Übungsblatt Nr.1

Physikalische Chemie II — Sommersemester 2019

Aufgabe 1
In der klassischen Mechanik wird die Energie eines eindimensionalen harmonischen Oszillators beschrieben durch:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

Die Bewegungsgleichung in der Newtonschen Mechanik wird beschrieben durch:

$$F = \frac{dp}{dt} = -\frac{dV}{dx} = ma$$

Die Bewegungsgleichung in der Hamiltonschen Formulierung der Mechanik sind:

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \qquad \dot{p} = \frac{dp}{dt} = \frac{\partial H}{\partial x}$$

Mit der Hamilton-Funktion $H = T + V$, wobei T die kinetische, und V die potentielle Energie ist.

a) Leiten Sie die Energie für den harmonischen Oszillator einmal mit dem Newtonschen und einmal mit dem Hamiltonschen Formalismus ab.

b) Lösen Sie die Bewegungsgleichungen ($x(t)$ ermitteln) mit den Anfangsbedingungen $x(0) = A_0$ und $p(0) = 0$.

c) Zeigen Sie, dass die Energie des harmonischen Oszillators konstant ist. (Hinweis: $x(t)$ in die Formel für die Gesamtenergie einsetzen)

Aufgabe 2
Eine eindimensionale Welle wird durch eine *Wellengleichung* beschrieben, die die Form einer partiellen Differentialgleichung hat:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}y(x,t) = c^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}y(x,t)$$

a) Zeigen Sie durch Einsetzen, dass die Überlagerung (= Superposition) von $\sin(kx - \omega t)$ und $\cos(kx - \omega t)$ ebenfalls eine Lösung der Wellengleichung ist. Welche Beziehung ergeben sich für c, ω und k?

b) Zeigen Sie, dass $E(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ eine Lösung der Wellengleichung ist.

Aufgabe 3
Auch die Änderung der Konzentration von Teilchen in Lösung $c(x,t)$ wird durch eine partielle Differentialgleichung beschrieben - die Fick'sche Diffusionsgleichung:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = -D\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}$$

a) Ist $\cos(kx - \omega t)$ eine Lösung der Diffusionsgleichung?

a) Ist $\varphi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ eine Lösung der Diffusionsgleichung?

c) Setzen Sie nun in $\varphi(x,t)$ die de Broglie Beziehungen $k = \frac{p}{\hbar}$ und $\omega = \frac{E}{\hbar}$ ein. Für ein freies Teilchen gilt: $E = \frac{p^2}{2m}$. Wie muss D gewählt werden, damit diese Beziehung erfüllt ist? Vergleichen Sie nun die Diffusionsgleichung mit der Schrödingergleichung für ein freies Teilchen.

Aufgabe 4
Zeigen Sie mit der Heisenbergschen Unschärferelation $(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$ und $k = m\omega^2$, dass die niedrigste Energie des harmonischen Oszillators größer als null ist (= Grundzustandsenergie).