

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

Blatt 5

Aufgabe 14: *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 Hexatrien durch (6 C-Atome, 6 π -Elektronen, Annahme desselben R_0).

Aufgabe 15: *Wellenfunktion.*

1. Wofür verwendet man Normierungsfaktoren für Wellenfunktionen? Wie wird dieser Normierungsfaktor gewählt?
2. An welchen Stellen hat die Wellenfunktion $\psi_3(x)$ des Teilchens im Kasten Knoten?
3. 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.
4. Was sind die wahrscheinlichsten Aufenthaltsorte für ein Teilchen im Kasten der Länge L im Zustand $n = 5$?

Aufgabe 16: *Unschärfen.*

Im Skript wurden Ausdrücke für die Unschärfen Δx und Δp eines Teilchens im Kasten, im Zustand n (Wellenfunktion $\psi_n(x)$) gegeben (siehe S.37).

1. Wie groß sind Δx und Δp im Zustand $n = 3$, für einen Kasten der Länge 1 nm?
2. Berechnen Sie das zugehörige Unschärfenprodukt $\Delta x \Delta p$.