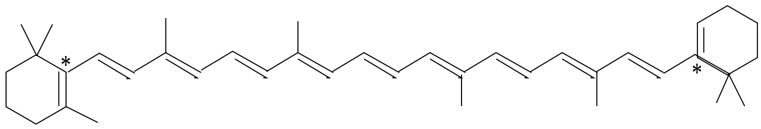
Übungen zur Vorlesung
Physikalische Chemie II

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

Übungsblatt 23 — 22. 1. 2004

Aufgabe 23.1

Die UV-Absorptionsbanden von konjugierten Polyenen lassen sich in recht guter Näherung durch das Modell eines Teilchens in einem eindimensionalen Kasten beschreiben. Die π-Elektronen des Moleküls lassen sich hierbei wie eine Ansammlung von unabhängigen Teilchen in diesem Kasten behandeln, ihre Wellenfunktionen sind diejenigen des Kastenpotentials. Diese Näherung nennt man die *F*reie-*E*lektronen-*M*olekül- *O*rbital-Näherung (FEMO-Näherung). Als Beispiel möge β-Carotin dienen, das u.a. für die Gelbfärbung von Karotten oder (nach dem Abbau des Chlorophylls) des herbstlichen Laubs (mit-)verantwortlich ist:



a) Berechnen Sie die Kastenlänge für dieses Molekül, wenn der C–C-Abstand 1,4 Å beträgt. Das Elektron bewege sich annähernd längs der Verbindungslinie der beiden mit einem * markierten C-Atome, und der C-C-C-Bindungswinkel betrage 120°.

b) Berechnen Sie den Erwartungswert des Impulses für das energetisch tiefste Orbital $n = 1$.
Mathematischer Hinweis:
$$\int \sin(ax)\cos(ax)\mathrm{d}x = \frac{1}{2a}\sin^2(ax)$$

c) Wie groß sind Impuls- und Geschwindigkeitsunschärfe der Elektronen in diesem Orbital?

d) Zeigen Sie, daß die Wellenfunktionen für $n = 1$ und $n = 2$ orthogonal zueinander sind.
Mathematischer Hinweis:
$$\int \sin(ax)\sin(2ax)\mathrm{d}x = \frac{\sin(ax)}{2a} - \frac{\sin(3ax)}{6a}$$

e) Berechnen Sie die Wellenlänge der UV-Absorption. *Hinweis:* Carotin besitzt 22 π-Elektronen (überprüfen Sie dies anhand der obigen Strukturformel!), die in die Zustände der Quantenzahl $n = 1, 2, \ldots 11$ einzufüllen sind. Bei der Absorption wird ein Elektron vom obersten besetzten in das unterste unbesetzte Niveau angehoben.

Aufgabe 23.2

a) Der Erwartungswert einer Größe O wird allgemein durch
$$\langle O \rangle = \frac{\int \varphi^* \hat{O} \varphi \,\mathrm{d}\tau}{\int \varphi^* \varphi \,\mathrm{d}\tau}$$
beschrieben. Wie groß ist der mittlere Impuls des Teilchens, das durch die folgenden Wellenfunktionen beschrieben wird:

1) e^{ikx}
2) $\cos(kx)$
3) e^{-ax^2}

jeweils im Bereich $-\infty \leq x \leq \infty$?

bitte wenden

b) Nach der klassischen Theorie sind die Komponenten des Drehimpulses

$$\begin{aligned} l_x &= yp_z - zp_y \\ l_y &= zp_x - xp_z \\ l_z &= xp_y - yp_x \end{aligned}$$

Formulieren Sie damit die korrespondierenden Operatoren. Zeigen Sie, daß

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_z$$

gilt. Kann man l_x und l_y gleichzeitig messen?

Aufgabe 23.3

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

$$\psi_0 = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \ .$$

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

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

mit dem Gleichheitszeichen erfüllt ist.

Hinweis:

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

$$(2n-1)!! = 1 \cdot 3 \cdot \ldots \cdot (2n-1) \quad \text{(sog. Doppelfakultät)}$$

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