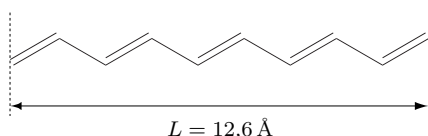


## Übung 4

Abgabe: Dienstag, 25. November 2003

### Aufgabe 1

Die zehn  $\pi$ -Elektronen einer Decapentaen-Molekel können – wie bei dem in der Vorlesung behandelten Hexatrien – als Teilchen in einem eindimensionalen Kasten der Länge  $L$  aufgefaßt werden:



- 1.1 Wie groß ist im Rahmen dieses Modells die Energiedifferenz zwischen dem elektronischen Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand von Decapentaen?
- 1.2 Welche Farbe würde man für Decapentaen gemäß obigem Ergebnis erwarten?

### Aufgabe 2

Wir betrachten ein Teilchen der Masse  $m$  in einem dreidimensionalen quaderförmigen Kasten mit den Abmessungen  $L_x$ ,  $L_y$  und  $L_z$ . Der Hamiltonoperator lautet

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{=:\Delta} + V(\mathbf{r}),$$

wobei die potentielle Energie  $V$  am Ort  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  gegeben ist durch

$$V(\mathbf{r}) := \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 < x < L_x \\ & \text{und } 0 < y < L_y \\ & \text{und } 0 < z < L_z, \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases}$$

- 2.1 Man zeige, daß Wellenfunktionen der Form

$$\psi(\mathbf{r}) \sim (\sin k_x x)(\sin k_y y)(\sin k_z z)$$

die Schrödingergleichung  $\hat{H}\psi = E\psi$  erfüllen (für  $\mathbf{r}$  innerhalb des Kastens).

- 2.2 Wie muß man  $k_x$ ,  $k_y$  und  $k_z$  wählen, damit  $\psi(\mathbf{r})$  am Rand des Kastens verschwindet? Wie lauten unter dieser Randbedingung die möglichen Energie-Eigenwerte des Teilchens im Kasten?

### Aufgabe 3

Ein Elektron befindet sich in einem eindimensionalen Kasten der Länge  $L$  mit undurchdringlichen Wänden. Die Tatsache, daß die Energie  $E_1$  des Elektrons im Grundzustand umso höher ist, je kleiner die Kastenlänge  $L$  ist, kann man dahingehend interpretieren, daß das Elektron eine Kraft  $F$  auf die Kastenwände ausübt: ändert sich die Kastenlänge um den Betrag  $dL$ , dann ändert sich die Energie des Grundzustandes um den Betrag  $dE_1 = -F dL$ .

- 3.1 Wie hängt diese Kraft  $F$  von der Kastenlänge  $L$  ab?
- 3.2 Bei welcher Kastenlänge gilt  $F = 1 \text{ N}$ ?

### Aufgabe 4

Für ein an einer Oberfläche adsorbiertes Atom (Abb. 1) ist die potentielle Energie in erster Näherung gegeben durch

$$V(x) = \frac{1}{2} f x^2,$$

wobei  $f$  die „Federkonstante“ und  $x$  die Auslenkung der „Feder“ aus der Gleichgewichtslage bezeichnet.

- 4.1 Wie lautet der Operator für die potentielle Energie? Wie lautet der Operator für die kinetische Energie?
- 4.2 Vertauschen diese beiden Operatoren? Hat das Atom zugleich kinetische und potentielle Energie?

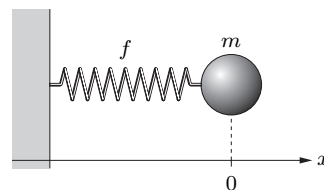


Abbildung 1: Mechanisches Modell für ein an einer Oberfläche adsorbiertes Atom