

4. Übungsblatt (zu bearbeiten bis 14.05.2007)

14. Die Vereinigung zweier eindimensionaler Potentialkästen (mit unendlich hohen Wänden) zu einem größeren Kasten stellt ein einfaches Modell der chemischen Bindung dar, da bei diesem Vorgang die Gesamtenergie des Systems sinkt.
- a) Berechnen Sie die "Bindungsenergie" zwischen zwei gleichartigen Potentialkästen von jeweils 2 Å Länge, die sich zu einem Kasten der Länge 3 Å verbinden (Überlapp von 1 Å). Einer der Kästen enthält ein Elektron im Grundzustand, der andere Kasten ist unbesetzt.
- b) Vergleichen Sie den Wert mit typischen kovalenten Bindungsenergien aus der Literatur. (Weiterführende Literatur: W. Kutzelnigg, Was ist Chemische Bindung? Angew. Chem. 85 (1973) 551.)
15. Ein Elektron befinde sich in einem eindimensionalen Potentialkasten mit einer Länge von 10 Å.
- a) Wie groß ist die Impulsunschärfe des Elektrons? Gehen Sie bei der Lösung der Aufgabe von den Energieeigenwerten des Elektrons im Kastenpotential aus!
- b) Um den Aufenthaltsort des Elektrons genauer festzulegen, wird der Kasten auf 1 Å verkleinert. Um welchen Faktor erhöht sich die Impulsunschärfe?
16. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, in einem eindimensionalen Potentialkasten mit unendlich hohen Wänden und der Länge a_0 ein Elektron zwischen den Koordinaten $1/3 a_0$ und $2/3 a_0$ zu finden, wenn sich das Teilchen a) im Grundzustand, b) im ersten angeregten Zustand befindet?
17. Zeigen Sie, dass im Falle des eindimensionalen Potentialkastens mit unendlich hohen Wänden und der Länge a_0 die zugehörigen Wellenfunktionen $\psi_n(x)$ orthonormal sind, d.h.

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \cdot \psi_m(x) dx = \delta_{nm} \equiv \begin{cases} 1 & (m = n) \\ 0 & (m \neq n) \end{cases}$$

Machen Sie sich das Resultat anschaulich klar, indem Sie die Wellenfunktionen für die ersten beiden Zustände ($n = 1$, $m = 2$) skizzieren.