

3. Übungsblatt (zu bearbeiten bis 07.05.2007)

10. Welche der Funktionen (a) bis (e) sind Eigenfunktionen der Operatoren  $\frac{\partial}{\partial x}$  bzw.  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$  ?

Wie lautet jeweils der zugehörige Eigenwert?

(a)  $e^{ikx}$ , (b)  $\cos kx$ , (c)  $k$ , (d)  $kx$ , (e)  $e^{-ax^2}$  ( $k, a$  sind reelle Zahlen).

11. Wirken zwei Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  nacheinander auf eine Funktion  $f$ , so wird das durch die Schreibweise  $\hat{A}\hat{B}f$  ausgedrückt. Es ist wichtig, die Operationen in der richtigen Reihenfolge auszuführen, und zwar wendet man zuerst den Operator an, der der Funktion am nächsten steht:  $\hat{A}\hat{B}f = \hat{A}(\hat{B}f)$ .

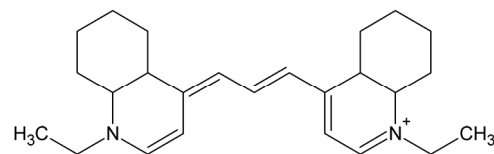
Wenden Sie die Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  aus der Tabelle nacheinander auf die Funktionen  $f$  an und vergleichen Sie die Ergebnisse. In welchen Fällen gilt  $\hat{A}\hat{B}f \neq \hat{B}\hat{A}f$  ?

	$\hat{A}$	$\hat{B}$	$f$
(a)	$\frac{\partial}{\partial x}$	$x$	$xe^{-ax^2}$
(b)	$x$	$\frac{\partial}{\partial x}$	$xe^{-ax^2}$
(c)	$y\frac{\partial}{\partial x}$	$x\frac{\partial}{\partial y}$	$e^{-a(x^2+y^2)}$

12. Wenden Sie den Operator  $\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r}$  auf die Funktion  $f(r) = Ae^{-br}$  an. Welche Werte müssen  $A$  und  $b$  haben, damit  $f(r)$  eine Eigenfunktion des Operators ist? Beachten Sie die Rechenregel aus Aufgabe 11 sowie das Distributivgesetz  $(\hat{A} + \hat{B})f = \hat{A}f + \hat{B}f$ .

13. Auf Systeme konjugierter Doppelbindungen in organischen Farbstoffmolekülen lässt sich näherungsweise das Modell des Elektrons im eindimensionalen Kastenpotential anwenden (H. Kuhn, Helv. Chim. Acta 31 (1948) 1441).

a) Berechnen Sie nach diesem Modell die Energiedifferenzen zwischen dem höchsten besetzten (HOMO) und dem niedrigsten unbesetzten Energieniveau (LUMO) bei dem abgebildeten Cyanin-Farbstoff, dessen konjugiertes System sich über eine Länge von 1.668 nm erstreckt. Beachten Sie dabei, dass jedes Energieniveau mit zwei Elektronen besetzt wird und berücksichtigen Sie nur die am konjugierten System beteiligten 12 Elektronen.



b) Der Farbstoff kann Licht absorbieren, wobei ein Elektron aus dem HOMO in das LUMO angeregt wird. Welcher Lichtwellenlänge entspricht die berechnete Differenz der Energieniveaus? Vergleichen Sie mit dem experimentellen Wert für die Lage des Absorptionsmaximums von  $\lambda_{\text{exp}} = 710 \text{ nm}$  und schätzen Sie die Farbe des Stoffes ab!