Advanced Kinetics   Martin Quack   Frühjahrssemester 2013

Übung 1

Ausgabe:	Freitag, 15.03.2013
Rückgabe:	Freitag, 12.04.2013, in der Vorlesungspause
Besprechung:	Termin wird bekannt gegeben
Verantwortlich:	1. Ľuboš Horný 2. Eduard Miloglyadov

1.1 Lesen Sie zur Wiederholung und Einführung in das Superpositionsprinzip Kapitel 5 des alten Skripts Allgemeine Chemie PC (insbesondere Kapitel 5.6) und lösen Sie Aufgabe 1 am Ende von Kapitel 5.6.5 (Deuteroanilin) und Aufgaben 1 und 2 am Ende von Kapitel 5.6.6 (Deuteroanilin und Impuls eines Teilchens im Kasten). Stellen Sie schriftlich Fragen, wo Sie Verständnisprobleme haben oder Fehler vermuten.

1.2 Zur Wiederholung lesen Sie das Skript PC II Kinetik (wenn Sie keines besitzen, können Sie es vom Sekretariat in HCI E 237 beziehen). Lesen Sie insbesondere Kapitel 3.6 bis 3.12, Kapitel 4 und 5. Stellen Sie schriftlich Fragen, wo Sie Verständnisprobleme haben oder Fehler vermuten.

1.3 Lesen Sie Kapitel 2 des Skripts Advanced Kinetics soweit verteilt und stellen Sie schriftlich Fragen, wo Sie Verständnisprobleme haben oder Fehler vermuten.

1.4 Die zeitabhängigen Werte von $x(t)$ und $p(t)$ für einen harmonischen Oszillator mit der Masse m und der potentiellen Energie $V(x) = \frac{1}{2}fx^2$ lassen sich elementar ermitteln (siehe frühere Vorlesungen). Erstellen Sie auf dieser Grundlage eine graphische Darstellung der Phasenporträts des harmonischen Oszillators mit $\nu = 10^{14}$ s^{-1} mit $m = 1$ Da für die quantisierten Energien mit $n = 1, 2, 3, ...$ Berechnen Sie zunächst die Kraftkonstante f. Versuchen Sie auch eine dreidimensionale Darstellung der Trajektorie im Phasenraum als Funktion der Zeit t graphisch darzustellen, wobei die t-Achse senkrecht auf der p, x-Ebene steht (Siehe Skript Kap. 1.4.1.)

1.5 Lösen Sie die Aufgabe am Ende von Kapitel 2.1.3 des Skripts Advanced Kinetics (zum Superpositionsprinzip).

1.6 Lösen Sie die Aufgabe am Ende von Kapitel 2.2 und diskutieren Sie Ihre Ergebnisse (mittlere Energie einer Superposition des harmonischen Oszillators).

1.7 Lösen Sie die Aufgabe am Ende von Kapitel 2.3.1 (Inversion).

1.8 Lösen Sie die Aufgabe am Ende von Kapitel 2.3.2 (Zeitumkehr und Impulsumkehr). Zeigen Sie ausserdem, dass mit $\Psi(t)$ auch $\Psi^*(t)$ eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung ist (unter welchen Bedingungen?).

1.9 Aufgabe zum klassischen Grenzfall der Quantenmechanik (siehe Kapitel 2.3.3).
Die Nanotechnologie operiert auf dem mesoskopischen Bereich zwischen molekularer und makroskopischer Welt. Berechnen Sie die Frequenz und die Periode der Schwingung, sowie Δx Δp für ein „Nanopendel“ eines Au_n Nanoclusters (mit $n = 1000$), das z.B. durch Aufhängung

einer Dekaphenylkette über eine Si-O-Brücke an eine Siliciumdioxid(Quarz-)fläche funktionell (etwa über einer Au-S-C Verknüpfung) angehängt ist.

Si - X - $(C_6H_4)_{10}$ - Y - Au_n

Schätzen Sie die Kettenlänge aus den Ihnen bekannten Strukturdaten für Benzol und der Länge einer CC-Einfachbindung ab und vernachlässigen Sie die Masse der Dekaphenylkette. Wann genügt die Gravitation, die auf Au_n wirkt, um eine Bindung von 200 kJ/mol zu brechen (Hinweis: Benutzen Sie die Bindungslänge, bei der die Energie in einem anharmonischen Potential im Bereich der Dissoziationsenergie liegt)? Äussern Sie sich zu Ihren Ergebnissen. Berechnen Sie auch die Wellenlänge λ und die Wellenzahl $\tilde{\nu}$ für das Schwingungsspektrum und geben Sie den dazu gehörenden Spektralbereich an.

1.10 Lösen Sie die Aufgabe am Ende von Kapitel 2.4.1 (Linienbreiten und Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation). Bearbeiten Sie auch die Aufgabe ganz am Ende von Kap. 2.4.1 ($\Delta p \cdot \Delta x$ z.B. für die 3 tiefsten Energiezustände des harmonischen Oszillators).

1.11 Versuchen Sie, anhand der Vorgehensweise von Kap. 2.4.1 analog die Überlebenswahrscheinlichkeit des Anfangszustandes herzuleiten
a) mit einer Gaussverteilung der Energien,
b) mit einer Poissonverteilung der Energien.

1.12 Zeigen Sie, dass mit Gl. (2.45) auch Gl. (2.46) im Skript gilt, dass also bei der Bildung des Betragsquadrates die Reihenfolge des Produktes und der komplex konjugierten Funktionen unter dem Integral unwesentlich ist.

Version vom 18. März 2013