



Physik IV: Integrierter Kurs (Theoretische Physik)
Sommersemester 2015 - Übungsblatt 10
Ausgabe: 24.6., Abgabe: 1.7., Übungen: 3.7.

Aufgabe 24: Lineare Algebra

(schriftlich - 8 Punkte)

a) (2 Punkte) Zeigen Sie für zwei beliebige Vektoren ϕ und ψ eines Hilbertraumes die

1. Schwarzsche Ungleichung : $|\langle \phi | \psi \rangle| \leq \|\phi\| \|\psi\|$

2. Dreiecksungleichung : $\|\phi + \psi\| \leq \|\phi\| + \|\psi\|$

Die Norm $\|\cdot\|$ ist die Standardnorm, definiert über das Skalarprodukt, d.h. z.B. $\|\phi\| = \sqrt{\langle \phi | \phi \rangle}$.

b) (2 Punkte) Zeigen Sie, dass die Eigenwerte eines hermiteschen Operators reell und die Eigenvektoren orthogonal sind.

c) (2 Punkte) Bei gegebener Orthonormalbasis $|\psi_n\rangle$ (mit $n = 1, \dots, N$, N -Dimension des Hilbert-Raumes) lässt sich ein linearer Operator A als Matrix darstellen, durch

$$(A_{ij}) = \langle \psi_i | A | \psi_j \rangle.$$

Zeigen Sie, dass die Spur (=Summe der Diagonalelemente) der Matrixdarstellung von linearen Operatoren (in einem Hilbert-Raum mit abzählbarer Orthonormalbasis) unabhängig von der gewählten Basis ist.

d) (2 Punkte) In Analogie zu den *Poisson-Klammern* in der Mechanik wird in der Quantenmechanik der Kommutator $[A, B] := AB - BA$ zwischen zwei linearen Operatoren eingeführt.

Wenn A und B hermitesch sind, wann ist das Produkt AB auch hermitesch? Folgt aus $[A, B] = 0$ und $[B, C] = 0$ auch $[A, C] = 0$?

Aufgabe 25: Wasserstoffatom im Magnetfeld

(mündlich)

a) Welcher Hamiltonoperator H beschreibt ein Teilchen der Masse m und Ladung q in einem Zentralpotential $V(\mathbf{r})$ in einem Feld (Vektorpotential) $\mathbf{A}(\mathbf{r})$?

b) Verwenden sie die Wahl $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ (mit zeit- und ortsunabhängigem Magnetfeld B) um H umzuformen in $H = H_0 + H_1 + H_2$ mit $H_1 = -\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$ und $H_2 = \frac{q^2 B^2}{8m} \mathbf{r}_\perp^2$.

c) Betrachten Sie den Operator $H = H_0 + H_1$. Was ist die Bedeutung von H_1 ? Zeigen Sie für das Coulomb-Potential, dass die Eigenzustände von H Eigenzustände des Wasserstoffatoms sind.

- d) Betrachten Sie die Zustände $\{|n = 2, l = 1, m\rangle\}$. Wie lautet die Zeitentwicklung eines Zustandes $|\phi\rangle$ für $|\phi(0)\rangle = \alpha(0)|2, 1, 1\rangle + \beta(0)|2, 1, -1\rangle$?
- e) Man wähle $\alpha(0) = \beta(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man das System im Zustand $\frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 1, 1\rangle + |2, 1, -1\rangle)$ zur Zeit $t = t_1$? Interpretieren Sie das Ergebnis.
- Hinweis:* $|2, 1, 1\rangle + |2, 1, -1\rangle \sim p_x$ oder p_y .
- f) Berechnen Sie den Erwartungswert des Drehimpulses \mathbf{L} . Ist dieses Ergebnis überraschend?

Aufgabe 26: Hybridisierung

(mündlich)

Aufgrund der Linearität der Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom sind nicht nur die Eigenzustände für ein festes l Lösungen zu einer festen Energie, sondern auch beliebige Linearkombinationen von verschiedenen l -Zuständen mit gleichem Energieeigenwert.

In Molekülen ist es möglich, dass Linearkombinationen der reinen atomaren Wellenfunktionen, sog. *Hybridorbitale*, energetisch günstiger sind und damit im bevorzugten Grundzustand auftreten. Die Form des Methanmoleküls CH_4 lässt sich mit der Hybridisierung der $2s$ - und $2p$ -Wellenfunktionen des Kohlenstoffs verstehen. Die für $n = 2$ möglichen Hybridwellenfunktionen sind

$$\psi_1 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} + \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z}),$$

$$\psi_2 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} + \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z}),$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} - \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z}),$$

$$\psi_4 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} - \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z}),$$

mit den orthonormierten Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms ($\psi_{n,l,m}$)

$$\psi_{2s} = \psi_{2,0,0},$$

$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,-1} - \psi_{2,1,1}),$$

$$\psi_{2p_y} = \frac{i}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,-1} + \psi_{2,1,1}),$$

$$\psi_{2p_z} = \psi_{2,1,0}.$$

- a) Zeigen Sie, dass die Hybridwellenfunktionen orthonormiert sind und alle den gleichen Energieeigenwert haben, wenn der Energieunterschied zwischen s - und p -Orbitalen vernachlässigt wird (l -Entartung).
- b) Berechnen Sie für ψ_1 und ψ_2 die Richtung maximaler Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte.
Hinweis: Verwenden sie kartesische Koordinaten und stellen Sie Beziehungen zwischen den einzelnen Koordinaten auf.
- c) Bestimmen Sie anhand der in b) ermittelten Ortsvektoren den sog. Tetraederwinkel des Methanmoleküls von etwa $109,5^\circ$.