

**Institut für Physikalische Chemie  
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg  
WS2007/2008**

Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II  
Prof. Dr. P. Gräber  
(L = leicht, M = mittel, S = schwer)  
10. Übungsblatt

10.1 L Ein  $\pi$ -Elektron in einem konjugierten  $\pi$ -Bindungssystem kann in einfachster Näherung mit dem Modell des eindimensionalen Potentialtopfes beschrieben werden. Wie groß ist der Unterschied zwischen den beiden untersten Energieniveaus eines Elektrons, wenn es sich in einem System der Länge 0,5 nm befindet? Vergleichen Sie diesen Wert mit der Differenz der beiden ersten Energieniveaus eines Sauerstoffmoleküls  $O_2$ , das in einem 5 cm langen Kasten eingeschlossen ist!

10.2 S Ein Teilchen mit der Masse  $m$  ist in einen rechteckigen Potentialkasten mit den Kantenlängen  $a$  und  $b$  in  $x$ - bzw.  $y$ - Richtung eingeschlossen. Für das Potential gilt:

$$V(x, y) = 0 \text{ für } 0 \leq x \leq a \text{ und } 0 \leq y \leq b \text{ sowie } V(x, y) = \infty \text{ sonst.}$$

- a) Bestimmen Sie die Eigenfunktionen und Eigenwerte für das Teilchen im zweidimensionalen Kasten durch ausführliche Rechnung!
- b) Geben Sie die Anzahl der Zustände und die Anzahl der Energieniveaus im Bereich zwischen  $E=0$  und  $E=2h/(ma^2)$  für einen quadratischen Potentialkasten  $a = b$  an!

10.3 M Zeigen Sie durch explizite Lösung der Integrale, dass für das H-Atom die Funktionen  $\psi_{100}$  und  $\psi_{200}$  orthogonal sind.

$$\psi_{100} = \sqrt{\frac{1}{\pi a^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a}}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{2\pi a^3}} \cdot \left(2 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$\text{Hinweis: } \int_0^{\infty} r^n e^{-r/\alpha} dr = n! \alpha^{n+1}$$