

# Übungen zur Physikalischen und Theoretischen Chemie I, WS 2001/02, Blatt 12

Abgabe am 28.01.02 um 8:15 h

## Aufgabe 1 (4 Punkte)

- Führt die Unbestimmtheitsrelation in der Quantenmechanik zu einer Verletzung der Kausalität?
- Wenn gilt  $\mathbf{a} \circ |\psi_{a_0}\rangle = a_0 * |\psi_{a_0}\rangle$  (d.h. wenn  $a_0$  Eigenwert des Operators  $\mathbf{a}$  mit der Eigenfunktion  $|\psi_{a_0}\rangle$  ist), so erhält man für die zum Operator  $\mathbf{a}$  gehörende Observable immer exakt denselben Eigenwert. Ist dies ein Widerspruch zur Unschärferelation?

## Aufgabe 2 (6 Punkte)

Gegeben ist eine Zustandsfunktion vom Typ  $\psi(x, t) = \phi(x)e^{-i\alpha t}$ .

- Berechnen sie die örtliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$  und deren zeitliche Ableitung  $\partial\rho/\partial t$
- Der Operators  $\mathbf{a}$  sei ein explizit zeitunabhängiger Operator ist, der nur auf die x-Komponente wirkt. Wie ist die zeitliche Änderung des Erwartungswerts  $\bar{a}$  für einen Zustand, der durch obige Zustandsfunktion beschrieben wird?

## Aufgabe 3 (14 Punkte)

Für konjugierte Polyene  $C_nH_{n+2}$  mit alternierenden Bindungslängen und einer Anzahl  $m=n/2$  von Doppelbindungen bekommt man nach einem modifizierten Kastenmodell für die erste

Absorptionsbande statt  $\lambda = a \cdot (m+1)$  eine Abhängigkeit  $\lambda = \frac{a \cdot (m+1)}{1 + \delta \cdot m}$ , wobei  $a$  und  $\delta$

Konstanten sind.

- Bringen Sie die Formel für  $\lambda$  auf die Form  $\frac{1}{\lambda} = \frac{\delta}{a} + \frac{1-\delta}{a} \cdot \frac{1}{m+1}$   
Was erhält man, wenn man  $\lambda^{-1}$  gegen  $(2n+1)^{-1}$  aufplottet?
- Zeichnen Sie  $2000\text{nm}/\lambda$  gegen  $20/(m+1)$  für die folgenden experimentellen Daten auf DIN A4-Papier:

Verbindung	$\lambda$
Ethen	162 nm
Butadien	217 nm
Hexatrien	257 nm
Octratrien	290 nm
Decapentaen	317 nm

- Bestimmen Sie aus der Graphik, bei welchen Wellenlängen  $C_{12}H_{14}$  und  $C_{14}H_{16}$  absorbieren sollten.
- Ab welchem  $n$  sind Polyene farbig?
- Wo absorbieren sehr lange Polyene? Welche erwarten Sie demzufolge?