Übungsblatt Nr. 11

**Übungen zur "Einführung in die Quantentheorie"**
WS 08/09 Prof. J. Schirmer

1. H–Atom mit Gaussfunktion (4 Punkte)
   Mache folgenden Ansatz für den Grundzustand des H–Atoms:
   $$\psi(r) = Ne^{-\alpha r^2}$$
   (a) Normiere diese Funktion und bestimme den Parameter $\alpha$ so, daß der Mittelwert der Energie
   $$\bar{E}(\alpha) = (\psi, \hat{H}\psi)$$
   minimal wird. Vergleiche $\bar{E}(\alpha_{min})$ mit dem exakten Energiewert.
   (b) Berechne das Verhältnis von kinetischer und potentieller Energie für $\alpha = \alpha_{min}$.

2. $\pi-$Orbitale von Benzol (Hückel-Modell) (5 Punkte)
   Setze je ein normiertes $p_z$-Orbital (Atomorbital) $\varphi(\underline{r})$ an die Positionen $\underline{R}_n$ der sechs C-Atome eines Benzolmoleküls,
   $$\varphi_n(\underline{r}) = \varphi(\underline{r} - \underline{R}_n), \qquad n = 1, 2, ..., 6$$
   Wir nehmen an, daß Orbitale an verschiedenen Kernen keinen Überlapp haben, d.h.:
   $$(\varphi_n, \varphi_m) = \delta_{nm}, \qquad n, m = 1, 2, ..., 6$$
   Für die Wirkung eines Modell-Hamiltonoperator $\hat{h}$ auf die Atomorbitale gelte:
   $$\hat{h}\varphi_n = \alpha\varphi_n - \beta(\varphi_{n-1} + \varphi_{n+1}), \quad n = 1, \cdots, 6$$
   wobei wegen der zyklischen Anordnung 7 (mod 6) = 1 und 0 (mod 6) = 6 zu setzen ist; $\alpha$ und $\beta$ seien positive (reelle) Parameter.

   (a) Bestimme die Matrix der Elemente $h_{ij} = (\varphi_i, \hat{h}\varphi_j), \quad i, j = 1, \cdots, 6.$
   (b) Zeige, daß die maximal "bindende" Linearkombination
   $$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}}(\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4 + \varphi_5 + \varphi_6)$$
   und die maximal "antibindende" Linearkombinatio'n
   $$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}}(\varphi_1 - \varphi_2 + \varphi_3 - \varphi_4 + \varphi_5 - \varphi_6)$$
   normierte Eigenfunktionen des Hamiltonoperators sind. Wie lauten die zugehörigen Eigenwerte?

3. Polardarstellung der Winkelabhängigkeit von Orbitalen (2 Punkte)
Bei der Polardarstellung einer Funktion $f = f(\vartheta)$ (z.B. in der xz-Ebene) trägt man für jeden Winkel $\theta$ auf dem mit der z-Achse den Winkel $\theta$ bildenden Strahl einen Punkt auf, der vom Koordinatenursprung den Abstand $|f(\theta)|$ hat.

   (a) Zeige, daß die Polardarstellung der Funktion

   $$f(\vartheta) = \cos\vartheta$$

   zwei Kreise mit Radius $\frac{1}{2}$ und Mittelpunkt auf der z-Achse bei $z = +\frac{1}{2}$ bzw. $z = -\frac{1}{2}$ ergibt.

   (b) Skizziere die Polardiagramme für

   $$\begin{aligned} f(\vartheta) &= \cos^2\vartheta \\ f(\vartheta) &= \sin^2\vartheta \end{aligned}$$

Abgabetermin: Dienstag, 13. 1. 09, 13.00 Uhr