Übungen zur Vorlesung
Physikalische Chemie II

Übungsleiter: Tanja Asthalter · Zimmer 9–356 · Tel. 4464 · e-mail t.asthalter@ipc.uni-stuttgart.de

Lösungsblatt 24 **31. 1. 2006**

Lösung zu Aufgabe 24.1

a) Da ψ reell ist, lautet die Normierungsbedingung:

$$
\begin{aligned}
1 \overset{!}{=} \psi_0^2(x)\mathrm{d}x &= N_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}x^2}\mathrm{d}x \\
&= N_0^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}}
\end{aligned}
$$

$$\Rightarrow N_0^2 = \sqrt{\frac{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}{\pi}}$$

$$\underline{\underline{N_0 = \left(\frac{\sqrt{k\mu}}{\pi\hbar}\right)^{1/4}}}$$

$$
\begin{aligned}
1 \overset{!}{=} \psi_1^2(x)\mathrm{d}x &= N_1^2 \cdot 4\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} x^2\mathrm{e}^{-\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}x^2}\mathrm{d}x \\
&= N_1^2 \cdot 4\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}} \cdot \frac{1}{2\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}
\end{aligned}
$$

$$\Rightarrow N_1^2 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}{\pi}}$$

$$\underline{\underline{N_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\sqrt{k\mu}}{\pi\hbar}\right)^{1/4}}}$$

b) Potentielle Energie für $v = 0$:

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 \psi_0^2(x) \mathrm{d}x &= N_0^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 \mathrm{e}^{-\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} x^2} \mathrm{d}x \\
&= N_0^2 \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}} \frac{1}{2 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} \\
&= \sqrt{\frac{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}{\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}} \frac{1}{2 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} \\
&= \frac{1}{2 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle V \rangle = \frac{k}{2} \langle x^2 \rangle = \frac{k}{4 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} = \frac{\hbar}{4} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Potentielle Energie für $v = 1$:

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= N_1^2 \cdot 4 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^4 \mathrm{e}^{-\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} x^2} \mathrm{d}x \\
&= N_1^2 \cdot 4 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}} \frac{3}{4 \left(\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} \right)^2} \\
&= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}{\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}} \cdot \frac{3}{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} \\
&= \frac{3}{2 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle V \rangle = \frac{k}{2} \langle x^2 \rangle = \frac{3k}{4 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} = \frac{3\hbar}{4} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

c)

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \psi_0(x) = N_0 N_1 \cdot 2 \sqrt{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} x \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} x^2} \mathrm{d}x$$

Der Term x ist ungerade, der Gauß-Term gerade, der Integrand also ungerade und das Integral über den gesamten Raum damit Null.

Lösung zu Aufgabe 24.2

a) Reduzierte Masse:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Für $m_1 = m_2 = m_H = 1,67367 \cdot 10^{-27}\,\mathrm{kg}$ gilt: $\underline{\underline{\mu = 8,36835 \cdot 10^{-28}\,\mathrm{kg}}}$.
Wellenzahl: $\tilde{\nu} = 4160 \cdot (0,01\,\mathrm{m})^{-1}$
Wegen $\omega = 2\pi/T$ (T = Periodendauer der Schwingung) und $\tilde{\nu} = 1/T$ gilt:
$\omega = \tilde{\nu} \cdot 2\pi c_0 = 7,836 \cdot 10^{14}\,\mathrm{s}^{-1}$
$\underline{\underline{k = \mu\omega^2 = 513,84\,\mathrm{N/m}}}$

b) $\mu(D_2) = 2\,\mu(H_2)$
Die Wellenzahl nimmt wegen $\omega \sim 1/\sqrt{\mu}$ um den Faktor $\sqrt{2}$ ab, also auf $\underline{\underline{2941,6\,\mathrm{cm}^{-1}}}$.

Lösung zu Aufgabe 24.3

$$\Delta x \cdot \Delta p = \sqrt{(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2) \cdot (\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2)}$$

Daher zunächst die vier benötigten Erwartungswerte:

$$\langle x \rangle = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} x\mathrm{e}^{-2\alpha x^2}\mathrm{d}x = 0$$

Grund: Integrand ist ungerade (x ist ungerade, die Gaußfunktion gerade).

$$\langle p \rangle = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}(-2\alpha x)\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x = 0$$

Gleicher Grund!

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}x^2\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x \\
&= \frac{2\alpha}{\pi}^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{4\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \\
&= \frac{1}{4\alpha}
\end{aligned}$$

Für $\langle p^2 \rangle$ machen wir zunächst eine Nebenrechnung für die 2. Ableitung:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{\partial}{\partial x}(-2\alpha x\mathrm{e}^{-\alpha x^2}) = -2\alpha\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}(\mathrm{e}^{-\alpha x^2} - 2\alpha x^2\mathrm{e}^{-\alpha x^2})$$

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x &= -\hbar^2(-2\alpha)\frac{2\alpha}{\pi}^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}(\mathrm{e}^{-\alpha x^2} - 2\alpha x^2\mathrm{e}^{-\alpha x^2})\mathrm{d}x \\
&= \frac{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\hbar^2\left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha x^2}\mathrm{d}x - 2\alpha\int_{-\infty}^{\infty} x^2\mathrm{e}^{-2\alpha x^2}\mathrm{d}x\right] \\
&= \frac{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\hbar^2\left[\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} - 2\alpha\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \cdot \frac{1}{4\alpha}\right] \\
&= \hbar^2\alpha
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}
\rightarrow \Delta x\Delta p &= \sqrt{\left(\frac{1}{4\alpha} \cdot \hbar^2\alpha\right)} \\
&= \frac{\hbar}{2} \qquad \text{q.e.d.}
\end{aligned}$$