Prof. Dr. M. Olzmann
Johannes Kiecherer, Isabelle Weber
Institut für Physikalische Chemie

Einführung in die Physikalische Chemie, Mathematische Methoden (B) SS 14

Blatt 9

Aufgabe 30

Die Bewegung der π -Elektronen in einem konjugierten System kann man sehr stark vereinfacht als Bewegung in einem Kastenpotential beschreiben.

Berechnen Sie die ersten 3 Energieniveaus eines π -Elektrons im 1,3-Butadien (Kastenlänge = 3 x mittlere C-C-Bindungslänge von 140 pm + 2 x $\frac{1}{2}$ Bindungslänge am 1. und 4. C-Atom = 560 pm).

Verteilen Sie die 4 Elektronen auf die 3 Niveaus (Achtung: Pauli-Prinzip).

Durch Absorption von Licht passender Wellenlänge kann ein Elektron in ein höheres Niveau angeregt werden (Grundlage vieler spektroskopischer Methoden). Berechnen Sie die Wellenlänge, die benötigt wird, um ein Elektron vom Grundzustand in den ersten angeregten Zustand anzuregen. (Experimenteller Wert: Absorptionsbande um 217 nm).

Aufgabe 31

Wie groß ist der mittlere Impuls eines Teilchens, das durch die Wellenfunktion $N \cdot \exp(ikx)$ bzw. $N \cdot \cos(kx)$ beschrieben wird? (Die Variable x variiert jeweils von $-\infty$ bis $+\infty$.)

Hinweis: Leiten Sie aus der Definition der Normierungsbedingung einen abstrakten Ausdruck für die Normierungskonstante N ab und verwenden Sie diesen zur Berechnung des mittleren Impulses.

Aufgabe 32

Die Wellenfunktion eines Teilchens im eindimensionalen Potentialkasten der Länge L ist gegeben durch:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad \text{für } 0 \leq x \leq L; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Berechnen Sie die quantenmechanische Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich ein Teilchen

- a) im mittleren Drittel
- b) im rechten Drittel
- c) bei $x = \frac{1}{2}L$ aufhält.

Zeigen Sie, dass die Wahrscheinlichkeiten aus den Aufgabenteilen a) und b) für wachsende Quantenzahlen n gleich werden.

Organisatorisches:

Das Tutorium von Dennis Gratzfeld findet am **Montag, den 16.04.2014**, einmalig um **14:00 Uhr** im **SR 406 (Geb. 30.44)** statt.