Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I
WS 2018/19 – Übungsblatt 7

Ausgabe: Freitag 30. November, Besprechung: Dienstag 4. Dezember

1. Die Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators

   a) Wie lautet der Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators in einer Raumdimension (x)?

   b) Verwenden Sie die Substitution

   $$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \qquad , \qquad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

   um die Schrödingergleichung in die Form

   $$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} - y^2 + \lambda\right)\Psi(y) = 0$$

   zu überführen.

   c) Nehmen Sie für die Wellenfunktion $\Psi(y)$ den Produktansatz

   $$\Psi(y) = f(y)\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

   an. (*Verständnisfrage:* Warum ist dieser Ansatz sinnvoll?) Zeigen Sie, dass als Bestimmungsgleichung für $f(y)$ die Hermitesche Differentialgleichung

   $$f''(y) - 2yf'(y) + (\lambda - 1)f(y) = 0$$

   erhalten wird.

   d) Die Hermitesche Differentialgleichung hat nur dann eine nicht-triviale Lösung, wenn λ eine ungerade natürliche Zahl ist. Welche Energien sind demnach im harmonischen Oszillator erlaubt?

2. Ein Proton mit einer kinetischen Energie von $E = 1\,\mathrm{eV}$ trifft auf eine Potentialbarriere der Höhe $V_0 = 3\,\mathrm{eV}$. Berechnen Sie die Eindringtiefe κ^{-1}:

   $$\kappa^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

   Verwenden Sie dabei – zur Vorbereitung auf die Klausur ohne Taschenrechner! – die folgenden, grob gerundeten Zahlenwerte: $m = 2 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$, $\hbar = 1 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$ und $1\,\mathrm{eV} = 2 \times 10^{-19}\,\mathrm{J}$. Stellen Sie Ihr Ergebnis in Relation zu typischen atomaren Größenordnungen.