



Übungsblatt Nr. 5

Ausgabe: 16.5.2018

Aufgabe 1: Klassischer harmonischer Oszillator



Die Vibrationen des HF Moleküls können in einfacher Näherung durch obiges Modell beschrieben werden. Hierbei verbindet eine Feder mit der Kraftkonstante k die zwei als punktförmig anzunehmenden Atomkerne.

Die Kraftkonstante k der Bindung beträgt $880 \frac{\text{N}}{\text{m}}$, die Bindungslänge r_0 beträgt 91.7 pm.

- Berechnen Sie die reduzierte Masse von $^1\text{H}^{19}\text{F}$.
- Berechnen Sie die Eigenfrequenz ω_0 der Schwingung. Berechnen Sie die zugehörige Energie in Wellenzahlen.
- Berechnen Sie in Näherung des klassischen harmonischen Oszillators die potentielle Energie des Systems, wenn der Abstand zwischen den Atomen dem 1-, 1.25- bzw. 1.5-fachen Gleichgewichtsabstand entspricht. Vergleichen Sie die erhaltenen Energiewerte mit der Bindungsenergie von $\Delta H_{\text{HF}} = 565 \text{ kJ/mol}$.

Aufgabe 2: Quantenmechanischer harmonischer Oszillator

Betrachten Sie nun das obige Beispiel im Modell des quantenmechanischen harmonischen Oszillators.

- Bestimmen Sie die Nullpunktsenergie ($v = 0$) von $^1\text{H}^{19}\text{F}$.
- Wie groß ist der energetische Abstand zu den jeweils nächsten Energieniveaus (1 bis 4)?
- Skizzieren Sie Wellenfunktionen dieser Energieniveaus mit deren Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten.
- Betrachten Sie nun die in Aufgabe 1c) diskutierten Atomabstände. Für welche Schwingungsquantenzahlen werden die entsprechenden mittleren Auslenkungen (näherungsweise) erreicht? Hinweis: Verwenden Sie dazu die Quadratwurzel der mittleren quadratischen Auslenkung: $\sqrt{\langle (r - r_0)^2 \rangle} = \sqrt{\left(v + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{\sqrt{k\mu}}}$

Aufgabe 3: Teilchen im Kasten

Die Wellenfunktion für ein Teilchen im 1D-Kasten der Länge L im Bereich von 0 bis L lautet

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

Leiten Sie den Ortserwartungswert sowie den Ort mit maximaler Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für $n = 1$ her. Diskutieren Sie das Ergebnis.

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Bereich von $L/4$ bis $3L/4$ anzutreffen?

Hinweis: $\sin^2(x) = \frac{1}{2}(1 - \cos(2x))$