

# Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

Übungsleiter: Tanja Asthalter · Zimmer 9-356 · Tel. 4464 · e-mail [t.asthalter@ipc.uni-stuttgart.de](mailto:t.asthalter@ipc.uni-stuttgart.de)

**Klausur**

**15. 3. 2004**

---

## **Aufgabe 1**

**20 Punkte**

Beantworten Sie die folgenden Fragen kurz.

- a) Welche Bedingungen muß eine Funktion erfüllen, um als quantenmechanische Wellenfunktion geeignet zu sein?
- b) Wie hängt die Energie eines harmonischen Oszillators von der Schwingungsquantenzahl  $v$  ab?
- c) Wie lauten die drei Hundschen Regeln?
- d) Wie hängen die Lösungen der stationären Schrödingergleichung von der Zeit ab?
- e) Was ist eine Auswahlregel? Nennen Sie ein Beispiel.

## Aufgabe 2

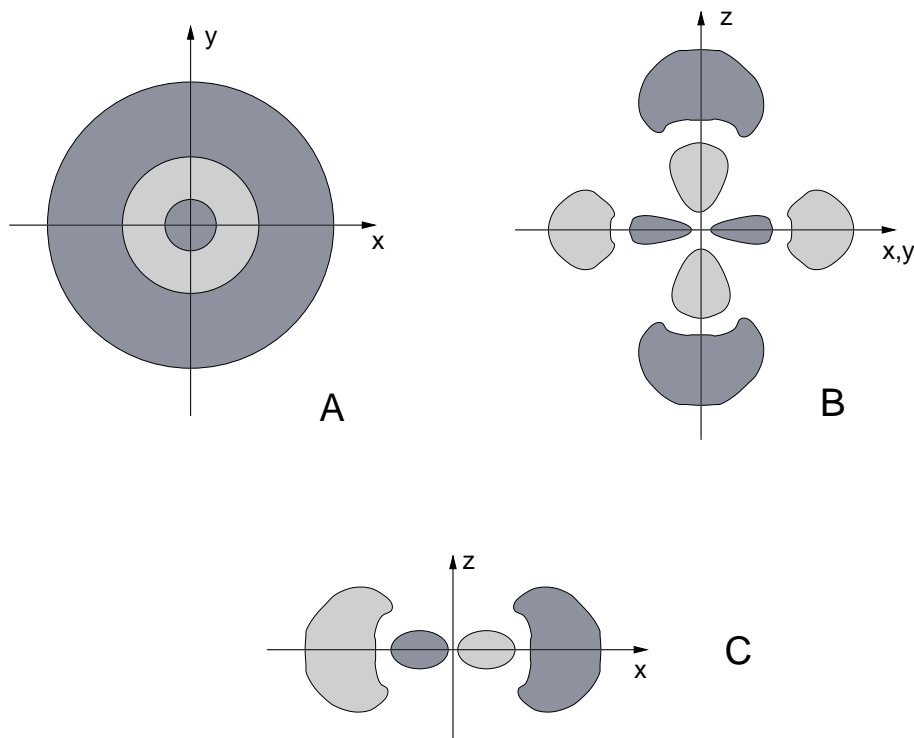
20 Punkte

- a) Stellen Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung für ein Elektron der Masse  $m$  auf, das sich ohne Einwirkung durch ein äußeres Potential beliebig frei in einer Dimension bewegen kann.
- b) Lösen Sie die Schrödingergleichung mit Hilfe des Ansatzes  $\psi(x) = A \cdot \sin(kx)$ .
- c) Welche Energieeigenwerte sind erlaubt? Was ändert sich **qualitativ**, wenn man das Teilchen in einen Kasten der Länge  $L$  mit unendlich hohen Wänden sperrt?

### Aufgabe 3

20 Punkte

Gegeben sind die Schnitte durch folgende drei Atomorbitale:



a) Geben Sie für jedes der Atomorbitale die Haupt- und Nebenquantenzahlen an.

b) (Welches der AOs wird wohl durch die (unnormierte) Wellenfunktion

$$\psi_1(r, \varphi, \vartheta) = e^{-r/r_0} \cdot \left[ 2 \left( \frac{r}{r_0} \right)^2 - 4 \frac{r}{r_0} + 1 \right]$$

beschrieben, wobei  $r_0$  der Bohrsche Radius ist?) Welche der drei Wellenfunktionen hängt nicht von den Winkeln  $\vartheta$  und  $\varphi$  ab?

c) Geben Sie die Quantenzahlen der Wellenfunktion

$$\psi(r, \varphi, \vartheta) = A \cdot e^{-r/r_0} \cdot \left( \frac{r}{r_0} - 1 \right)$$

an.

d) Normieren Sie die Wellenfunktion  $\psi$ . Machen Sie hierfür die Substitution  $X = r/r_0$  und verwenden Sie die Produktregel der Integration

$$\int u'v = uv - \int uv'$$

#### Aufgabe 4

##### 16 Punkte

Gegeben ist das N-Atom mit der Elektronenkonfiguration  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ .

- Welches Termsymbol hat der Grundzustand des N-Atoms?
- Skizzieren Sie schematisch die besetzten und unbesetzten Molekülorbitale des  $N_2$ -Moleküls.
- Welche Multiplizität hat der Grundzustand von  $N_2$ , welche der von  $N_2^+$ ?
- Kann man beim  $N_2$ -Molekül ein Rotationsspektrum beobachten? Begründen Sie Ihre Antwort.

### Aufgabe 5

12 Punkte

- a) Bestimmen Sie die Energie der Rotationsübergänge des  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ -Moleküls.
- b) Was passiert, wenn sich in höheren Rotationszuständen der Bindungsabstand vergrößert? Beschreiben Sie qualitativ den Einfluß dieser Zentrifugaldehnung auf den Abstand benachbarter Linien im Rotationsspektrum!

## Aufgabe 6

### 12 Punkte

- a) Unter welchen Bedingungen kann man 1. das Schwingungsspektrum, 2. das Rotations-Schwingungsspektrum, 3. das Rotations-Ramanspektrum eines Moleküls beobachten?
- b) Skizzieren Sie schematisch die verschiedenen in einem Raman-Spektrum auftretenden Linien und benennen Sie sie!

*Konstanten:*

Plancksches Wirkungsquantum	$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
Elektronenladung	$e_0 = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Elektronenmasse	$m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Atomare Masseneinheit	$u = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	$c_0 = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$
Bohrscher Radius	$r_0 = 0.529177 \text{ Å}$