



# Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

Übungsleiter: Tanja Asthalter · Zimmer 9-356 · Tel. 4464 · e-mail t.asthalter@ipc.uni-stuttgart.de

## Lösungsblatt 22

17. 1. 2006

### Lösung zu Aufgabe 22.1

a)

$$\begin{pmatrix} \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

→ kein Eigenvektor

b)

$$\begin{pmatrix} \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

→ Eigenvektor zum Eigenwert 1

c)

$$\begin{pmatrix} \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix}$$

→ kein Eigenvektor

d)

$$\begin{pmatrix} \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \end{pmatrix}$$

→ Eigenvektor zum Eigenwert 2

### Lösung zu Aufgabe 22.2

a)

Berechnung der Norm:

$$\int_0^L \psi^*(x) \psi(x) dx = \frac{1}{L} \int_0^L \sin^2 \left( \frac{\pi x}{L} \right) dx$$

Integration kann man per Integraltabelle oder „zu Fuß“ durchführen. Hier letztere Variante:

$$\int \underbrace{\sin ax}_{=u} \underbrace{\sin ax}_{=v'} dx = \underbrace{\sin ax}_{=u} \underbrace{-\frac{1}{a} \cos ax}_{=v} - \int \underbrace{a \cos ax}_{=u'} \underbrace{\left(-\frac{1}{a} \cos ax\right)}_{=v} dx$$

$$\rightarrow 2 \int \sin^2 ax dx = -\frac{1}{a} \sin ax \cos ax + x \rightarrow \int \sin^2 ax dx = \frac{1}{2} \left( x - \frac{1}{a} \sin ax \cos ax \right)$$

Norm wegen  $a = \pi/L$  daher:

$$\begin{aligned}\int_0^L \psi^*(x)\psi(x)dx &= \frac{1}{L} \left[ \frac{x}{2} - \frac{L}{2\pi} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right]_0^L \\ &= \frac{1}{L} \left[ \frac{L}{2} - \frac{L}{2\pi} \underbrace{\sin \pi}_{=0} \cos \pi - 0 + \frac{L}{2\pi} \underbrace{\sin 0}_{=0} \cos 0 \right] \\ &= \frac{1}{2} \neq 1\end{aligned}$$

→ Funktion ist nicht normiert. Richtig muß es heißen

$$\underline{\underline{\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)}}$$

b) Wahrscheinlichkeit für Intervall von 0 bis  $L/4$ : Integration der Wahrscheinlichkeitsdichte über dieses Intervall. Also:

$$\begin{aligned}P &= \int_0^{L/4} \psi^*(x)\psi(x)dx \\ &= \frac{2}{L} \int_0^{L/4} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx \\ &= \frac{2}{L} \left[ \frac{x}{2} - \frac{L}{2\pi} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right]_0^{L/4} \\ &= \frac{2}{L} \left[ \frac{L}{8} - \frac{L}{2\pi} \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) - 0 + \frac{L}{2\pi} \sin 0 \cos 0 \right] \\ &= \frac{2}{L} \left[ \frac{L}{8} - \frac{L}{2\pi} \cdot \frac{1}{2} \right] \\ &= \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} \\ &= \underline{\underline{0,0908}}\end{aligned}$$

c)

$$x \frac{d}{dx} \psi(x) = x \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \frac{\pi}{L} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx} x \psi(x) &= \frac{d}{dx} \left[ \sqrt{\frac{2}{L}} x \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right] \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \left[ \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \frac{\pi x}{L} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right]\end{aligned}$$

Beide Ausdrücke sind verschieden,  $x$  und  $d/dx$  kommutieren also nicht.

- d) (i) und (iv): Multiplikation mit  $x$  bzw.  $x^2$  führt zu nicht konstantem Vorfaktor → keine Eigenfunktion  
(ii) Einmal ableiten führt zu Cosinus, kein Vielfaches der Sinusfunktion → keine Eigenfunktion  
(iii) Eigenfunktion zu folgendem Eigenwert:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\pi}{L} \frac{d}{dx} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\pi}{L} \left[ -\frac{\pi}{L} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right]$$

Eigenwert ist daher gleich  $\underline{\underline{-\pi^2/L^2}}$ .

### Lösung zu Aufgabe 22.3

Der Impulsoperator lautet:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (1)$$

Daraus folgt für den Erwartungswert des Impulses:

$$\langle p \rangle = \frac{\int \varphi^* \hat{p} \varphi dx}{\int \varphi^* \varphi dx} \quad (2)$$

$$\varphi_1 = e^{ikx} \quad (3)$$

(1) und (3) in (2) eingesetzt:

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \frac{d}{dx} e^{ikx} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} e^{ikx} dx} = \underline{\underline{\hbar k}} \quad (4)$$

Die vorige Gleichung ist nicht ganz trivial, da das Integral eigentlich divergiert. Da es sowohl im Zähler als auch im Nenner steht, kann man es als Nicht-Mathematiker guten Gewissens wegekürzen...

$$\varphi_2 = \cos(kx) \quad (5)$$

(1) und (5) in (2) eingesetzt:

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \cos(kx) \frac{d}{dx} \cos(kx) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \cos^2(kx) dx} = -\frac{\hbar k}{i} \cdot \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \cos(kx) \sin(kx) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \cos^2(kx) dx} = \underline{\underline{0}} \quad (6)$$

Das letzte Gleichheitszeichen gilt, weil der Integrand ungerade ist.

$$\varphi_3 = e^{-ax^2} \quad (7)$$

(1) und (7) in (2) eingesetzt:

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} \frac{d}{dx} e^{-ax^2} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} e^{-ax^2} dx} = -2a \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-2ax^2} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2} dx} = \underline{\underline{0}} \quad (8)$$

Das letzte Gleichheitszeichen gilt, weil der Integrand ungerade ist.