

# Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

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

## Übungsblatt 27

1. 2. 2005

### Aufgabe 27.1

- a) Für das 1s-Orbital des Wasserstoffatoms lautet die Wellenfunktion

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0},$$

wobei  $a_0 = \varepsilon_0 \hbar^2 / \pi m_e e^2$  der Bohrsche Radius ist. Die *radiale* Wahrscheinlichkeitsdichte, das Elektron im Abstand  $r$  vom Kern zu finden, ist gleich

$$P(r) \propto \psi^2 \cdot 4\pi r^2.$$

Berechnen Sie das Maximum der radialen Wahrscheinlichkeitsdichte und vergleichen Sie mit dem Ergebnis aus der vorigen Teilaufgabe.

- b) Berechnen Sie die Erwartungswerte  $\langle r \rangle$  und  $\langle 1/r \rangle$  und vergleichen Sie mit dem Ergebnis aus der vorigen Teilaufgabe. Warum sind die Werte verschieden?  
c) Berechnen Sie den Erwartungswert  $\langle l_z \rangle$  mit

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

des  $2p_+$ -Orbitals

$$\psi_{211} = N_{211} r e^{-r/2a_0} \sin \vartheta e^{i\varphi}$$

Tip: Berechnen Sie zunächst das Integral über  $\varphi$ .

*Mathematischer Hinweis:*

$$\int r^3 e^{-2r/a_0} dr = -\frac{a_0}{8} (3a_0^3 + 6a_0^2 r + 6a_0 r^2 + 4r^3)$$

### Aufgabe 27.2

- a) Skizzieren Sie den Radialteil  $R(r)$  folgender Orbitale des Wasserstoffatoms: 3s,  $3p_z$ ,  $3d_{xy}$ . Geben Sie für jedes dieser Orbitale die Anzahl und Art der Knotenflächen an!  
b) Geben Sie für die folgenden Orbitale die Werte der Quantenzahlen  $n$  und  $l$  an:

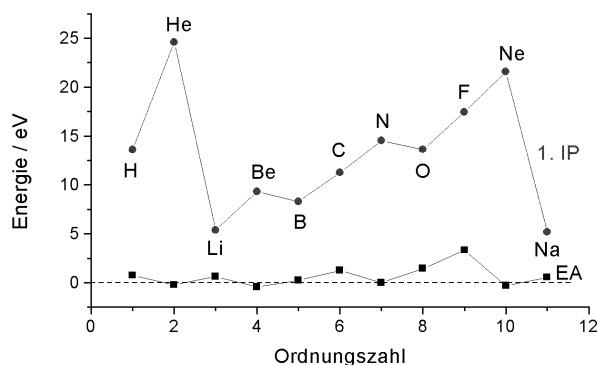
$$\psi_1(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0}$$

$$\psi_2(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{r}{a_0} \cdot e^{-r/2a_0} \cos \vartheta$$

*bitte wenden !!!*

### Aufgabe 27.3

Gegeben sind die 1. Ionisierungsenergien und die Elektronenaffinitäten der Elemente der ersten und zweiten Periode (siehe Graphik).



- Diskutieren Sie den Gang von IE und EA mit der Ordnungszahl. Was bedeuten die negativen Werte der EA von He, Be, N und Ne? Begründen Sie, warum im Falle von Fluor die 1. IE nicht identisch mit der EA ist.
- Die drei Ionisierungsenergien von Li betragen 5,4 eV, 75,6 eV und 122,4 eV. Bestimmen Sie aus diesen Werten effektive Kernladungen und Abschirmkonstanten für das 1s- und das 2s-Orbital.
- Vergleichen Sie das Emissionsspektrum des neutralen Li-Atoms (nur das Leuchtelektron sei angeregt) mit demjenigen des Wasserstoffatoms:
  - Was geschieht mit der Lyman-Serie (Endzustand  $n = 1$ )?
  - Ist die Balmer-Serie bei Li zu kürzeren oder zu längeren Wellenlängen verschoben als bei H?
  - Zeichnen Sie für beide Atome die Energiezustände zu  $n = 2$  und  $n = 3$  und die erlaubten Übergänge und kommentieren Sie die Unterschiede.

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