Übungen zur Vorlesung
Theoretische Chemie I
Sommersemester 2017
6. Übungsblatt

31.5.2017

1. (a) Berechnen Sie die mittlere thermische Energie kT bei Raumtemperatur ($25°C = 298.15$ K).

   (b) Betrachten Sie ein Wasserstoffatom in einem 40 Å breiten Hohlraum eines Festkörpers. Nehmen Sie an, dass dieser Hohlraum in zwei Richtungen sehr viel enger ist als in der dritten Raumrichtung (z). Der Hohlraum kann also näherungsweise als 1-dimensionaler Kasten entlang der z-Achse angesehen werden. Wie viele Zustände gibt es, die eine Energie kleiner als kT aufweisen?

   (c) Berechnen Sie die Energiedifferenz zwischen dem höchsten Zustand des obigen H-Atoms mit Energie kleiner oder gleich kT und dem niedrigsten Zustand des obigen H-Atoms mit Energie größer kT. Berechnen Sie das Verhältnis dieser Energiedifferenz zu kT.

2. Führen Sie die gleiche Rechnung für ein Argon-Atom durch.

Please turn page!!

3. Die Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators im Grundzustand ψ_0 und im 1. angeregten Zustand ψ_1 lauten

$$\begin{aligned}\psi_0(x) &= \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2} \\ \psi_1(x) &= \left(\frac{2\alpha^3}{\pi^{1/2}}\right)^{1/2} x\mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2}\end{aligned}$$

mit $\alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$ und $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

(a) Zeigen Sie, dass die beiden Wellenfunktionen auf 1 normiert sind.

(b) Zeigen Sie, dass damit gilt

$$\langle E_{kin}\rangle = \langle E_{pot}\rangle \ ,$$

dass also mittlere kinetische und mittlere potentielle Energie gleich sind. Diese Aussage ist ein Spezialfall des sogenannten *Virialtheorems*.

(c) Berechnen Sie für Grund- und 1. angeregten Zustand die Orts-Impuls-Unschärfe

(d) Berechnen Sie die Unschärfe $\Delta(E_{pot})$ der potentiellen Energie in beiden Zuständen.

Hinweis: Benutzen Sie zur Berechnung der Integrale

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} x^n \mathrm{e}^{-ax^2} \mathrm{d}x$$

die Rekursionsformel $I_{n+2} = \frac{n+1}{2a} I_n$ mit $I_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}}$. Diese Formel besagt, dass z. B. $I_2 = \frac{1}{2a} I_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{a^3}}$ ist. I_4 können Sie aus I_2 berechnen, usw. Beachten Sie ferner, dass für *ungerades* n die Integrale verschwinden, weil der Integrand ungerade ist, der Integrationsbereich aber symmetrisch ist.