Universität Potsdam
Theoretische Chemie
Prof. Dr. Saalfrank

SoSe 2019

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie für LA Chemie (Modul VM11)

Blatt 2

Aufgabe 5: *Kräfte und Wechselwirkungen.*

(a) Berechnen Sie (i) die Kraft und (ii) das Wechselwirkungspotential zwischen einem Elektron und einem Proton, die sich im Abstand $r = 0.529 \cdot 10^{-10}$ m voneinander befinden. Verwenden Sie SI-Einheiten.

(b) Geben Sie das Wechselwirkungspotential aus (a) auch in eV, kJ/mol und in Hartree (1 Hartree = 27.2114 eV) an.

(c) Berechnen Sie das Verhältnis der Coulombkraft aus (a) zur entsprechenden Gravitationskraft, die zwischen Elektron und Proton herrscht. Wie hängt dieses Verhältnis vom Abstand r ab?

Aufgabe 6: *Schwingungen.*

In der Vorlesung bzw. in Aufgabe 4 in Übungsblatt 1 wurde gezeigt / erwähnt, dass für den harmonischen Oszillator (Masse m, Kreisfrequenz ω, Federkonstante D mit den Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} x(t=0) &= x_0 \\ p(t=0) &= 0 \end{aligned}$$

die folgenden Bewegungsgleichungen gelten:

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t) \tag{1}$$
$$p(t) = -m\, x_0\, \omega \sin(\omega t) \quad . \tag{2}$$

(a) Berechnen Sie ω für den Fall $D = 1$ kg/s^2, $m = 1$ g.

(b) Zeigen Sie, dass für den obigen harmonischen Oszillator die Energieerhaltung gilt. (Berechnen Sie $E = p^2/2m + V(x)$ als Funktion der Zeit, und zeigen Sie, dass E konstant ist.)

Aufgabe 7: *Wellen.*

(a) Eine (transversale) Welle habe die Wellenlänge $\lambda = 1$ cm und die Schwingungsfrequenz $\nu = 5$ Hz (1 Hz=1 s^{-1}). Berechnen Sie daraus: c (Ausbreitungsgeschwindigkeit), k (Wellenzahl), T (Schwingungsperiode), ω (Kreisfrequenz).

(b) Zeigen Sie durch explizites Nachrechnen, dass die Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = 0 \tag{3}$$

durch

$$
\begin{aligned}
y(t) &= y_0 \cos(kx - \omega t) \quad \text{rechtslaufende Welle} && (4)\\
y(t) &= y_0 \cos(kx + \omega t) \quad \text{linkslaufende Welle} && (5)\\
y(t) &= y_0 \cos(\omega t) \cos(kx) \quad \text{stehende Welle} && (6)
\end{aligned}
$$

gelöst wird.