

PHYSIKALISCH-CHEMISCHES INSTITUT

Übungen zur Einführung in die Physikalische Chemie II

im Sommersemester 2013

Prof. Dr. Petra Tegeder

Mathematische und Physikalische Grundlagen zur Thermodynamik

1. Aufgabe: Integral- und Differentialrechnung

- (a) Lösen Sie folgende in der Thermodynamik besonders häufig auftretenden Integrale ohne Formelsammlungen.

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} dx =$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx =$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot e^{-ax^2} dx =$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \cdot e^{-ax^2} dx =$$

$$\int_{x_0}^{x_c} \frac{1}{ax} dx =$$

$$\int_{x_0}^{x_t} -\frac{c}{x^2} dx =$$

- (b) Skizzieren Sie die oben genannten Funktionen. Achten Sie auf korrektes asymptotisches Verhalten.
- (c) Betrachten Sie die unten angegebene Verteilungsfunktion $F(\vec{r})$. Leiten Sie hieraus $F(r)dr$ ab, indem Sie zunächst in Kugelkoordinaten wechseln und nachfolgend über die Winkel θ und φ integrieren.

$$F(\vec{r}) = k \cdot e^{-ax^2} e^{-ay^2} e^{-az^2}$$

- (d) Normieren Sie $F(r)$ und berechnen Sie das erste und zweite Moment dieser normierten Verteilung, also $\langle r \rangle$ und $\langle r^2 \rangle$. Bestimmen Sie außerdem die Stelle r_{max} , an der $F(r)$ maximal wird. In welcher Reihenfolge nehmen $\langle r \rangle$, r_{rms} und r_{max} zu? Für r_{rms} gilt dabei die Beziehung:

$$r_{rms} = \sqrt{\langle r^2 \rangle}$$

- (e) Finden Sie eine Näherungslösung für das unten angegebene Integral, indem Sie $e^{-a_0x^2}$ in einer Taylor-Reihe entwickeln und die Entwicklung nach dem Term 4. Ordnung abbrechen.

$$\int_0^{1/\sqrt{a_0}} x^2 e^{-a_0x^2} dx =$$

2. Aufgabe: Physikalische Grundlagen

- (a) Bestimmen Sie das Minimum der Potentialfunktion $V(r)$.

$$V(r) = k \cdot \left[\frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^6} \right]$$

- (b) Skizzieren Sie $V(r)$. Machen Sie in Ihrer Skizze den attraktiven und den repulsiven Teil des Potentials kenntlich.
- (c) Geben Sie die Anzahl an Normalschwingungen für die folgenden Moleküle an: Wasser, Kohlendioxid, Acetylen und TNT. Wie viele Rotationsfreiheitsgrade besitzen die genannten Moleküle?
- (d) Skizzieren Sie die Normalschwingungen von Kohlendioxid und Wasser und klassifizieren Sie diese als symmetrisch/asymmetrisch bzw. als Valenzschwingung/Deformationsschwingung.
- (e) Wie lautet der Ausdruck für die Energieeigenwerte des Teilchens im unendlich hohen Kastenpotential, des starren Rotators und des harmonischen Oszillators? Ordnen Sie diese Eigenwerte nach zunehmender Energiedifferenz zwischen benachbarten Energieniveaus!

Keine Abgabe erforderlich. Die Übung wird in den Tutorien besprochen.