

Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

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

Übungsblatt 23

24. 1. 2006

Aufgabe 23.1

- 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.

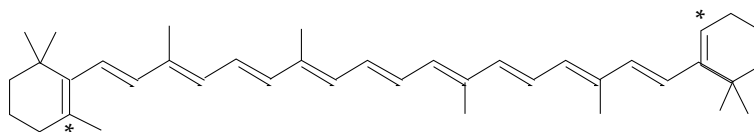
Aufgabe 23.2

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 $\hat{\mathcal{H}}$ für dieses Problem an.
- Führen Sie die Separation der Variablen in der Schrödinger-Gleichung $\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi$ 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 23.3

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 *Freie-Elektronen-Molekül-Orbital-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:



- 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° .
- 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 π -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> .