Hochschule RheinMain
Prof. Dr. D. Lehmann

SS 2023

Lösungen 1. Übungsblatt
Mathematische Methoden in der Quantenmechanik

Aufgabe 1: a) Das Mol war gerade so definiert, dass 1 Mol Teilchen mit einer Masse von x atomaren Masseneinheiten, $x\,\mathrm{u}$, gerade x Gramm sind. Der Wert ist

$$1\,\mathrm{Mol} \quad = \quad 6.022 \times 10^{23} \text{ Teilchen}$$

Ein Wasser-Molekül besteht aus 2 Wasserstoff-Atomen mit Masse je 1 u und einem Sauerstoff-Atom mit Masse 16 u, also hat 1 Mol Wasser eine Masse von 18 Gramm.

b) Der Druck P, P für pressure, ist definiert durch

$$P \quad = \quad \frac{F}{A} \quad = \quad \frac{\text{Force}}{\text{Area}} \quad = \quad \frac{\text{Kraft}}{\text{Fläche}}$$

Die Einheit ist Pascal,

$$1 \text{ Pa} \quad = \quad 1\,\frac{\text{N}}{\text{m}^2}$$

1 Bar sind 10^5 Pascal,

$$1 \text{ Bar} \quad = \quad 10^5 \text{ Pa} \quad = \quad 10^5\,\frac{\text{N}}{(100 \text{ cm})^2} \quad = \quad 10\,\frac{\text{N}}{\text{cm}^2}$$

Das ist in etwa der Standard-Atmosphärendruck oder der Wasserdruck in 10 Meter Wassertiefe und entspricht etwa der Gewichtskraft von 1 Liter Milch verteilt auf eine Fläche von 1 Quadratzentimeter. 1 Millibar sind dann 10^{-3} Bar,

$$1 \text{ mBar} \quad = \quad 10^{-3} \text{ Bar} \quad = \quad 10^2 \text{ Pa} \quad =: \quad 1 \text{ hPa}$$

Der Standard-Atmosphärendruck betragt also in etwa 1000 Millibar (1 Atmosphäre, 1 atm sind 1013 Millibar) oder 1000 Hektopascal, das ist dasselbe.

c) Nach dem idealen Gasgesetz ist das Volumen von 1 Mol Gas bei Standard-Atmosphärendruck gegeben durch

$$V \quad = \quad \frac{n \cdot R \cdot T}{P} \quad = \quad \frac{1 \text{ mol} \cdot 8.314\,\frac{\text{J}}{\text{mol K}}}{1000 \text{ hPa}} \times T \quad = \quad \frac{8.314\,\frac{\text{N m}}{\text{K}}}{10^5\,\frac{\text{N}}{\text{m}^2}} \times T \quad = \quad \frac{8.314}{10^5}\,m^3 \times \frac{T}{1\,\text{K}}$$

1 Liter sind 1 Kubikdezimeter,

$$1\,\text{L} \quad = \quad (1\,\text{dm})^3 \quad = \quad (0.1\,\text{m})^3 \quad = \quad 10^{-3}\,\text{m}^3$$

Also,

$$V \;=\; \frac{8.314}{10^5}\,10^3\,\mathrm{L}\;\times\;\frac{T}{1\,\mathrm{K}} \;=\; 8.314\cdot 10^{-2}\,\mathrm{L}\;\times\;\frac{T}{1\,\mathrm{K}}$$

und damit

$$V(T=0°\mathrm{C}=273\,\mathrm{K}) \;=\; 2.73\cdot 8.314\,\mathrm{L} \;\approx\; 22.70\ \text{Liter}$$

Wenn wir den genauen Atmospärendruck von 1013 Millibar nehmen anstatt 1000 Millibar, müssen wir das noch durch 1.013 teilen und bekommen dann

$$V(T=273\,\mathrm{K}, P=1013\,\mathrm{mBar}) \;=\; \frac{22.70}{1.013}\,\mathrm{L} \;=\; 22.4\ \text{Liter}\;\;,$$

an diese Zahl kann sich vielleicht noch der eine oder andere aus der Schule erinnern. Und bei Raumtemperatur $T = 20^0\,\mathrm{C} = 293\,\mathrm{K}$

$$V(T=293\,\mathrm{K}, P=1013\,\mathrm{mBar}) \;=\; \frac{8.314}{1.013}\cdot 2.93\,\mathrm{L} \;\approx\; 24.0\ \text{Liter}\;\;.$$

Aufgabe 2: a) Kraft ist Masse mal Beschleunigung, $F = ma$, und Beschleunigung ist Geschwindigkeitsänderung pro Zeit, $a = \Delta v/\Delta t$. Impuls ist Masse mal Geschwindigkeit, $p = mv$. Also ist

$$F \;=\; ma \;=\; m\frac{\Delta v}{\Delta t} \;=\; \frac{\Delta(mv)}{\Delta t} \;=\; \frac{\Delta p}{\Delta t}\;\;,$$

Kraft ist Änderung des Impulses pro Zeiteinheit. Wie im Aufgabentext beschrieben, erfährt ein Teilchen i, welches mit Geschwindigkeitskomponente $v_{i,x}$ auf die Wand bei $x = L$ zufliegt, eine Impulsänderung von

$$\Delta p_{i,x} \;=\; 2mv_{i,x}$$

Ist dieses Teilchen gerade an der Wand bei $x = L$ reflektiert worden, so muss es die Strecke $2L$ zurücklegen, bevor es an dieser Wand erneut reflektiert wird. Die Zeit, die es dazu braucht, ist gegeben durch

$$\Delta t \;=\; \frac{2L}{v_{i,x}}$$

Also wird durch das i-te Teilchen eine Kraft

$$F_{i,x=L} \;=\; \frac{\Delta p_{i,x}}{\Delta t} \;=\; \frac{2mv_{i,x}}{\frac{2L}{v_{i,x}}} \;=\; \frac{mv_{i,x}^2}{L}$$

auf die Wand bei $x = L$ ausgeübt. Die Gesamtkraft ist dann also

$$F_{x=L} \;=\; \sum_{i=1}^{N}\frac{m\,v_{i,x}^2}{L}$$

b) Der Druck P bei $x = L$ ist dann also

$$P_{x=L} \;=\; \frac{F_{x=L}}{L^2} \;=\; \sum_{i=1}^{N} \frac{m\, v_{i,x}^2}{L^3} \;=\; \frac{m}{V} \sum_{i=1}^{N} v_{i,x}^2$$

mit dem Würfel-Volumen $V = L^3$.

c) Wir bekommen

$$\begin{aligned} P \cdot V \;&=\; m \sum_{i=1}^{N} v_{i,x}^2 \;\approx\; m\, \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{N} (v_{i,x}^2 + v_{i,y}^2 + v_{i,z}^2) \;=\; \frac{m}{3}\, N\, \langle v^2 \rangle \\ &=\; \frac{2}{3}\, N\, \frac{m}{2}\, \langle v^2 \rangle \;=\; \frac{2}{3} \cdot N \cdot \langle E_{\mathrm{kin}} \rangle \end{aligned}$$

d) Mit dem idealen Gasgesetz

$$P \cdot V \;=\; n \cdot R \cdot T$$

bekommen wir dann

$$n \cdot R \cdot T \;=\; \frac{2}{3} \cdot N \cdot \langle E_{\mathrm{kin}} \rangle$$

und damit

$$\langle E_{\mathrm{kin}} \rangle \;=\; \frac{3}{2}\, \frac{n}{N}\, R \cdot T \;=\; \frac{3}{2}\, \frac{1}{N/n}\, R \cdot T \;=\; \frac{3}{2}\, \frac{1}{N_{\mathrm{A}}}\, R \cdot T$$

mit $N_{\mathrm{A}} = N/n$ gleich der Anzahl Teilchen pro Mol. Also

$$\langle E_{\mathrm{kin}} \rangle \;=\; \frac{3}{2}\, \frac{R}{N_{\mathrm{A}}}\, T \;=\; \frac{3}{2}\, k_{\mathrm{B}}\, T$$

mit der Boltzmann-Konstante

$$k_{\mathrm{B}} \;=\; \frac{R}{N_{\mathrm{A}}} \;=\; \frac{8.314\, \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{mol\,K}}}{6.022 \times 10^{23}\, \mathrm{mol}^{-1}} \;=\; \frac{8.314}{6.022} \times 10^{-23}\, \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}} \;=\; 1.38 \times 10^{-23}\, \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}}$$

Mit

$$1\,\mathrm{eV} \;=\; 1.602 \times 10^{-19}\,\mathrm{J}$$

bekommen wir dann

$$\begin{aligned} k_{\mathrm{B}} \;&=\; 1.38 \times 10^{-23}\, \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}} \;=\; \frac{1.38}{1.602} \times \frac{10^{-23}}{10^{-19}}\, \frac{\mathrm{eV}}{\mathrm{K}} \;=\; 0.862 \times 10^{-4}\, \frac{\mathrm{eV}}{\mathrm{K}} \\ &=\; 8.62 \times 10^{-5}\, \frac{\mathrm{eV}}{\mathrm{K}}\;. \end{aligned}$$