

Wiederholung komplexer Themen nach Studentenewunsch

- Zerlegen/Zeichnen von "gemischten Funktionen"
Kontext radialer Anteil von Orbitalen z.B. $x^2 \cdot e^y$
- Rotation in 3D
kompliziertes Rechnen?
- Gleichungen mit sich überschneidenden
Formelzeichen/Variablen
- Normierung von Wellenfkt./Allgemeiner Tkt.

Edmundstutorium
PC?

- Normieren von Funktionen

Allgemein: gegeben sei eine Funktion und eine

Randbedingung dieser Funktion

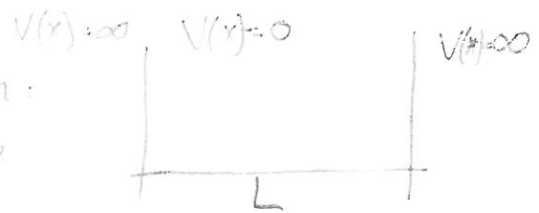
Die Randbedingung limitiert z.B. die Gültigkeit oder Interpretierbarkeit der Funktion

Damit die Funktion nun dieser Bedingung folgt, muss sie entsprechend normiert werden.

Bsp.:

Teilchen im Kasten:

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi$$



Was ist ψ ? \rightarrow Welle

Allgemein für Wellen: $\psi = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

1. Bedingung λ muss zwischen die Wände passen

2. Stetige Wellenfkt $\psi(x=0) = 0$ und $\psi(x=L) = 0$

$$\Rightarrow \psi = N \cdot \sin(kx), \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\psi = N \cdot \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)$$

Erlaubte λ : $\lambda = 2L, L, \frac{3}{2}L, \dots$

$$\lambda = \frac{2L}{n} \quad n \in \mathbb{N}$$

$$\Rightarrow \psi = N \sin\left(\frac{n \cdot 2\pi}{2L} x\right) = N \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

$\Rightarrow N?$ \rightarrow Normierung!

Was ist nun die limitierende Bedingung?

→ Born'sche Interpretation der Wellenfkt.
Aufenthaltswahrscheinlichkeit irgendwo im
Kasten: 100% bzw 1

$$\int_0^L \Psi^2 dx = 1 \quad , \quad \Psi \text{ einsetzen}$$

$$N^2 \int_0^L \sin^2 \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dx = 1$$

$$\text{Tip: } \int \sin^2(ax) dx = \frac{1}{2}x - \frac{\sin(2ax)}{4a} \quad \checkmark$$

$$1 = N^2 \left(\frac{1}{2}x - \frac{\sin \left(\frac{2n\pi}{L} \cdot x \right) \cdot L}{4n\pi} \right) \Big|_0^L$$
$$= N^2 \left(\frac{1}{2}L - L \frac{\sin \left(\frac{2n\pi}{L} L \right)}{4n\pi} - 0 \right)$$

$$= N^2 \frac{1}{2}L$$

$$1 = \frac{1}{2}LN^2$$

$$N = \sqrt{2/L}$$

$$\Rightarrow \Psi = \sqrt{2/L} \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right)$$

• Zerlegen / Zeichnen von Funktionen

Ein paar "Standardfunktionen"

$$f(x) = mx + b$$

$$f(x) = a(x+b)^2 + c$$

$$f(x) = a(x+b)^3 + c$$

$$f(x) = a \sin(bx+c) + d$$

$$f(x) = a \cos(bx+c) + d$$

$$f(x) = a \tan(bx+c) + d$$

$$f(x) = a \exp(bx+c) + d$$

$$f(x) = a \sqrt{bx+c} + d$$

$$f(x) = \frac{a}{x+b} + c$$

Ein Problem mit dem sich der Chemiker häufig konfrontiert sieht, ist das Unterscheiden von Isotopen. Erklären sie am Beispiel von D-Cl und H-Cl, jeweils in der Gasphase, wie sie ^{spektroskopisch} zwischen diesen in ihrer Chemie nahezu identischen Molekülen unterschieden können.

① Welche Modelle gibt es?

Teilchen im Kasten $E = \frac{h^2 n^2}{8m L^2}$

Rotation 2D $E = \frac{J^2}{2I} = m_L^2 \cdot \frac{h^2}{2I}$

3D $E = l(l+1) \cdot \frac{h^2}{2I}$

Schwingung

$$E = h \cdot f \left(v + \frac{1}{2} \right)$$

$$f = \frac{v}{2\pi} \left(\frac{D}{m} \right)^{1/2}$$

② Wie unterscheiden sich die Moleküle?

→ Masse eher konstant

Masse H \neq Masse D

Bindungsstärke fast gleich $D(\text{HCl}) = 478 \text{ N/m}$

$D(\text{DCl}) = 478 \text{ N/m}$

Bindungslänge ähnlich

③ Welches Modell passt?

Teilchen im Kasten: nein, eigentlich nur für e^- gut

Rotation: könnte klappen

Schwingung: könnte klappen

④ Wo liegen die Übergänge?

- Schwingung zuerst f ausrechnen
Annahme α stationär, H bzw D schwingen

$$f(\text{HCl}) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{D}{m} \right)^{1/2} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{478 \text{ N/m}}{1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}} \right)^{1/2}$$
$$= 8.515 \cdot 10^{13} \text{ Hz} \quad (\lambda = 3521 \text{ nm})$$

→ IR

$$f(\text{DCl}) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{D}{m} \right)^{1/2} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{478 \text{ N/m}}{2 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}} \right)^{1/2}$$
$$= 6.021 \cdot 10^{13} \text{ Hz} \quad (\lambda = 4979 \text{ nm})$$

→ IR

Beide Anregungen gut zugänglich

- Rotation: Wie groß ist jeweils I ?

$$I = \mu r^2$$

Wie lang ist r ?

$$r(\text{HCl}) = 1.274 \text{ \AA}$$

$$r(\text{DCl}) = 1.281 \text{ \AA}$$

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} = \frac{35.45 \cdot 1.00}{35.45 + 1.00} \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\mu(\text{HCl}) = 0.9726 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$I(\text{HCl}) = 2.636 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2$$

$$\mu(\text{DCl}) = 1.8932 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$I(\text{DCl}) = 5.188 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2$$

↳ gut unterscheidbar

Im Gas Rot in 3D

$$E(\text{HCl}) = l(l+1) \frac{\hbar^2}{2I} = l(l+1) = 2 \cdot 1095 \cdot 10^{-22} \text{ J}$$

$$E(\text{DCI}) = l(l+1) \frac{\hbar^2}{2I} = l(l+1) \cdot 1.0718 \cdot 10^{-22} \text{ J}$$

kleinster anregbarer Übergang $l=0 \rightarrow l=1$

$$\Delta E(\text{HCl}) = 4.219 \cdot 10^{-22} \text{ J}$$

$$\Delta E(\text{DCI}) = 2.1436 \cdot 10^{-22} \text{ J}$$

$$\nu(\text{HCl}) = 6.367 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$$

$$\lambda(\text{HCl}) = 4708 \cdot 10^{-4} \text{ m} = 470800 \text{ nm} \left. \vphantom{\lambda(\text{HCl})} \right\} \begin{array}{l} \text{Terahertz} \\ (\text{kurz vor} \\ \text{Radar}) \end{array}$$

$$\nu(\text{DCI}) = 3.235 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$$

$$\lambda(\text{DCI}) = 9.267 \cdot 10^{-4} \text{ m} = 926700 \text{ nm} \left. \vphantom{\lambda(\text{DCI})} \right\} \begin{array}{l} \text{Terahertz} \\ (\text{kurz} \\ \text{vor Radar}) \end{array}$$

⇒ wenig Energie also viele Niveaus immer angeregt, damit nicht unterscheidbar