

HANDOUT ZUM ÜBUNGSBLATT NR.12

Aufgabe 1

a) und b)

Nach der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation gilt $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$. Hierbei sind Δp und Δx prinzipielle Unbestimmtheiten von Impuls und Ort, die aus den Eigenschaften der Quantentheorie heraus folgen. Die Relation besagt im Wesentlichen, dass Ort und Impuls gleichzeitig nicht beliebig genau gemessen werden können. Das ist eine Folge der Nichtvertauschbarkeit des Orts- und Impulsoperators. Analog lässt sich die Beziehung $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$ ableiten, die jedoch anders aufgefasst werden muss als die erstere Unbestimmtheitsrelation zwischen Ort und Impuls. Hier sind ΔE und Δt keine Ungenauigkeiten, weil man der Zeit auch in der Quantenmechanik keinen Operator zuordnet; diese ist wie auch in der klassischen Mechanik ein einfacher Parameter. In einem quantenmechanischen System ist ΔE die Abweichung vom mittleren Wert der Energie $\langle E \rangle$, die das System über ein Zeitintervall Δt annehmen kann. Hierbei muss

$$\Delta t \ll \frac{\hbar}{2\Delta E}, \quad (1)$$

sein, so dass die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^*\psi$ der Wellenfunktion ψ (welche diesen Zustand der Energie $\langle E \rangle + \Delta E$ beschreibt) konstant (stationär, also von der Zeit unabhängig) ist. Damit ist es beispielsweise möglich, dass aus dem Vakuum heraus ein virtuelles Teilchen entsteht, dass sich nach der Zeit $\Delta t \sim \hbar/(2\Delta E)$ wieder vernichtet. (Man spricht dabei von Vakuumfluktuationen.) Der klassische Energieerhaltungssatz ist also für einen sehr kurzen Zeitraum Δt verletzt, denn das Vakuum hat $\langle E \rangle = 0$.

Die Lebensdauer τ der Teilchen ist damit gegeben durch $\Delta W \cdot \tau = \hbar/2$ und somit folgt:

$$\tau = \frac{\hbar}{2\Delta W} = \frac{\hbar}{4\gamma(v)mc^2}, \quad \gamma(v) = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}. \quad (2)$$

Mit $v = 0$ ist die Lebensdauer der Teilchen maximal. Die Teilchen stehen dann jedoch still und legen keine Weglänge zurück. Die Weglänge

$$\Delta x = \tau v = \frac{\hbar v}{4\gamma(v)mc^2} = \frac{\hbar}{4mc^2} v \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}, \quad (3)$$

maximal werden, also die erste Ableitung verschwinden:

$$\frac{d(\Delta x)}{dv} = \frac{\hbar}{4mc^2} \left(1 - 2\frac{v^2}{c^2}\right) \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (4)$$

Dies ist der Fall für $v = c/\sqrt{2}$.

Aufgabe 2

Hier kann man in zwei Schritten argumentieren:

- Das 1s-Orbital des Heliumatoms (Edelgas!) ist voll besetzt mit zwei Elektronen, die entgegengesetzte Spineinstellung haben. Zwei solcher Orbitale können also nicht überlappen, um darin weitere Elektronen unterzubringen, weil dies dem Pauliprinzip widersprechen würde.
- Es wäre höchstens möglich, dass zwei der vier Elektronen in den nächst höheren Energiezustand wechseln. Dabei handelt es sich jedoch um ein antibindendes Orbital. Der bindende Effekt zweier Elektronen hebt sich dann mit dem antibindenden Effekt der anderen beiden Elektronen auf. Letzterer zieht die beiden Atome wieder auseinander.

Aufgabe 3

Man bildet durch Linearkombination der Wasserstoffwellenfunktionen gleicher Energie neue Wellenfunktionen. In der Sprache der Molekülphysik sagt man, dass durch Hybridisierung neue Orbitale geformt werden (LCAO: Linear Combination of Atomic Orbitals). Prinzipiell werden jedoch nicht die Orbitale linearkombiniert (weil diese ja bereits die Betragsquadrate der Wellenfunktionen sind, es sich also um Aufenthaltswahrscheinlichkeitsräume handelt), sondern die Wellenfunktionen.

- sp^3 -Hybridisierung: Linearkombination der $|2, 0, 0\rangle$ -, $|2, 1, -1\rangle$ -, $|2, 1, 0\rangle$ - und $|2, 1, 1\rangle$ -Zustände (geschrieben als $|n, l, m\rangle$). Chemiker sprechen dann immer von der Hybridisierung der s -, p_x -, p_y - und p_z -Orbitale. Dadurch entstehen vier neue Orbitale und damit sind vier Bindungen möglich. Ein Beispiel dafür ist CH_4 .
- sp^2 -Hybridisierung: Hybridisierung der s -, p_x -, p_y -Orbitale. Beispiel: $H_2 - C = C - H_2$.
- sp -Hybridisierung: Hybridisierung von s - und p_z -Orbitale. Beispiel: $HC \equiv CH$

Hier ist ein Beispiel für die Linearkombination von $|2, 0, 0\rangle$ -, $|2, 1, -1\rangle$ -, $|2, 1, 0\rangle$ - und $|2, 1, 1\rangle$ -Zuständen (in Abhängigkeit von ϑ , φ -Abhängigkeit unterdrückt) skizziert:

