Seminar zur Vorlesung Physikalische Chemie II

Wintersemester 2015/2016

Prof. Dr. Timo Jacob, Institut für Elektrochemie

Übungsblatt 04, Aufgaben 15-18

Seminarwoche 9.-12. November 2015

Aufgabe 15 – Teilchen im 3dim Kasten, Entartung

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m im 3-dimensionalen Kasten mit unendlich hohen Wänden, d.h.

$$V_0 = \begin{cases} 0 \textit{ für } 0 \le x \le a \\ 0 \textit{ für } 0 \le y \le b \\ 0 \textit{ für } 0 \le z \le c \\ \infty \textit{ sonst} \end{cases}$$

a) Stellen Sie die Schrödinger-Gleichung für den physikalisch sinnvollen Bereich auf.

b) Separieren Sie die Schrödinger-Gleichung.

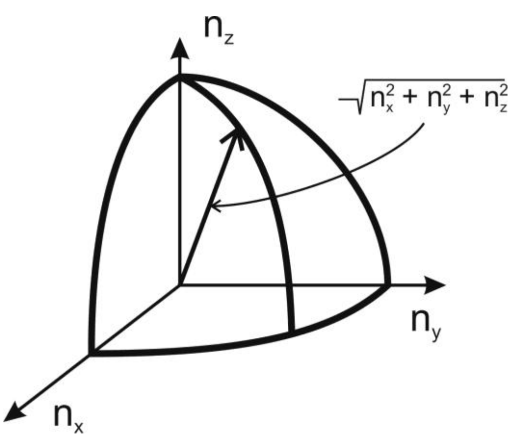
c) Geben Sie die Eigenfunktionen und die Energieeigenwerte an.

d) Bestimmen Sie den Entartungsgrad für die 4 niedrigsten Energieniveaus, wenn $a = b = c$.

e) Ein N_2-Molekül befindet sich in einem Würfel mit V = 24,8 L.

Wie viele Zustände existieren bei 25°C für Energien kleiner $E = \frac{3}{2} k_B T$?

Hinweis: Bestimmen Sie dazu das Volumen des untenstehenden Kugelausschnittes.



Aufgabe 16 – Teilchen im Topf

Ein Teilchen der Masse *m* befinde sich in folgendem Potential:

$$V(r) = \begin{cases} \infty \text{ } für \text{ } r < 0 \\ V_0 \text{ } für \text{ } 0 \le r \le a \\ 0 \text{ } für \text{ } r > a \end{cases}$$

mit V_0 < 0, d.h. V_0 ist negativ!!!

a) Zeichnen Sie den Potentialverlauf.

b) Skizzieren Sie ohne zu rechnen die stationären Lösungen (Eigenfunktionen und Energieniveaus) der Schrödinger-Gleichung für die 3 niedrigsten gebundenen Zustände. Achten Sie dabei auf die Randbedingungen und die Abstände der Energieniveaus.

c) Leiten Sie die Gleichung ab, welche die Energieeigenwerte für gebundene Zustände bestimmt, d.h. für $V_0 < E < 0$.

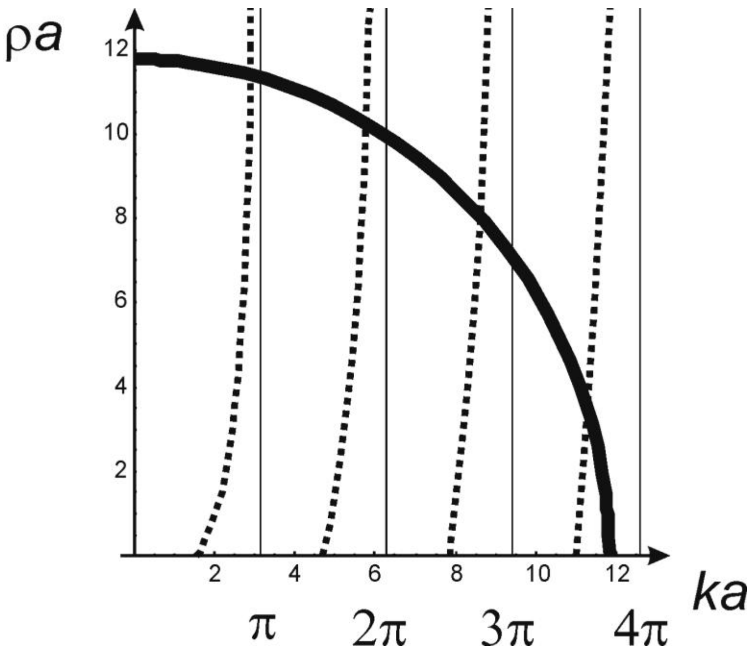
Gehen Sie dabei wie folgt vor:

(i) Geben Sie für die verschiedenen Potentialbereiche die Schrödinger-Gleichung und Lösungsansätze für die Eigenfunktionen an.

Benutzen Sie dazu die Abkürzungen $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$ und $\rho^2 = \frac{-2m}{\hbar^2}E$.

(ii) Geben Sie die erforderlichen Randbedingungen an und lösen das erhaltene Gleichungssystem, um die (nicht exakt lösbare) Gleichung für die erlaubten Energieniveaus zu erhalten.

d) In der Graphik sind die Gleichungen $\rho a = -ka \cot(ka)$ gestrichelt und $(ka)^2 + (\rho a)^2 = \frac{-2ma^2V_0}{\hbar^2}$ als Kreissegment aufgetragen.



(i) Geben Sie für diesen Fall die Anzahl gebundener Zustände an.

ii) Wie tief muss dieser Potentialtopf mindestens sein, damit gerade ein gebundener Zustand vorliegt?

iii) Vergleichen Sie die Ergebnisse mit dem Teilchen im Kasten.

iv) Nennen Sie ein verwandtes Potential V(r) und dessen Anwendung in der Chemie.

v) Skizzieren Sie Energieniveaus und Wellenfunktionen für ein Teilchen im Topf.

Aufgabe 17 – Tunneleffekt

Die Teilchenstrom-Dichte für 1dimensionale Systeme ist folgendermaßen definiert:

$$j(x,t)=\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\nabla\Psi^{*}-\Psi^{*}\nabla\Psi\right)$$

a) Bestimmen Sie die Teilchenstrom-Dichte für

i) $\Psi(x,t)=A\exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(\sqrt{2mE}\,x-E\,t\right)\right)$

ii) $\Psi(x,t)=A\exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(\sqrt{2mE}\,x-E\,t\right)\right)+B\exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(-\sqrt{2mE}\,x-E\,t\right)\right)$

b) Ein Teilchen der Masse m und Energie E nähert sich in positive x-Richtung (von links) einer 1dimensionalen Potentialstufe an der Stelle $x = 0$.

$$V(x)=\begin{cases}0 & \text{für } x<0\\ V_0 & \text{für } 0\le x\end{cases}$$

mit $V_0 > 0$, d.h. V_0 ist positiv!!!

i) Zeichnen Sie den Potentialverlauf.

ii) Der Bereich für $x < 0$ kann für $E < V_0$ durch die stationäre Wellenfunktion $\psi_1(x)=A\exp\left(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)+B\exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$ beschrieben werden. Im anderen Bereich gilt $\psi_2(x)=C\exp\left(\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}x\right)+D\exp\left(-\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}x\right)$.

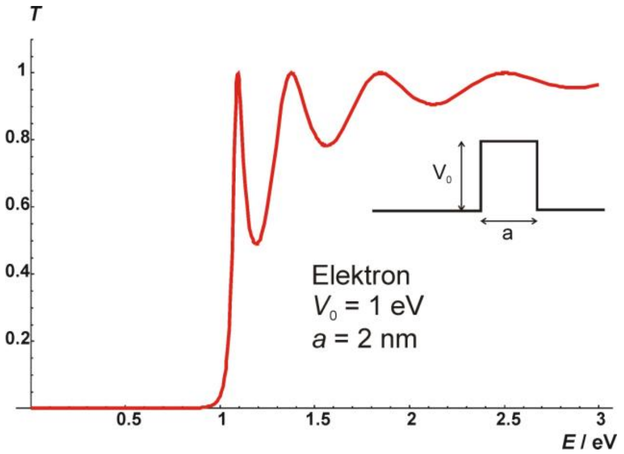
Wie groß ist die Reflexionswahrscheinlichkeit?

iii) Wodurch ist die Wahrscheinlichkeit gegeben, das Teilchen mit $E < V_0$ bei $x > 0$ zu finden?

iv) Wenn $E > V_0$, ist die Reflexionswahrscheinlichkeit $R=\left(\dfrac{\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}-\frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}}{\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}+\frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}}\right)^2$.

Wie groß ist die Transmissionswahrscheinlichkeit T ?

c) Diskutieren Sie folgende Graphik.



Aufgabe 17 – Eigenfunktion, Eigenwert, Normierung, Erwartungswert

Ein bestimmtes quantenmechanisches System sei durch folgenden Hamilton-Operator beschrieben:

$$\hat{H} = \frac{-d^2}{dx^2} + x^2$$

a) Zeigen Sie, dass $u(x) = A\,x \exp\left(\frac{-x^2}{2}\right)$ eine Eigenfunktion von $\hat{H}$ ist und bestimmen Sie den Eigenwert.

b) Normieren Sie die Wellenfunktion. *Hinweis:* $\int_0^\infty x^2 \exp\left(-x^2\right) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4}$

c) Wie groß ist der Erwartungswert für *x* für den stationären Zustand, der durch *u(x)* beschrieben wird. (Versuchen Sie nicht das entsprechende Integral explizit zu lösen!)

Dr. Ludwig Kibler, 3. November 2015, ludwig.kibler@uni-ulm.de