

Übungsblatt 10 zur PC II, WS 2001/2002

Ausgabe 7.01.2002, Abgabetermin 14.1.2002

1. Die Wellenfunktion eines Teilchens in einem 3-dimensionalen Kasten mit den Kantenlängen $(1/a, 1/b, 1/c)$ sei gegeben durch $\Psi(x,y,z) = \cos(ax) \cdot \cos(by) \cdot \cos(cz)$. Zeigen Sie, dass Ψ eine Eigenfunktion von dem ∇^2 -Operator ist und berechnen Sie den Eigenwert der kinetischen Energie.

(1 Punkt)

2. Die potentielle Energie eines schwingenden zweiatomigen Moleküls ist gegeben durch $V = \frac{1}{2}kx^2$, wobei k die Kraftkonstante der Bindung und x die Auslenkung aus dem Gleichgewichtsabstand der beiden Kerne ist. Die kinetische Energie der Schwingung kann durch den Ausdruck $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ beschrieben werden (wobei μ , die reduzierte Masse des Moleküls, gegeben ist durch: $\mu = \frac{M_1 \cdot M_2}{M_1 + M_2}$).

Schreiben Sie die Schrödinger-Gleichung für die Schwingung des Moleküls hin und zeigen Sie, dass die beiden Wellenfunktionen:

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\alpha\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}, \quad \Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\alpha\sqrt{\pi}}} \cdot 2 \frac{x}{\alpha} \cdot e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} \quad \text{mit} \quad \left(\alpha = \left(\frac{\hbar^2}{\mu k}\right)^{1/4}\right)$$

Eigenfunktionen des Hamilton-Operators sind.

Geben Sie jeweils den Schwingungsenergiewert zu beiden Wellenfunktionen an.

(1 Punkt)

3. Die Wellenlänge des von einem HCl Molekül absorbierten Infrarotlichtes wurde experimentell bestimmt und beträgt $\lambda = 3.344 \mu\text{m}$. Absorption von Infrarotlicht entsteht durch Übergänge des Moleküls zwischen unterschiedlichen Schwingungseigenzuständen, wobei sich die Quantenzahl n der Schwingung ($n = 0, 1, 2, \dots$) um $+1$ ändert. Die Eigenenergien der quantenmechanischen Schwingungszustände sind gegeben durch:

$$E_n = \hbar \sqrt{\frac{k}{\mu}} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

wobei k und μ in der Aufgabe 2) definiert sind. Berechnen Sie die Kraftkonstante k der Bindung von HCl.

(1 Punkt)

4. Zwei (unnormierte) Wellenfunktionen für angeregte Zustände des H - Atoms lauten:

a) $\Psi = \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$ und

b) $\Psi = r \sin \theta \cos \phi e^{-r/2a_0}$

Normieren Sie beide Funktionen.

(1 Punkt)