



Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

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

Lösungsblatt 25

18. 1. 2005

Lösung zu Aufgabe 25.1

a) Da ψ reell ist, lautet die Normierungsbedingung:

$$\begin{aligned}1 &\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2(x) dx = N_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} x^2} dx \\&= N_0^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}} \\&\Rightarrow N_0^2 = \sqrt{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} \\&\underline{\underline{N_0 = \left(\frac{\sqrt{k\mu}}{\pi \hbar} \right)^{1/4}}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}1 &\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^2(x) dx = N_1^2 \cdot 4 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} x^2} dx \\&= N_1^2 \cdot 4 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}} \cdot \frac{1}{2 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} \\&\Rightarrow N_1^2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} \\&\underline{\underline{N_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\sqrt{k\mu}}{\pi \hbar} \right)^{1/4}}}\end{aligned}$$

b) Potentielle Energie für $v = 0$:

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \psi_0^2(x) dx = N_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} x^2} dx \\
 &= N_0^2 \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}} \frac{1}{2 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} \\
 &= \sqrt{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}}} \frac{1}{2 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} \\
 &= \frac{1}{2 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} \\
 &\Rightarrow \langle V \rangle = \frac{k}{2} \langle x^2 \rangle = \frac{k}{4 \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar}} = \frac{\hbar}{4} \sqrt{\frac{k}{\mu}}
 \end{aligned}$$

Potentielle Energie für $v = 1$:

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

c)

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

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 25.2

a) Reduzierte Masse:

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

Für $m_1 = m_2 = m_H = 1,67367 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ gilt: $\mu = 8,36835 \cdot 10^{-28} \text{ kg}$.

Wellenzahl: $\tilde{\nu} = 4160 \cdot (0,01 \text{ m})^{-1}$

Wegen $\omega = 2\pi/T$ (T = Periodendauer der Schwingung) und $\tilde{\nu} = 1/T$ gilt:

$$\omega = \tilde{\nu} \cdot 2\pi c_0 = 7,836 \cdot 10^{-14} \text{ s}^{-1}$$

$$\underline{\underline{k = \mu \omega^2 = 513,84 \text{ N/m}}}$$

b) $\mu(\text{D}_2) = 2 \mu(\text{H}_2)$

Die Wellenzahl nimmt wegen $\omega \sim 1/\mu$ um den Faktor $\sqrt{2}$ ab, also auf $2941,6 \text{ cm}^{-1}$.

Lösung zu Aufgabe 25.3

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

Daher zunächst die vier benötigten Erwartungswerte:

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

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

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

Gleicher Grund!

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

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

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

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

Damit ergibt sich

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