ulm university universität ulm

Prof. Dr. Axel Groß
Institut für Theoretische Chemie

# Theoretische Modellierung und Simulation

**Übungsblatt Nr. 7, 14.06.2020**

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`
Abgabe der Lösungen des Übungsblattes bis zum 24.06.2020 auf der Moodle-Platform

---

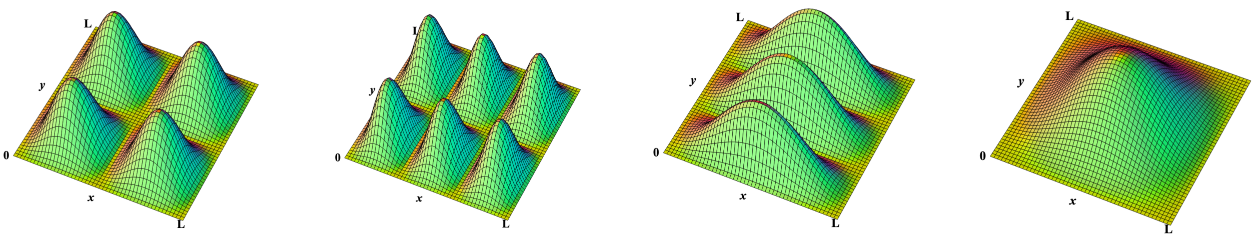
**Aufgabe 15:** Quantenmechanisches Teilchen im Kasten
Ein Teilchen in einem Kasten ist das einfachste Modell zur quantenmechanischen Beschreibung eines Atoms. Für einen eindimensionalen Kasten von $x = -a$ bis $x = a$ mit unendlich hohen Potentialwänden sind die möglichen Energieniveaus gegeben durch

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2 = E_1\ n^2\ . \tag{1}$$

Wie sehen die Energieniveaus $E_{n_x n_y n_z}$ für ein Teilchen in einem kubischen, d.h. dreidimensionalen Kasten mit Seitenlänge $2a$ aus? Einige Energieniveaus sind entartet, d.h. es gibt mehrere Quantenzustände mit gleicher Energie. Tragen Sie die Anzahl der Energieniveaus als Funktion ihrer Energie in Einheiten von $E_1$ bis $E = 25E_1$ im ein- und dreidimensionalen Fall auf. Einige Entartungen sind *natürlich*, d.h. sie entstehen aus Symmetriegründen, andere sind zufällig. Gibt es bis $E = 25E_1$ eine zufällige Entartung? Falls nicht, finden sie mindestens eine zufällige Entartung bei höheren Energien.

**Aufgabe 16** Ein quantenmechanische Teilchen in einem 2D-Kasten
In einem zweidimensionalen quadratischen Kasten mit Seitenlänge $L$ mit unendlich hohen Potentialwänden befinde sich ein Teilchen.

In den folgenden vier Abbildungen sind mögliche Wahrscheinlichkeitsdichten dargestellt:




**1** **2** **3** **4**

Diese Bilder sind als Screenshots von der Webpage https://chem.libretexts.org/Bookshelves/... erzeugt, die auf der Moodle-Platform verlinkt ist. Erzeugen Sie als erstes Screenshots der entsprechenden Wellenfunktionen, die den oben gezeigten Wahrscheinlichkeitsdichten zugrunde liegen, von der gleichen Webpage.

Bestimmen Sie in den vier Fällen die Quantenzahlen $(n_x, n_y)$ der zugrundeliegenden Wellenfunktionen und bestimmen Sie ihre Energien für die Masse $m$ und die Seitenlänge $L$.

Bitte wenden!

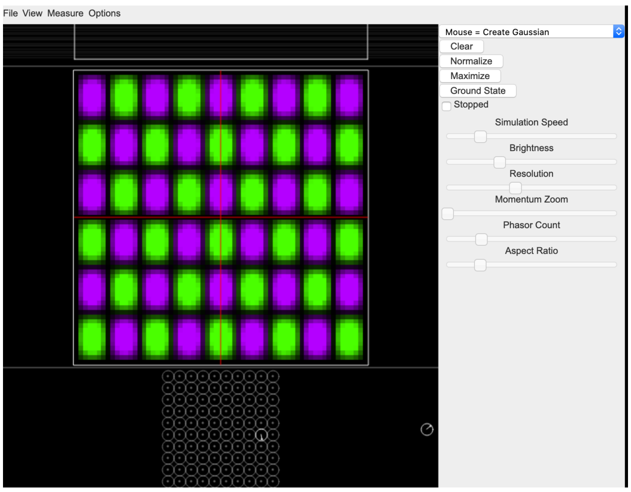
Ordnen Sie die Wahrscheinlichkeitsdichten in den Bildern 1-4 den folgenden Wellenfunktionen / Fällen zu (beachten Sie, dass es nicht notwendigerweise eine richtige Zuordnung gibt):

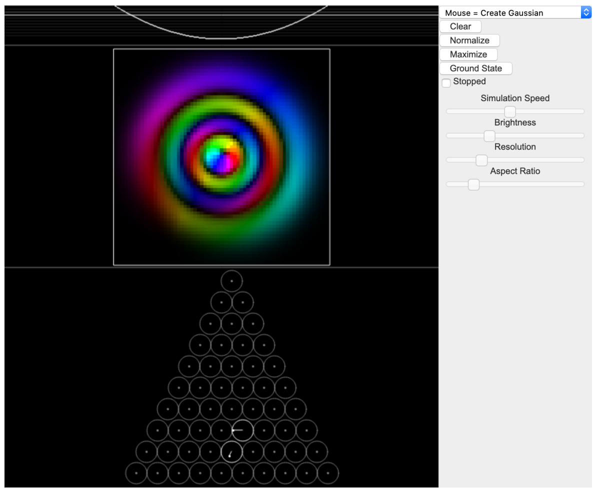
- $\Psi(x, y) \propto \cos(\frac{3\pi x}{L}) \sin(\frac{2\pi x}{L})$:
- $\Psi(x, y) \propto \sin(\frac{2\pi x}{L}) \sin(\frac{2\pi x}{L})$:
- $\Psi(x, y) \propto \cos(\frac{3\pi x}{L}) \sin(\frac{4\pi x}{L})$:
- Welche Zustände sind entartet?
- Welche Zusände sind nicht-entartet

Nehmen Sie nun an, die Wahrscheinlichkeitsdichten entsprechen zwei nicht-wechselwirkenden Teilen in einem eindimensionalen Kasten. Ordnen Sie die Wahrscheinlichkeitsdichten in den Bildern 1-4 den folgenden Wellenfunktionen / Fällen zu:

- $\Psi(x_A, X_B) \propto \cos(\frac{1\pi x_A}{L}) \cos(\frac{1\pi x_B}{L})$:
- Teilchen könnten ununterscheidbar sein:
- Teilchen müssen unterscheidbar sein:
- Wellenfunktion entspricht einer anti-symmetrischen Kombination:

**Aufgabe 17** 2D Quantenmechanik
Bei http://www.falstad.com/qm2dbox/ und http://www.falstad.com/qm2dosc/ finden Sie Apps, mit denen man Zustände in einem 2D Kasten mit unendlich hohen Potentialwänden bzw. in einem 2D harmonischen Oscillator simulieren kann. Hier sehen Sie zwei Screenshots:




Erzeugen Sie zunächst für den 2D-Kasten für die Zustände $(n_x, n_y) = (1,1)$, $(10,1)$ und $(10,10)$ Bilder der Eigenzustände wie im oberen linken Bild, indem Sie auf den entsprechenden "Phasor" (die Kreise im unteren Teil der oben gezeigten Abbildungen) doppelklicken

Bei 2D-Harmonischen Oszillator kann man unter "View" sowohl "rectangular states" als auch "angular states". Erzeugen Sie zunächst Bilder von dem "rectangular states" mit $(n_x, n_y) = (0,0)$ und $(9,0)$ und vergleichen Sie diese mit den entsprechenden Bildern für den 2D-Kasten. Welche Unterschiede fallen Ihnen auf?

Gehen Sie nun zu "angular states" und erzeugen Bilder von Zuständen mit $(n, m) = (0,0)$, $(8,0)$, $(8,4)$ und $(8,8)$. Welche Trends erkennen Sie bei den Zuständen. Was bedeutet wohl die Quantenzahl $m$? Diese Teil-Aufgabe kann als Vorbereitung zum Verständnis der quantenmechanischen Lösung des Wasserstoffatoms angesehen werden, die in der Vorlesung besprochen wird.