

2.1 Es wird die reduzierte Masse verwendet, da auf diese Weise die beiden Bewegungen zu einer Relativbewegung einer Masse bezüglich der anderen formuliert werden kann. Dies vereinfacht die Beschreibung des Problems.

2.2 Es gilt

$$\begin{aligned}
E \cdot \Psi_0 &= \hat{H}\Psi_0 \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{\mathrm{d}^2\Psi_0}{\mathrm{d}x^2} + \frac{k \cdot x^2}{2} \cdot \Psi_0(x)
\end{aligned}$$

Dies liefert mit

$$\Psi_0(x) = N_0 \cdot e^{-\frac{\sqrt{k \cdot \mu}}{2\hbar}} \cdot x^2$$

nach Ausführen der Differentiation und Ausklammern der Exponentialfunktion

$$\begin{aligned}
E &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \left(\frac{k \cdot \mu}{\hbar^2} \cdot x^2 - \frac{\sqrt{k \cdot \mu}}{\hbar}\right) + \frac{k \cdot x^2}{2} \\
&= -\frac{1}{2} \cdot \left(k \cdot x^2 - \hbar \cdot \sqrt{\frac{k}{\mu}}\right) + \frac{k \cdot x^2}{2} \\
&= \frac{\hbar}{2} \cdot \sqrt{\frac{k}{\mu}} \\
&= \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega
\end{aligned}$$

Wäre der Eigenwert null, so hätte der harmonische Oszillator im Grundzustand weder kinetische noch potentielle Energie. Diese Bedingung ist nur für $x = p_x = 0$ erfüllt. Damit wären Ort und Impuls gleichzeitig scharf definiert, womit die HEISENBERGsche Unschärfe verletzt wäre.

2.3 Es gilt die Normierungsbedingung

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \cdot \Psi \, \mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} N_0^* \cdot e^{-\frac{\sqrt{k \cdot \mu}}{2\hbar} \cdot x^2} \cdot N_0 \cdot e^{-\frac{\sqrt{k \cdot \mu}}{2\hbar} \cdot x^2} \, \mathrm{d}x
\end{aligned}$$

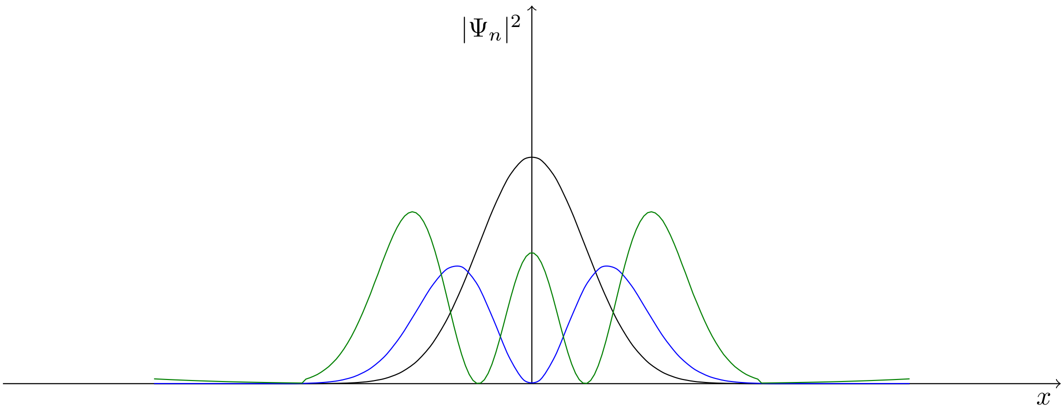
Die Normierungskonstante sei reell, dann gilt:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} N_0^2 \cdot e^{-\frac{\sqrt{k\cdot\mu}}{\hbar}\cdot x^2}\ \mathrm{d}x$$

Dieses Integral ist entsprechend der gegebenen Hilfe

$$\begin{aligned} 1 &= N_0^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi\cdot\hbar}{\sqrt{k\cdot\mu}}} \\ &= N_0^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi\cdot\hbar}{\sqrt{k\cdot\mu}}} \\ N_0 &= \frac{\sqrt[8]{k\cdot\mu}}{\sqrt[4]{\pi\cdot\hbar}} \end{aligned}$$

2.4



2.5 Das Korrespondenzprinzip sagt aus, dass für hohe Quantenzahlen sich die Vorhersagen der Quantenmechanik denen der klassischen Mechanik annähern.

Es gilt auch hier: Die Quantenzustände des harmonischen Oszillators der Quantenmechanik sind Produkte, die sich aus einer GAUSS-Funktion, einem HERMITEschen Polynom und einem Normierungsfaktor zusammensetzen. Im Zusammenspiel gehen diese für hohe Quantenzahlen in die Arcussinus-Funktion über, die vom klassischen harmonischen Oszillator bekannt ist.

6 Starrer Rotator und das Wasserstoffatom

6. Seminar – Aufgabe 1: Starrer Rotator

1.1 Bei Verwendung des Ansatzes

$$\Psi(\phi) = e^{a\cdot\phi}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} E\cdot\Psi &= -\frac{\hbar^2}{2\mu\cdot R^2}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}\phi^2} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu\cdot R^2}\cdot a^2\cdot\Psi \end{aligned}$$

Damit ist

$$a = \pm i\cdot\frac{\sqrt{2\mu\cdot E}\cdot R}{\hbar}$$

1.2 Die Wellenfunktion muss eindeutig sein, das heißt, die Randbedingung $\Psi(\phi) = \Psi(\phi + 2\pi)$ muss erfüllt sein. Da die beiden e-Funktionen linearkombiniert werden, muss diese Bedingung im allgemeinen Fall auch für beide Summanden gelten:

$$A \cdot e^{i \cdot \frac{\sqrt{2\mu \cdot E} \cdot R}{\hbar} \cdot \phi} = A \cdot e^{i \cdot \frac{\sqrt{2\mu \cdot E} \cdot R}{\hbar} \cdot (\phi + 2\pi)}$$
$$1 = e^{2\pi \cdot i \cdot \frac{\sqrt{2\mu \cdot E} \cdot R}{\hbar}}$$

beziehungsweise

$$B \cdot e^{-i \cdot \frac{\sqrt{2\mu \cdot E} \cdot R}{\hbar} \cdot \phi} = B \cdot e^{-i \cdot \frac{\sqrt{2\mu \cdot E} \cdot R}{\hbar} \cdot (\phi + 2\pi)}$$
$$1 = e^{-2\pi \cdot i \cdot \frac{\sqrt{2\mu \cdot E} \cdot R}{\hbar}}$$

Beide Bedingungen sind gleichwertig und nur dann erfüllt, wenn

$$\frac{\sqrt{2\mu \cdot E} \cdot R}{\hbar} = m$$

für eine ganze Zahl m gilt.

1.3 Die Energieabstände eines Übergangs von J zu $J + 1$ sind

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{J+1} - E_J \\ &= B \cdot (J+1) \cdot (J+2) - B \cdot J \cdot (J+1) \\ &= 2B \cdot (J+1)\end{aligned}$$

Der Abstand zweier solcher Übergänge ist damit $2B$, was eine Konstante ist.

1.4 Tatsächlich nimmt mit steigender Rotationsquantenzahl J der Abstand R zwischen den Atomen zu (Zentrifugalkraft). Entsprechend werden die Energien kleiner als unter Annahme eines festen R vermutet wird, sodass auch die Abstände zwischen den Energieniveaus kleiner werden.

1.5
- Separationsansatz liefert zwei Teilgleichungen, die nur von einem Winkelanteil abhängen
- Gleichung 1: starrer Rotator mit raumfester Achse
  Randbedingung: Eindeutigkeit der Wellenfunktion (liefert Quantenzahl m)
  Damit ist die Separationskonstante $c = m^2$ festgelegt
- Wert der Separationskonstante in zweite durch Separationsansatz erhaltene Gleichung einsetzen
- nach Variablentransformation $\theta \rightarrow \cos\theta$ werden assoziierte LEGENDRE-Differentialgleichungen erhalten
  Lösungen sind die assoziierten LEGENDRE-Polynome
- Lösung für die Gesamtwellenfunktion: Produkt der beiden Wellenfunktionen der separierten Gleichung

6. Seminar – Aufgabe 2: Wasserstoffatom

2.1

$$
\begin{aligned}
\langle r\rangle &= \langle\Psi|r|\Psi\rangle \\
&= \iiint \Psi(r)\cdot r\cdot\Psi(r)\ \mathrm{d}V \\
&= \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\int_0^{\infty}\mathrm{d}r\frac{1}{\sqrt{\pi\cdot a_0^3}}\cdot e^{-\frac{r}{a_0}}\cdot r\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi\cdot a_0^3}}\cdot e^{-\frac{r}{a_0}}\cdot r^2\cdot\sin\theta \\
&= \frac{4\cdot\pi}{\pi\cdot a_0^3}\int_0^{\infty} r^3\cdot e^{-\frac{2r}{a_0}}\ \mathrm{d}r \\
&= -\frac{4r^3+6r^2\cdot a_0+6r\cdot a_0^2+3\cdot a_0^2}{2a_0^3}\cdot e^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^{\infty} \\
&= \frac{3}{2}\ a_0
\end{aligned}
$$

2.2

$$
\begin{aligned}
E\cdot\Psi &= \hat{H}\Psi \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}}{r^2\mathrm{d}r}\left(\frac{r^2\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{e^2}{4\pi\cdot\varepsilon_0\cdot r}\cdot\Psi \\
&= \frac{\hbar^2}{m}\cdot\left(\frac{1}{a_0\cdot r}-\frac{1}{a_0}\right)\cdot\Psi-\frac{e^2}{4\pi\cdot\varepsilon_0\cdot r}\cdot\Psi
\end{aligned}
$$

Mit $a_0=\frac{\varepsilon_0\cdot h^2}{\pi\cdot m\cdot e^2}$ ergibt sich

$$
\begin{aligned}
E &= \frac{e^2}{4\pi\cdot\varepsilon_0\cdot r}-\frac{m\cdot e^4}{4\varepsilon_0^2\cdot h^2}-\frac{e^2}{4\pi\cdot\varepsilon_0\cdot r} \\
&= -\frac{m\cdot e^4}{4\varepsilon_0^2\cdot h^2}
\end{aligned}
$$

7 Orbitale, Störungstheorie und Variationsprinzip

7. Seminar – Aufgabe 1: Orbitale des Wasserstoffatoms

1.1

- Aufstellen der SCHRÖDINGER-Gleichung
- Separation von Radial- und Winkelanteil
- Winkelabhängige Funktion lässt sich auf starren Rotator zurückführen
  - Separation der Winkelabhängigkeiten
  - ϕ-Teil (Azimutalanteil): starrer Rotator mit raumfester Achse
    Lösung unter der Randbedingung der Eindeutigkeit der Wellenfunktion (liefert Quantenzahl m und Separationskonstante m^2)
  - θ-Teil (Polaranteil): Lösung mit erhaltener Separationskonstante liefert LEGENDRE-Differentialgleichungen, deren Lösungen die assoziierten LEGENDRE-Polynome sind (liefert Quantenzahl l)
- Lösung der Gleichung mit dem Radialteil anhand der Lösungen der winkelabhängigen Funktion unter Nutzung der Separationskonstante aus dem Winkelanteil (liefert Quantenzahl n)
- Zusammensetzen der Wellenfunktion aus Radialanteil und den Winkelanteilen

- Lösung des Eigenwertproblems liefert die Energie des Wasserstoffatoms

Anders als beim BOHRschen Atommodell müssen die Quantenzahlen nicht postuliert werden:

- m kommt aus der Eideutigkeitsbedingung des starren Rotators
- l ergibt sich aus den LEGENDRE-Polynomen der θ-abhängigen Gleichung
- n ergibt sich aus der Lösung des Radialteils

1.2 Ein Orbital ist eine Einelektronenwellenfunktion. Die Darstellung ist schwierig, da die Funktion von drei Variablen abhängt und die Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eine vierte Dimension verlangen würde.

1.3
- $n = 2$, $l = 0 \Rightarrow 1$ Knotenfläche
- $n = 2$, $l = 1 \Rightarrow 0$ Knotenflächen
- $n = 3$, $l = 0 \Rightarrow 2$ Knotenflächen
- $n = 3$, $l = 1 \Rightarrow 1$ Knotenfläche
- $n = 3$, $l = 2 \Rightarrow 0$ Knotenflächen

1.4

$$\begin{aligned}
\Psi_{2p_x} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\Psi_{2,1,1} + \Psi_{2,1,-1}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{64\pi \cdot a_0^3}} \cdot \frac{r}{a_0} \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot \sin\theta \cdot e^{i\cdot\phi} + \frac{1}{\sqrt{64\pi \cdot a_0^3}} \cdot \frac{r}{a_0} \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot \sin\theta \cdot e^{-i\cdot\phi} \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{32\pi \cdot a_0^5}} \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot r \cdot \sin\theta \cdot \frac{e^{i\cdot\phi} + e^{-i\cdot\phi}}{2} \\
&= \frac{1}{\sqrt{32\pi \cdot a_0^5}} \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot r \cdot \sin\theta \cdot \cos\phi \\
&= \frac{1}{\sqrt{32\pi \cdot a_0^5}} \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot x \\
\Psi_{2p_z} &= \frac{1}{\sqrt{32\pi \cdot a_0^3}} \cdot \frac{r}{a_0} \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot \sin\theta \\
&= \frac{1}{\sqrt{32\pi \cdot a_0^5}} \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot r \cdot \sin\theta \\
&= \frac{1}{\sqrt{32\pi \cdot a_0^5}} \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot z
\end{aligned}$$

Die Orbitale werden als p_x- und p_z-Orbital bezeichnet. Die Darstellungen sind reell und damit besser darstellbar.

7. Seminar – Aufgabe 2: Störungstheorie und Variationsprinzip

2.1 Die Störungsrechnung ist sinnvoll für Probleme, deren ungestörte Lösung bekannt ist, und bei denen die Störung klein gegenüber der ungestörten Lösung ist. Dann werden die Störungsterme mit steigender Ordnung sehr schnell so klein, dass sich bereits mit Störungsrechnungen niedriger Ordnung gute Ergebnisse erzielen lassen.

Schwieriger ist die Betrachtung entarteter Systeme, bei denen die Störung die Entartung aufheben kann, was die Lösung verkompliziert.

2.2
- Testfunktion $\Psi(\lambda_1, \lambda_2, \ldots \lambda_n)$ aufstellen (in der Quantenchemie meist Linearkombinationen der Atomorbitale, bei denen nur die Koeffizienten variabel sind)

- Erwartungswert $E(\lambda_1, \lambda_2, \dots \lambda_n)$ der gesuchten Größe (meist Energie) in Abhängigkeit der Testparameter aufstellen
- Erwartungswert nach Testparametern differenzieren und Nullstellen der ersten Ableitung $\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\lambda_i}$ bestimmen
- Prüfen, ob die so gefundenen Extrema tatsächlich Minima sind ($\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}\lambda_i^2} > 0$)
- Einsetzen der Parameter des bestimmten (globalen) Minimums in den Erwartungswert liefert den (näherungsweisen) Erwartungswert des Grundzustandes

2.3

$$\begin{aligned} E \cdot \Psi &= \hat{H}\Psi \\ &= \hat{T}\Psi + \hat{V}\Psi \\ &= -\frac{\nabla^2\Psi}{2} - \frac{\Psi}{r} \end{aligned}$$

Der Erwartungswert ist

$$E = \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

und

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Psi\rangle &= -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{r^2 \cdot \mathrm{d}r}\left(r^2 \cdot \frac{\mathrm{d}e^{-\alpha\cdot r}}{\mathrm{d}r}\right) - \frac{1}{r} \cdot e^{-\alpha\cdot r} \\ &= \left(\frac{\alpha}{r} - \frac{\alpha^2}{2} - \frac{1}{r}\right) \cdot e^{-\alpha r} \end{aligned}$$

Schließen dieses bereits ausgerechneten Ausdrucks liefert

$$\begin{aligned} \langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle &= \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{\infty} \mathrm{d}r\; e^{-\alpha\cdot r} \cdot \left(\frac{\alpha}{r} - \frac{\alpha^2}{2} - \frac{1}{r}\right) \cdot e^{-\alpha r} \cdot r^2 \cdot \sin\theta \;\mathrm{d}r \\ &= \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \sin\theta \;\mathrm{d}\theta \cdot \int_0^{\infty} \left(\alpha \cdot r - \frac{\alpha^2 \cdot r^2}{2} - r\right) \cdot e^{-2\cdot\alpha\cdot r}\;\mathrm{d}r \\ &= 4\pi \cdot \int_0^{\infty} \left((\alpha - 1) \cdot r - \frac{\alpha^2 \cdot r^2}{2}\right) \cdot e^{-2\cdot\alpha\cdot r}\mathrm{d}r \\ &= 4\pi \cdot \left((\alpha - 1) \cdot \frac{2\alpha \cdot r + 1}{4\alpha^2} + \frac{2\alpha^2 \cdot r^2 + 2\alpha \cdot r + 1}{8\alpha}\right) \cdot e^{-\alpha\cdot r}\Big|_0^{\infty} \\ &= 4\pi \cdot \left(\frac{1-\alpha}{4\alpha^2} + \frac{1}{8\alpha}\right) \end{aligned}$$

Außerdem ist das Normierungsintegral

$$\begin{aligned} \langle\Psi|\Psi\rangle &= \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{\infty} r^2 \cdot e^{-2\alpha\cdot r}\mathrm{d}r \\ &= 4\pi \cdot \left(-\frac{r^2}{2\alpha} - \frac{r}{2\alpha^2} - \frac{1}{4\alpha^3}\right) \cdot e^{-2\alpha\cdot r}\Big|_0^{\infty} \\ &= \frac{4\pi}{4\alpha^3} \end{aligned}$$

Damit ist der Erwartungswert

$$\begin{aligned} E &= \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \\ &= \frac{4\pi\cdot\left(\frac{1-\alpha}{4\alpha^2}+\frac{1}{8\alpha}\right)}{\frac{4\pi}{4\alpha^3}} \\ &= \frac{\alpha^2}{2}-\alpha \end{aligned}$$

und damit

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\alpha} = \alpha - 1 \stackrel{!}{=} 0$$

also ist nach der ersten Ableitung

$$\alpha = 1$$

Einsetzen in die zweite Ableitung

$$\left.\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}\alpha^2}\right|_{\alpha=1} = 1$$

bestätigt, dass es sich um ein Minimum handelt. Einsetzen von $\alpha = 1$ liefert

$$\begin{aligned} E &= \frac{1^2}{2} - 1 \\ &= -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

2.4 Damit ist die atomare Energieeinheit

$$\frac{m_e \cdot e^4}{4\varepsilon_0^2 \cdot h^2} = 4{,}36 \cdot 10^{-18}\ \mathrm{J}$$

Hinweise

Linerkombinationen entarteter Zustände

Wenn

$$\begin{aligned} \hat{A}\Psi_1 &= E\cdot\Psi_1 \\ \hat{A}\Psi_2 &= E\cdot\Psi_2 \end{aligned}$$

gilt, so gilt auch

$$c_1\cdot\hat{A}\Psi_1 + c_2\cdot\hat{A}\Psi_2 = E\cdot(c_1\cdot\Psi_1 + c_2\cdot\Psi_2)$$

Jede Linearkombination von entarteten Zuständen hat als Energieeigenwert wieder den Eigenwert der Funktionen, aus denen sie sich zusammensetzt.

Klausurinhalte

- $1/3$ Rechnen
- $1/3$ Text

- $^1/_3$ Symmetrie
- Rechner und Formelsammlungen nicht zugelassen
- Molekülbaukasten erlaubt
- gegeben (falls nötig): Additionstheoreme, EULER-Beziehung, Raumintegral, Differentiation in Kugelkoordinaten
- nicht gegeben: einfache Operatoren (Ort, Impuls, HAMILTON-Operator, Operatoren der kinetische Energie und der potentielle Energie im Wasserstoffatom ...)

Wissen für die Klausur

- Differentialgleichungen lösen
- Partielle Integration
- HEISENBERGsche Unschärferelation (Folge: Nullpunktsenergie)
- Für kommutierende Operatoren ist die Unschärfe null
- Das Betragsquadrat ist proportional zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit
- Quantenphsysikalische Operatoren sind HERMITEsche Operatoren
- HERMITEsche Operatoren haben reelle Eigenwerte
- HERMITEsche Operatoren sind selbstadjungiert
- Die Eigenfunktionen sind orthogonal
- Bei großen Quantenzahlen gehen alle quantenmechanischen Systeme in klassische über
- Quantisierung kommt durch Randbedingungen zustande (beispielsweise Eindeutigkeit)
- Übungsaufgaben wiederholen

Literaturempfehlung

Folgende Bücher wurden vom Seminarleiter empfohlen:

- MCQUARRIE: Physical Chemistry - a Molecular Approach
- REINHOLD: Quantentheorie der Moleküle
- SZABO, OSTLUND: Modern Quantum Chemistry (besonders erstes Kapitel zur Mathematik)
- ANSDERSO: Mathematics of Quantum Chemistry
- MESSIAH
- THIRRING: Lehrbuch der Mathematischen Physik