

Übungen zur Physikalischen und Theoretischen Chemie I, WS 2001/02, Blatt 13

Abgabe am 04.02.02 um 8:15 h

Aufgabe 1 (6 Punkte)

Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, durch eine Barriere mit einer Dicke von 1nm und einer Potentialhöhe von 1eV zu tunneln

- für ein Elektron mit einer kinetischen Energie von 0,95 eV
- für ein Elektron mit einer kinetischen Energie von 0,50 eV
- für ein Proton mit einer kinetischen Energie von 0.95 eV

Aufgabe 2 (8 Punkte)

Gegeben ist eine Potentialstufe der Form $V(x) = 0$ für $x \leq 0$, $V(x) = V_0$ für $x > 0$

- Zeigen Sie, dass die folgende Wellenfunktion eine Lösung der Schrödingergleichung ist, wenn die kinetische Energie E größer als V_0 ist, und berechnen sie die Werte von k und k' für ein Teilchen der Masse m und der kinetischen Energie E .

$$\psi = e^{ikx} + a^- e^{-ikx} \text{ für } x \leq 0$$

$$\psi = b^+ e^{ik'x} \text{ für } x > 0$$

- Bestimmen die Koeffizienten a^- und b^+ aus der Bedingung, dass sowohl ψ als auch die 1. Ableitung ψ' an der Stelle $x = 0$ stetig sein müssen.

Aufgabe 3 (6 Punkte)

Behandeln Sie das Cl_2 -Molekül als harmonischen Oszillator mit einer Kraftkonstanten von $k = 329 \text{ N m}^{-1}$

- Geben Sie k in atomaren Einheiten an.
- Wie groß ist die Energie des niedrigsten Schwingungszustandes?
- Wie groß ist die Schwingungsbreite $2 \cdot R$ in Bohr bei $T=300 \text{ K}$, wenn R durch die Beziehung

$$\frac{k}{2} R^2 = \frac{1}{2} k_B T$$

gegeben ist? Wie viel Prozent des Bindungsabstands sind das?

- Wie groß ist die Energiedifferenz zum 1. angeregten Schwingungszustand und welcher Wellenlänge und welchem Spektralbereich entspricht das?