

**Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg**

**Lösungen zum Übungsblatt 9
zur Vorlesung Physikalische Chemie II
WS 2007/08 Prof. P. Gräber**

- 9.1 Welche Aspekte des Bohr'schen Modells sind im Lichte der Quantenmechanik unhaltbar? Wie unterscheidet sich der Bohr'sche Grundzustand vom wirklichen Grundzustand? Gibt es trotz der numerischen Übereinstimmung eine experimentelle Möglichkeit für den Nachweis, dass das Bohr'sche Modell der Quantenmechanik unterlegen ist?

Lösung:

- a) Beim Bohr'schen Modell gibt es eine definierte Bahn. Dies impliziert, dass das H-Atom nicht kugelförmig sein sollte, sondern diskusförmig.
- b) Der Drehimpuls ist nach Bohr $|\vec{\ell}| = n\hbar$. Nach der Schrödingergleichung ist $|\vec{\ell}| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$. Das heißt im Grundzustand ($n = 1$) gibt es nach Bohr einen Drehimpuls, nach Schrödinger ($n = 1, \ell = 0$) keinen.
- c) Der Drehimpuls des Elektrons ist mit einem magnetischen Dipolmoment verknüpft. Durch Messung des Dipolmoments kann man beide Modelle unterscheiden. Nach Bohr gibt es eins, nach Schrödinger nicht.

- 9.2 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)

Lösung:

Physikalisch sinnvolle Wellenfunktionen:

- stetig
- eindeutig
- mindestens 2 Mal differenzierbar
- überall endlich
- für $r \rightarrow \infty$ muss $\psi \rightarrow 0$ gehen

- a) Nein, da nicht eindeutig und $\psi \rightarrow \infty$ für $x \rightarrow \infty$
- b) Nein, da $\psi \rightarrow \infty$ für $x \rightarrow \infty$
- c) Ja, da $\psi(\Theta) = \psi(\Theta + 2\pi)$
- c) Nein, da $\exp(-ax) \rightarrow \infty$ für $x \rightarrow -\infty$

9.3 Berechnen Sie das Produkt der folgenden Wellenfunktionen mit der jeweils konjugiert komplexen Wellenfunktion ($\psi^* \psi$).

- a) $\psi(\Theta) = \sin \Theta + i \cos \Theta$
- b) $\psi(x) = e^{iax} \quad (i = (-1)^{1/2})$
- c) $\psi(x) = e^{-x^2}$

Lösung:

$$a) \psi^*(\Theta) \psi(\Theta) = (\sin \Theta + i \cos \Theta)^* (\sin \Theta + i \cos \Theta)$$

$$= (\sin \Theta - i \cos \Theta)(\sin \Theta + i \cos \Theta) \\ = \sin^2 \Theta - i^2 \cos^2 \Theta = \sin^2 \Theta + \cos^2 \Theta = 1$$

$$b) \psi^* \psi = \exp(-i ax) \exp(i ax) = \exp(-i ax + i ax) = \exp(0) = 1$$

$$c) \psi^* \psi = \exp(-x^2) \exp(-x^2) = \exp(-2 x^2)$$

9.4 Gegeben sei die Wellenfunktion $\psi(\varphi) = A e^{im\varphi}$, 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 .

Lösung:

$$W = \int_0^{2\pi} \psi^* \psi d\varphi = 1$$

$$W = \int_0^{2\pi} A^* \exp(-i m \varphi) A \exp(i m \varphi) d\varphi$$

$$= A^* A \int_0^{2\pi} \exp(-i m \varphi + i m \varphi) d\varphi$$

$$= A^* A \int_0^{2\pi} 1 \cdot d\varphi = A^* A \varphi \Big|_0^{2\pi} = A^* A 2\pi$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i m \varphi)$$

9.5 Gegeben seien die folgenden Operatoren für den Ort: $\hat{x} = x$

und den Impuls in x-Richtung: $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

Wenden Sie die beiden Operatoren jeweils auf die folgende Wellenfunktion an:

$$\psi(x) = A \sin(n\pi x/a) \quad (A, n, a \text{ sind Konstanten})$$

Lösung:

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$\hat{x}\psi(x) = x \cdot A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$\hat{p}\psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \left(A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right)$$

$$= \frac{\hbar}{i} A \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \left(\frac{n\pi}{a}\right)$$