
**Vorlesung Quantenmechanik
Übungsklausur**

1 Wellenfunktion

- a) Warum muss die Wellenfunktion quadratintegrierbar sein?
b) Welche der folgenden Funktionen sind von $-\infty$ bis $+\infty$ quadratintegrierbar?

(i) $\psi(x) = \sin(x)$, (ii) $\psi(x) = e^x$, (iii) $\psi(x) = e^{-\alpha x^2}$ mit $\alpha > 0$

- c) Wie verhält es sich für $-\infty$ bis 0?

$$\int \sin^2(ax) dx = \frac{1}{2a} (ax - \sin(ax) \cos(ax))$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad a > 0$$

2 Operatoren

- a) Welche der folgenden Operatoren sind hermitesch?

(i) $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$, (ii) $\hat{P} = \sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i|$, (iii) $\hat{A} = \hat{a}\hat{a}^\dagger$, (iv) $\hat{B} = \hat{a}\hat{b}^\dagger$, (v) $\hat{C} = \hat{a}\hat{b}\hat{c}$

Hinweis:

Verwenden Sie in (i) den Ansatz:

$$\langle \Psi_a | \hat{O} | \Psi_b \rangle = \langle \Psi_b | \hat{O} | \Psi_a \rangle^*$$

mit Ψ_a, Ψ_b als beliebige quadratintegrierbare Funktionen und

$$\Psi_a^* \Psi_b \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0 \tag{1}$$

Die in (ii) verwendeten Funktionen seien orthogonal:

$$\langle m | n \rangle = a_{mn} \delta_{mn}$$

Die in (iii) – (v) verwendeten $\hat{a}$, $\hat{b}$ und $\hat{c}$ seien beliebige Operatoren.

- b) Projektionsoperatoren sind idempotent ($\hat{O}^2 = \hat{O}$) und selbstadjungiert. Wann ist $\hat{P}$ aus a) (ii) ein Projektionsoperator?

- c) Welche der folgenden Funktionen $f(x)$ ist eine Eigenfunktion zu den Operatoren $\hat{O}$? Begründen Sie Ihre Antwort durch explizite Rechnung für alle Kombinationen der Operatoren mit den Funktionen.

$$f(x) = \cos(x), \quad f(x) = \sqrt{x}, \quad f(x) = \sum_{i=1}^n a_i x^i, \quad f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-\alpha)^i}{i!} x^i$$

$$\hat{O} = \frac{d}{dx}, \quad \hat{O} = \frac{d^2}{dx^2}, \quad \hat{O} = \hat{\Pi}$$

Der Paritätsoperator $\hat{\Pi}$ vertauscht das Vorzeichen der Ortskoordinate einer Funktion.

$$\hat{\Pi}f(x) = f(-x)$$

3 Eigenfunktionen

- Zeigen Sie, dass eine beliebige Linearkombination aus zwei entarteten Eigenfunktionen eines linearen hermiteschen Operators wieder eine Eigenfunktion des Operators ist.
- Ist eine Linearkombination aus zwei beliebigen Eigenfunktionen eines linearen hermiteschen Operators wieder eine Eigenfunktion des Operators? Begründen Sie Ihre Antwort durch eine Rechnung.
- Wenn zwei Operatoren kommutieren, dann haben Sie einen Satz gemeinsamer Eigenfunktionen. Haben der Impuls-Operator und der Hamilton-Operator des freien Teilchens einen Satz von gemeinsamen Eigenfunktionen? Begründen Sie Ihre Antwort durch eine Rechnung.
- Ist $\Psi = \cos(kx)$ Eigenfunktion des Hamilton-Operators des freien Teilchens? Begründen Sie Ihre Antwort durch eine Rechnung.
- Ist $\Psi = \cos(kx)$ Eigenfunktion des Impuls-Operators? Begründen Sie Ihre Antwort durch eine Rechnung.
- Interpretieren Sie das Ergebnis!

4 Die Heisenbergsche Unschärferelation

- Für 2 verträgliche Messgrößen kommutieren die dazugehörigen Operatoren. Für nicht verträgliche Messgrößen kommutieren die entsprechenden Operatoren nicht. Sind Ort und Impuls verträgliche Messgrößen? Werten Sie:

$$\langle \Psi(x) | [\hat{x}, \hat{p}_x]_- | \Psi(x) \rangle$$

aus, um ihre Antwort zu begründen.

5 Erwartungswerte

- a) Der lineare hermitesche Operator $\hat{A}$ habe abzählbar unendlich viele Eigenwerte a_i mit orthonormierten Eigenzuständen $|a_i\rangle$. Mit welcher Wahrscheinlichkeit werden am System mit dem Zustand

$$\psi = \frac{1}{2} |a_1\rangle + \frac{i}{4} |a_2\rangle$$

die Werte a_2 und a_3 gemessen? Was ist der mittlere Messwert? (Denken Sie an die Normierung!)

6 Teilchen im Kasten

- a) Die Schrödinger-Gleichung für das Teilchen im eindimensionalen Kasten lautet:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

mit $V(x) = \begin{cases} V_0 & -L \leq x \leq L, \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$

Berechnen Sie die normierte Wellenfunktion und die Energie für alle erlaubten Zustände! Verwenden Sie $\psi(x) = A \cos(\alpha x) + B \sin(\alpha x)$ als Wellenfunktion.

$$\int \sin^2(ax) dx = \frac{1}{2}x - \frac{1}{4a} \sin(2ax)$$

- b) Warum ist die Energie quantisiert?

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

- c) Sind die Wellenfunktionen Eigenfunktionen des Paritätsoperators aus Aufgabe 2?

7 Potential und Wellenfunktion

- a) Skizzieren Sie das Potential:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & -\infty \leq x \leq -L, \\ 0 & -L < x < 0, \\ \infty & 0 \leq x \leq \infty \end{cases}$$

- b) Skizzieren Sie das Potential:

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2$$

- c) Skizzieren Sie die Wellenfunktion eines Teilchens im Potential aus a) zu den beiden tiefsten Energieeigenwerten!
- d) Skizzieren Sie die dazugehörigen Wahrscheinlichkeitsdichten!
- e) Skizzieren Sie die Wellenfunktion eines Teilchens im Potential aus b) zu den beiden tiefsten Energieeigenwerten!
- f) Skizzieren Sie die dazugehörigen Wahrscheinlichkeitsdichten!
- g) Wie unterscheiden sich die Wellenfunktionen im Potential a) im Vergleich zu den Wellenfunktionen im Potential in b) qualitativ?
- h) Betrachten Sie die Wahrscheinlichkeitsdichten aus d) und f). Wie lauteten die folgenden Sätze richtig?
 Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Potential a) ist größer/kleiner/gleich 1.
 Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Potential b) ist größer/kleiner/gleich 1.
 Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens außerhalb des klassischen Potentialtopfes a) ist größer/kleiner/gleich 0.
 Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens außerhalb des klassischen Potentialtopfes b) ist größer/kleiner/gleich 0.
- i) Begründen Sie ihre Antwort zu den Fragen in h) qualitativ anhand der Wahrscheinlichkeitsdichte!

8 Wasserstoffatom

- a) Was ist ein Orbital?
- b) Skizzieren Sie den Verlauf der 2s- und der 2p- Funktion in Abhängigkeit des Abstandes r !
- c) Skizzieren Sie die Wahrscheinlichkeitsdichte der 2s- und der 2p- Funktion in Abhängigkeit des Abstandes r !
- d) Skizzieren Sie die radiale Verteilungsfunktion für die 2s- Funktion!
- e) Die Bindungsflächen umschließen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit von 90 % eines Elektrons in einem Orbital. Skizzieren Sie die Bindungsflächen des 2s Orbitals.
- f) Zeichnen die Winkelverteilung des 2p₁-Orbitals anhand der Wahrscheinlichkeitsdichte (ohne Vorfaktor).

$$Y_{1\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin(\theta) e^{\pm i\phi}$$

$\theta[^\circ]$	$\sin^2(\theta)$
0	0
30	0.25
60	0.75
90	1
120	0.75
150	0.25
180	0

- g) Zeichnen Sie die Winkelverteilung des $2p_{-1}$ -Orbitals anhand der Wahrscheinlichkeitsdichte (ohne Vorfaktor).
- h) Was fällt Ihnen an den beiden Polardiagrammen auf?
- i) Woher kommt der andere Teil der Hantel?
- j) Berechnen Sie das normierte p_x -Orbital aus den $p_{1\pm 1}$ -Orbitalen!
- k) Berechnen Sie Y_{21} und Y_{2-1} aus den zugeordneten Legendre-Polynomen.

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l$$

$$P_l^m(z) = (-1)^m (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dz^m} P_l(z) \quad m \geq 0$$

$$P_l^{-m} = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(z) \quad m \geq 0$$

$$Y_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos(\theta)) e^{im\phi}$$

Beachten Sie, dass die Restriktion für m nicht in der Gleichung für Y_{lm} gilt.

- l) Veranschaulichen Sie die Richtungsquantisierung des Drehimpulses für $l = 1$.