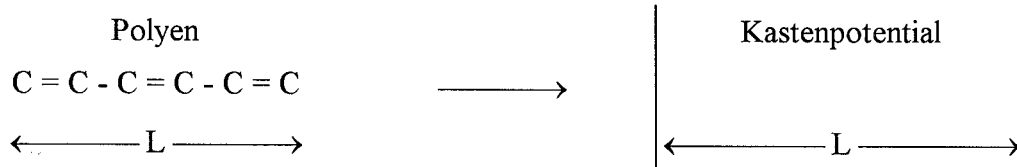


**Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
WS2008/2009**

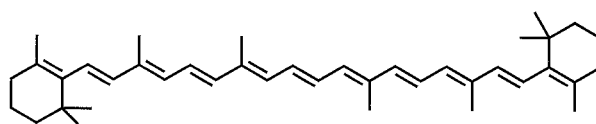
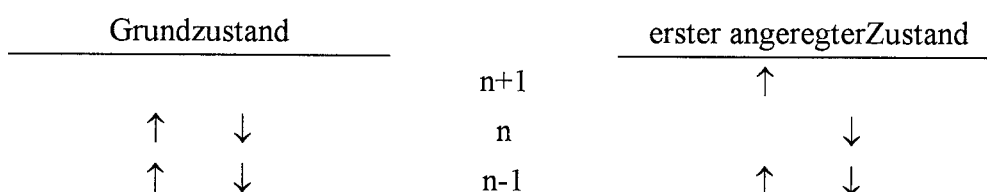
Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II
Prof. Dr. E. Bartsch
(L = leicht, M = mittel, S = schwer)
11. Übungsblatt

- 11.1 L Welche der folgenden Wellenfunktionen stellen „physikalisch sinnvolle“ Wellenfunktionen dar?
- a.) $\psi(x) = \pm x^2$
 - b.) $\psi(x) = Ax^2$ (A ist eine Konstante)
 - c.) $\psi(\Theta) = \cos \Theta$
 - d.) $\psi(x) = e^{-ax}$ (a ist eine Konstante)
- 11.2 L Berechnen Sie das Produkt der folgenden Wellenfunktionen mit der jeweils konjugiert komplexen Wellenfunktion ($\psi^* \psi$)!
- a.) $\psi(\Theta) = \sin \Theta + i \cos \Theta$
 - b.) $\psi(x) = e^{iax}$ ($i = (-1)^{1/2}$)
 - c.) $\psi(x) = e^{-x^2}$
- 11.3 L Gegeben sei die Wellenfunktion $\psi(\varphi) = Ae^{im\varphi}$, m ganze Zahl. Bestimmen Sie A so, daß $\psi(\varphi)$ normiert ist. Benutzen Sie als Volumenelement den Winkel $d\varphi$ und integrieren Sie von 0 bis 2π .
- 11.4 L Zeigen Sie, dass die Funktion $\psi(x) = C \cos(\alpha x) + D \sin(\alpha x)$ mit $\alpha^2 = 2mE/\hbar^2$ ebenfalls eine allgemeine Lösung der SGL für das Teilchen im Kasten mit unendlich hohen Wänden ist. Verwenden Sie die Randbedingungen des Problems, um die spezielle Lösung – die Wellenfunktion – und die Energieeigenwerte zu erhalten.
- 11.5 M Zeigen Sie, dass die Wellenfunktionen des Teilchens im Kasten mit unendlich hohen Wänden orthogonal zueinander sind.
Hinweis: $\sin ax \sin bx = \frac{1}{2} [\cos((a-b)x) - \cos((a+b)x)]$
- 11.6 L In starker Vereinfachung kann man die π -Elektronen in einem linearen konjugierten Polyen als freie Teilchen in einem eindimensionalen Kasten auffassen, wobei alle Details der Wechselwirkungen vernachlässigt werden:



Die Energien und Wellenfunktionen ergeben sich aus folgenden Annahmen:

- 1) Die Kastenlänge L ergibt sich aus der Zahl N der C-C-Bindungen, über die sich das konjugierte π -Elektronensystem erstreckt, wobei als mittlerer C-C-Abstand $R_{\text{CC}} = 144 \text{ pm}$ angenommen wird, d.h. $L = N \cdot R_{\text{CC}}$.
- 2) Jedem Energieniveau des Kastenmodells werden zwei Elektronen zugeordnet, wobei die Zahl der „freien“ Elektronenpaare gleich der Anzahl der Doppelbindungen ist (Pauli-Prinzip). Die Gesamtenergie ergibt sich als Summe der einzelnen Energien der π -Elektronen.
- 3) Die energetisch tiefste elektronische Anregungsenergie erhält man aus der Differenz der Energien des höchsten besetzten (HOMO = Highest Occupied Molecular Orbital) und des niedrigsten unbesetzten (LUMO = Lowest Unoccupied Molecular Orbital) Energieniveaus.



1 β -Carotin

Berechnen Sie für Hexatrien, Oktatetraen und ~~β -Carotin~~ (Teilaufgabe gestrichen) die Wellenlängen der langwelligsten elektronischen Anregung im Rahmen dieses Modells. Welche Farben erwarten Sie für Lösungen dieser Moleküle?