Übungen zur Vorlesung
Physikalische Chemie II

Übungsleiter: Tanja Asthalter · Zimmer 9–356 · Tel. 4464 · e-mail t.asthalter@ipc.uni-stuttgart.de

Übungsblatt 25 — 7. 2. 2006

Aufgabe 25.1

a) Lösen Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung für ein Teilchen der Masse m, das sich ohne Einwirkung durch ein äußeres Potential längs einer Kreisbahn mit dem Radius r bewegen kann, und bestimmen Sie die Energieeigenwerte in Abhängigkeit von der Quantenzahl n. Benutzen Sie dazu die sphärischen Koordinaten $x = r\cos\varphi$, $y = r\sin\varphi$, in denen der Hamiltonoperator als

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right)$$

geschrieben werden kann, und verwenden Sie die Bedingung r = const. sowie den Ansatz

$$\psi(\varphi) = A\sin(n\varphi)\ .$$

b) Die Wellenfunktion ist bezüglich Rotation um 2π invariant:

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)\ .$$

Leiten Sie daraus mit Hilfe des Additionstheorems

$$\sin(\alpha+\beta) = \sin\alpha\cdot\cos\beta + \sin\beta\cdot\cos\alpha$$

eine Bedingung für die erlaubten Werte von n her.

c) Bestimmen Sie den Normierungsfaktor A durch Integration von φ über 2π.

Mathematischer Hinweis:

$$\int \sin^2(n\varphi)\mathrm{d}\varphi = \frac{\varphi}{2} - \frac{\sin(2\varphi\cdot n)}{4n}$$

Aufgabe 25.2

Die ersten Kugelflächenfunktionen lauten:

$$Y_0^0(\vartheta,\varphi) = N_0^0;\quad Y_1^1(\vartheta,\varphi) = -N_1^1\sin\vartheta e^{i\varphi};\quad Y_1^0(\vartheta,\varphi) = N_1^0\cos\vartheta;\quad Y_1^{-1}(\vartheta,\varphi) = N_1^1\sin\vartheta e^{-i\varphi}$$

a) Bestimmen Sie den Normierungsfaktor N_1^1 durch Integrieren über den differentiellen Raumwinkel $\mathrm{d}\Omega = \sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta\mathrm{d}\varphi$.

b) Zeichnen Sie die Funktion Y_1^{-1} in der x,z-Ebene in der Parameterdarstellung (quantitativ). Zeichnen Sie dazu die Schnittgerade des Kegels mit einem bestimmten Wert ϑ = const., und tragen Sie den Funktionswert auf dieser Geraden ab.

c) Zeigen Sie, daß Y_0^0 und Y_1^0 orthogonal zueinander sind.

Mathematischer Hinweis:

$$\int \sin^3 x\mathrm{d}x = -\frac{3}{4}\cos x + \frac{1}{12}\cos 3x$$

Aufgabe 25.3

a) Geben Sie den Ausdruck für die Energieeigenwerte des starren Rotators mit raumfreier Achse an. Berechnen Sie mit Hilfe der Bindungslänge von 129 pm die Frequenz des Übergangs $J = 0 \rightarrow J = 1$ für Chlorwasserstoff $H^{35}Cl$.

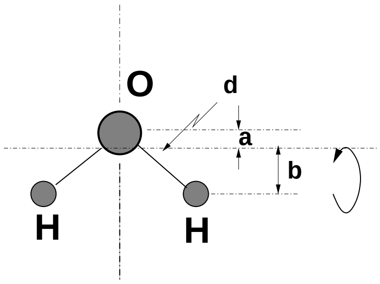
b) Skizzieren Sie das Energieniveauschema des starren Rotators! Die Auswahlregel für Anregungen lautet $\Delta J = +1$. Da sich nicht alle Moleküle im Rotations-Grundzustand (J=0) befinden, können auch Moleküle mit J = 1,2,3 ... weiter angeregt werden. Zeichnen Sie drei mögliche Anregungen in Ihr Energieniveauschema ein.

bitte wenden !!!

Aufgabe 25.4

Wenn Sie ein Fertiggericht in die Mikrowelle stellen und diese einschalten, werden die Rotationsniveaus der darin enthaltenen Wassermoleküle mit der geeigneten Energie angeregt, wodurch sich die Speisen erwärmen.

a) Betrachten Sie das Wassermolekül als starren Rotator, der sich um eine horizontale Achse (siehe Skizze) dreht, die durch den Massenschwerpunkt des Moleküls geht.



Berechnen Sie die Lage des Schwerpunktes (denken Sie sich die Masse der beiden H-Atome in einem Punkt vereinigt, der auf halbem Wege zwischen beiden liegt). Berechnen Sie hieraus das Trägheitsmoment des Wassermoleküls bezüglich der Drehachse gemäß

$$I = \sum_i m_i r_i^2 \quad ,$$

wobei m_i die Masse des i-ten Atoms und r_i dessen kürzester Abstand von der Rotationsachse ist.

b) Berechnen Sie hieraus die Energie (in eV) und Wellenlänge des Rotationsübergangs $J = 0 \rightarrow J = 1$.

c) Vergleichen Sie die erhaltene Wellenlänge mit der Welelenlänge eines typischen Mikrowellenherdes (12,2 cm). Kann man die Funktionsweise der Mikrowelle auf Anregung von Rotationsniveaus des Wassers zurückführen? Diskutieren Sie!

Der Bindungswinkel von H_2O betrage 104,5° und die O-H-Bindungslänge d = 0,957 Å.

Die Übungen sind im PDF-Format erhältlich unter http://www.ipc.uni-stuttgart.de/~tanja/pcuebungen.html .