Einführung in die Physikalische Chemie, Mathematische Methoden (B)
SS 14

Blatt 10

Aufgabe 33

Annahme: Bewegung der Billardkugel kann durch <u>einen</u> Eigenzustand beschrieben werden, d.h. die Wellenfunktion und der zugehörige Energieeigenwert sind:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \text{ bzw. } E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 \qquad n = 1, 2, ...$$

Berechnung der Quantenzahl für den Zustand:

Kugel hat die Energie $\frac{1}{2}mv^2$: $\quad E = \frac{1}{2}\cdot 170\cdot 10^{-3}\,\text{kg}\cdot 5^2\,\frac{m^2}{s^2} = 2{,}125\,\text{J}$

Aus Formel für E_n: $\quad n^2 = \frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E = \frac{2\cdot 170\cdot 10^{-3}\,\text{kg}\cdot 1{,}27^2\,\text{m}^2}{\hbar^2\pi^2}\cdot 2{,}125\text{ J} = 1{,}06\cdot 10^{67}$

$$\rightarrow\ n = 3{,}26\cdot 10^{33}$$

Abstand benachbarter Energieniveaus:

$$\Delta E = E_n - E_{n-1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 - \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n-1)^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(n^2 - n^2 + 2n - 1\right) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(2n-1)$$

für $n = 3{,}26\cdot 10^{33}$: $\quad \Delta E = 1{,}31\cdot 10^{-33}\,\text{J}$

Energieunterschied ist so gering, dass keine zwei Zustände mit diesem Energieunterschied präpariert werden können.

Ortsunschärfe für das Teilchen im Kasten:

$$D(x) = \frac{L}{2\pi n}\left(\frac{\pi^2 n^2}{3} - 2\right)^{1/2},$$

für $n = 3{,}26 \cdot 10^{33}$: D(x) = 0,367 m

Diese Ortsunschärfe offensichtlich zu groß.

Für $n \to \infty$: $D(x) = \frac{L}{2\pi n}\left(\frac{\pi^2 n^2}{3} - 2\right)^{1/2} \approx \frac{L}{2\pi n}\left(\frac{\pi^2 n^2}{3}\right)^{1/2} = \frac{L}{2\pi n} \cdot \pi n \frac{1}{\sqrt{3}} = \frac{L}{\sqrt{12}}$

$\to$ Gleichverteilung; D(x) ist unabhängig von n

Impulsunschärfe für das Teilchen im Kasten:

$$D(p) = \frac{n\pi\hbar}{L} = 0{,}85\ \text{kg}\frac{\text{m}}{\text{s}}$$

linearer Impuls der Kugel: $p = m \cdot v = 0{,}85\ \text{kg}\frac{\text{m}}{\text{s}}$

Impulsunschärfe kommt zustande, da der Impuls vorzeichenbehaftet ist (entweder $+0{,}85\ \text{kg}\frac{\text{m}}{\text{s}}$ oder $-0{,}85\ \text{kg}\frac{\text{m}}{\text{s}}$). Mittelwert des Impulses (Erwartungswert) für das Teilchen im Kasten ist null $\to$ „Fehler“, den man bei der Messung macht, ist $0{,}85\ \text{kg}\frac{\text{m}}{\text{s}}$.

- aus Ortsunschärfe sieht man, dass diese Beschreibung unsinnig ist

$\rightarrow$ Problem: makroskop. Objekt kann nicht mit <u>einem</u> Eigenzustand beschrieben werden

Lösung: Wellenpaket (viele Eigenfunktionen werden aufaddiert)

$\rightarrow$ je mehr Funktionen, desto schmaler ist der Bereich, in dem sich das Objekt aufhält $\Rightarrow$ D(x) sinkt, aber D(p) steigt

<u>aber</u>: D(p) wird nicht so groß, dass dies bei Messungen bemerkbar wäre

- Quantenmechanik prinzipiell immer anwendbar, aber es ist zu überlegen, wie das Problem zutreffend beschrieben wird
- Hohe Quantenzahlen: Korrespondenzprinzip, d. h. klassische Mechanik ist anwendbar (deutlich einfacher)

Aufgabe 34

a) $x \cdot \left[\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) f(x)\right] - \left(-i\hbar \frac{d}{dx}[x \cdot f(x)]\right) = -i\hbar x \frac{df(x)}{dx} + i\hbar f(x) + i\hbar x \frac{df(x)}{dx} = i\hbar f(x)$

$\rightarrow [\hat{x}, \hat{p}_x] = -i\hbar x \frac{d}{dx} + i\hbar + i\hbar x \frac{d}{dx} = i\hbar$

b) $x \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \Psi\right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} x \Psi\right) = -i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial y} + i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial y} = 0$

$\rightarrow [\hat{x}, \hat{p}_y] = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial y} + i\hbar x \frac{\partial}{\partial y} = 0$

c) $\frac{1}{x} \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi\right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{x} \cdot \Psi\right)\right) = -i\hbar \frac{1}{x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\hbar\left(-\frac{1}{x^2} \Psi + \frac{1}{x} \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) = -\frac{i\hbar}{x^2} \Psi$

$\rightarrow [\hat{x}^{-1}, \hat{p}_x] = -\frac{i\hbar}{x^2}$

d)

$$x \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi\right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x \cdot \Psi)\right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(2 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right) = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

$$\rightarrow \left[\hat{x},\hat{T}\right]=\left[\hat{x},\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\right]=\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}$$

Aufgabe 35

a) gesucht: $\sigma_E^2=\left\langle E^2\right\rangle-\left\langle E\right\rangle^2$

Wellenfunktion: $\Psi(x)=\left(\frac{630}{a^9}\right)^{1/2}x^2(a-x)^2=N\cdot x^2(a-x)^2$

$$\left\langle E\right\rangle=\int_0^a\Psi^*\hat{H}\Psi\,dx=\int_0^a\Psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{d^2}{dx^2}\left(N\cdot x^2(a-x)^2\right)dx=\int_0^a\Psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{d}{dx}\left[N\left(2a^2x-6ax^2+4x^3\right)\right]dx$$

$$=\int_0^a\Psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left[N\left(2a^2-12ax+12x^2\right)\right]dx=\int_0^a N\cdot x^2(a-x)^2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left[N\left(2a^2-12ax+12x^2\right)\right]dx$$

$$=N^2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\int_0^a 2a^4x^2-16a^3x^3+38a^2x^4-36ax^5+12x^6\,dx$$

$$=N^2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left[\frac{2}{3}a^4x^3-4a^3x^4+\frac{38}{5}a^2x^5-6ax^6+\frac{12}{7}x^7\right]_0^a$$

$$=N^2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{2}{3}a^7-4a^7+\frac{38}{5}a^7-6a^7+\frac{12}{7}a^7-0\right)=\frac{630}{a^9}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(-\frac{2}{105}\right)a^7=\frac{6\hbar^2}{a^2m}$$

$$\left\langle E^2\right\rangle = \int_0^a \Psi^* \hat{H}\left[\hat{H}\Psi\right]dx = \int_0^a \Psi^* \hat{H}\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{d^2}{dx^2}\left(N\cdot x^2(a-x)^2\right)\right]dx$$

$$= \int_0^a \Psi^* \hat{H}\left\{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)N\left(2a^2 - 12ax + 12x^2\right)\right\}dx$$

$$= \int_0^a N\cdot x^2(a-x)^2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{d^2}{dx^2}\left\{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)N\left(2a^2 - 12ax + 12x^2\right)\right\}dx$$

$$= N^2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \int_0^a x^2(a-x)^2\,\frac{d}{dx}\left[-12a + 24x\right]dx$$

$$= N^2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \int_0^a x^2(a-x)^2\cdot 24\;dx$$

$$= N^2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \cdot 24 \int_0^a a^2x^2 - 2ax^3 + x^4 dx$$

$$= N^2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \cdot 24\left[\frac{1}{3}a^2x^3 - \frac{1}{2}ax^4 + \frac{1}{5}x^5\right]_0^a$$

$$= 24\cdot N^2\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2\left(\frac{1}{3}a^5 - \frac{1}{2}a^5 + \frac{1}{5}a^5 - 0\right) = 24\cdot\frac{630}{a^9}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2\frac{1}{30}a^5 = \frac{126\hbar^4}{a^4m^2}$$

$$\sigma_E^2 = \left\langle E^2\right\rangle - \left\langle E\right\rangle^2 = \frac{126\hbar^4}{a^4m^2} - \left(\frac{6\hbar^2}{a^2m}\right)^2 = \frac{90\hbar^4}{a^4m^2}$$

b) System befindet sich in Eigenzustand: $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$

$$\left\langle E\right\rangle = \int_0^a \Psi_n^*\hat{H}\Psi_n\,dx = \int_0^a \Psi_n^*\,E_n\Psi_n\,dx = E_n\underbrace{\int_0^a \Psi_n^*\,\Psi_n\,dx}_{=1} = E_n$$

$$\left\langle E^2\right\rangle = \int_0^a \Psi_n^*\hat{H}\left[\hat{H}\Psi_n\right]dx = \int_0^a \Psi_n^*\hat{H}\left[E_n\Psi_n\right]dx = E_n\int_0^a \Psi_n^*\hat{H}\Psi_n\;dx = E_n\int_0^a \Psi_n^*E_n\Psi_n\;dx$$

$$= E_n^2\int_0^a \Psi_n^*\Psi_n\;dx = E_n^2$$

$$\sigma_E^2 = \left\langle E^2\right\rangle - \left\langle E\right\rangle^2 = E_n^2 - \left(E_n\right)^2 = 0$$

Alle Lösungen ohne Gewähr!!!