

# Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

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

## Übungsblatt 24

11. 1. 2005

### Aufgabe 24.1

- Stellen Sie die Schrödingergleichung für ein Elektron auf, das sich in einer Dimension frei bewegen kann, d.h.  $V(x) = 0$ .
- Lösen Sie diese mit Hilfe des Ansatzes

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

und geben Sie die Eigenwerte von Energie und Impuls an.

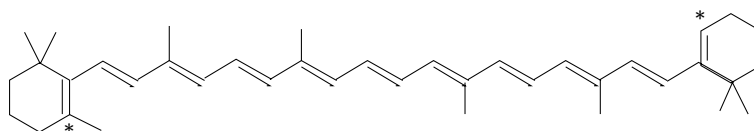
### Aufgabe 24.2

Ein Teilchen sei auf den Bereich  $0 \leq x \leq a$ ,  $0 \leq y \leq b$  beschränkt, in dem das Potential konstant sei,  $V = 0$ . Außerhalb dieses Bereiches sei das Potential unendlich groß (Teilchen im 2-dimensionalen Kasten).

- Geben Sie den Hamilton-Operator  $\hat{H}$  für dieses Problem an.
- Führen Sie die Separation der Variablen in der Schrödinger-Gleichung  $\hat{H}\psi = E\psi$  mit dem Ansatz  $\psi(x, y) = \psi_1(x)\psi_2(y)$  durch.
- Lösen Sie die separierten Gleichungen unter Beachtung der Randbedingungen analog zum eindimensionalen Fall.
- Wie lauten die möglichen Energieeigenwerte  $E$  und die zugehörigen normierten Eigenfunktionen  $\psi(x, y)$ ? Zeichnen Sie für  $a = b$  das Energietermschema und geben Sie die Entartungen an.
- Skizzieren Sie die Eigenfunktionen mit maximal drei Knotenlinien.

### Aufgabe 24.3

Die UV-Absorptionsbanden von konjugierten Polyenen lassen sich in recht guter Näherung durch das Modell eines Teilchens in einem eindimensionalen Kasten beschreiben. Die  $\pi$ -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 *Freie-Elektronen-Molekül-Orbital-Näherung* (FEMO-Näherung). Als Beispiel möge  $\beta$ -Carotin dienen, das u.a. für die Gelbfärbung von Karotten oder (nach dem Abbau des Chlorophylls) des herbstlichen Laubs (mit-)verantwortlich ist:



- Berechnen Sie die Kastenlänge für dieses Molekül, wenn der C-C-Abstand  $1,4 \text{ \AA}$  beträgt. Das Elektron bewege sich annähernd längs der Verbindungslinie der beiden mit einem \* markierten C-Atome, und der C-C-C-Bindungswinkel betrage  $120^\circ$ .
- Berechnen Sie den Erwartungswert des Impulses für das energetisch tiefste Orbital  $n = 1$ .  
*Mathematischer Hinweis:*

$$\int \sin(ax) \cos(ax) dx = \frac{1}{2a} \sin^2(ax)$$

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

bitte wenden !!!

- d) Zeigen Sie, daß die Wellenfunktionen für  $n = 1$  und  $n = 2$  orthogonal zueinander sind.  
*Mathematischer Hinweis:*

$$\int \sin(ax) \sin(2ax) dx = \frac{\sin(ax)}{2a} - \frac{\sin(3ax)}{6a}$$

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

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