



Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

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

Übungsblatt 24

31. 1. 2006

Aufgabe 24.1

Die Wellenfunktionen des eindimensionalen harmonischen Oszillators lauten

$$\psi_v(x) = N_v H_v(y) e^{-y^2/2} \quad \text{mit} \quad y = \sqrt{\frac{\mu k}{\hbar}} x$$

mit der reduzierten Masse m , der Kraftkonstanten k und den Hermiteischen Polynomen

$$H_0(y) = 1, \quad H_1(y) = 2y, \quad \dots$$

- Bestimmen Sie die Normierungsfaktoren für $v = 0$ und $v = 1$.
- Berechnen Sie den Erwartungswert der potentiellen Energie, $\langle V \rangle = \frac{k}{2} \langle x^2 \rangle$, für $v = 0$ und $v = 1$.
- Zeigen Sie ohne explizite Rechnung, daß $\psi_0(x)$ und $\psi_1(x)$ orthogonal zueinander sind.

Mathematischer Hinweis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \cdot \frac{(2n-1)!!}{(2a)^n}; \quad k!! = \begin{cases} 1 \cdot 3 \cdot 5 \dots k, & k \text{ ungerade} \\ 2 \cdot 4 \cdot 6 \dots k, & k \text{ gerade} \end{cases} \text{ (Doppelfakultät); } (-1)!! = 1$$

Aufgabe 24.2

Die Streckschwingung des H_2 -Moleküls wird im Raman-Spektrum bei einer Wellenzahl von 4160 cm^{-1} beobachtet.

- Berechnen Sie die reduzierte Masse und die Kraftkonstante der Bindung.
- Wie ändert sich die Wellenzahl bei schwerem Wasserstoff D_2 , wenn die Stärke der Bindung in erster Näherung gleich bleibt?

Aufgabe 24.3

Die Grundzustands-Wellenfunktion des harmonischen Oszillators in einer Dimension kann geschrieben werden als

$$\psi_0 = \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\alpha x^2} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{\sqrt{\mu k}}{2\hbar}.$$

Für das Quadrat der Varianz (Standardabweichung) einer physikalischen Größe x kann allgemein geschrieben werden:

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2.$$

Zeigen Sie hiermit, daß für den Grundzustand des harmonischen Oszillators die Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta x \cdot \Delta p = \sqrt{\sigma_x^2} \cdot \sqrt{\sigma_p^2} \geq \frac{\hbar}{2}$$

mit dem Gleichheitszeichen erfüllt ist.

Hinweis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \cdot \frac{(2n-1)!!}{(2a)^n}$$

Die Übungen sind im PDF-Format erhältlich unter <http://www.ipc.uni-stuttgart.de/~tanja/pcuebungen.html>.