

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I: Teil 1, Quantenmechanik (Modul A8)

Blatt 5

Aufgabe 12: *Teilchen im Kasten.*

In grober Näherung kann man ein π -Elektron in einem linearen Polyen als Teilchen im Kasten ansehen. Das Polyen β -Carotin besitzt 22 konjugierte C-Atome mit einer mittleren Bindungslänge von $R_0 = 140$ pm. Jeder Zustand bis $n = 11$ ist mit zwei Elektronen besetzt. Man berechne

1. den Energieabstand zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand, in dem ein Elektron das Niveau $n = 12$ besetzt;
2. die Frequenz der Strahlung, die man benötigt, um zwischen diesen beiden Zuständen einen Übergang zu bewirken.
3. Führen Sie die gleiche Analyse für Butadien durch (4 C-Atome, 4 π -Elektronen, Annahme desselben R_0).

Aufgabe 13: *Erwartungswerte und Unschärfen.*

1. Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle \hat{p} \rangle$ und $\langle \hat{p}^2 \rangle$, sowie $\langle \hat{x} \rangle$ und $\langle \hat{x}^2 \rangle$ für ein Teilchen im Zustand $n = 2$ in einem eindimensionalen Kasten der Länge L .
2. Berechnen Sie $\Delta x \cdot \Delta p$ mit den Unschärfen

$$\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2} \quad (1)$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2} \quad (2)$$

Aufgabe 14: *Wellenfunktion.*

1. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, mit der sich ein Teilchen in einem Kasten der Kantenlänge L zwischen $0.49L$ und $0.51L$ befindet, für $n = 1$ und $n = 2$. Die Wellenfunktion sei näherungsweise in diesem Bereich als konstant anzusehen.
2. Was sind die wahrscheinlichsten Aufenthaltsorte für ein Teilchen im Kasten der Länge L im Zustand $n = 5$?
3. Die Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators ist

$$\psi_0 = N \exp \left[-x^2 / (2\sqrt{\hbar^2 / \mu D}) \right] \quad (3)$$

(μ = reduzierte Masse, D = Federkonstante). Bestimmen Sie den Vorfaktor N so, dass die Wellenfunktion auf 1 normiert ist.