Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I Sommersemester 2017

2. Übungsblatt

26.4.2017

1. (a) Die ersten Linien der Balmer-Serie im Atomspektrum des Wasserstoffs liegen bei λ [nm] = 656.46, 486.27, 434.17, 410.29,.... Berechnen Sie den Wert der Rydberg-Konstante R_H für Wasserstoff.

   (b) Die Ionisierungsenergie I ist die minimale Energie, die gebraucht wird, um ein Elektron zu entfernen. In welcher Beziehung stehen I und R_H? Berechnen Sie zudem den Absolutwert der Ionisierungsenergie für das Wasserstoffatom in der Einheit Elektronenvolt (eV).

2. Vergegenwärtigen Sie sich die Eigenschaften von Wellen:

   (a) Zeichnen Sie dazu einen Wellenzug und geben die passende mathematische Beschreibung inklusive des betrachteten Wertebereichs der Variablen an.

   (b) Erklären Sie die Kenngrößen Amplitude, Frequenz, Wellenlänge und Phase. Wie hängen diese Größen mit der Energie, dem Impuls und der Intensität zusammen?

   (c) Was ist eine stehende Welle? Zeichnen Sie drei energetisch günstigsten stehenden Wellen, die sich zwischen zwei Wänden im festem Abstand d ausbilden können.

   (d) Was versteht man unter einer Schwebung? Was ist ein Wellenpaket?

3. Was ist eine Observable?

Please turn page!!

4. Allgemein gilt: Wenn ein Operator auf eine Funktion angewendet wird, so ist das Ergebnis eine weitere Funktion. In speziellen Fällen ist das Ergebnis wieder die gleiche Funktion, multipliziert mit einer Konstanten a. Es gilt dann

$$\hat{A}f = af$$

wobei f Eigenfunktion des Operators $\hat{A}$, und a Eigenwert des Operators genannt wird. Eine solche Gleichung nennt man *Eigenwertgleichung*.
Sind die folgenden Funktionen Eigenfunktionen des Operators $\frac{d^2}{dx^2}$?
Wenn ja, welches sind die dazugehörigen Eigenwerte?

   (a) $\cos(2x + 4)$
   (b) $\sin(2x + 6)$
   (c) $e^{(2x+4)}$
   (d) $\sin(x^2)$
   (e) Was fällt bei den Ergebnissen auf?

5. Der Erwartungswert eines Operators $\hat{A}$ im Zustand f ist definiert als

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\int f^* \hat{A} f d\tau}{\int f^* f d\tau}$$

Wobei f^* das komplex konjugierte der Funktion f ist und $d\tau$ das Volumenelement. Die Integration erfolgt über den gesamten Definitionsbereich von f. Dieser Ausdruck kann vereinfacht werden zu

$$\langle \hat{A} \rangle = \int f^* \hat{A} f d\tau \qquad \text{wenn} \quad \int f^* f d\tau = 1$$

In dem Fall ist f auf 1 normiert.

Finden Sie den Normierungsfaktor N der Funktionen

   (a) $f(x) = \sin(\frac{\pi x}{L}) \qquad x \in [0, L]$
   (b) $f(x) = e^{(-ax^2)} \qquad x \in [-\infty, +\infty]$

Hinweis: $\int \sin^2(ax)dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a} + const$; $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta^2 x^2} dx = \frac{\pi^{1/2}}{\beta}$;
weiterhin gilt in beiden Aufgaben $\mathrm{d}\tau = \mathrm{d}x$