



Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

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

Übungsblatt 22

15. 1. 2003

Aufgabe 22.1

- 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:

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

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

Aufgabe 22.2

Stellen Sie den Hamiltonoperator \hat{H} für die Moleküle H₂⁺ und H₂ auf. Skizzieren Sie die Potentialkurve von H₂ und geben Sie an, welche Teile von \hat{H} beim Gleichgewichtsabstand und für $R \rightarrow \infty$ wichtig sind.

Aufgabe 22.3

Geben Sie aufgrund der Hundschen Regeln die energetische Reihenfolge der folgenden möglichen Zustände des Stickstoffatoms (2s²2p³) an: ²D, ⁴S und ²P.

- a) Skizzieren Sie für jeden dieser Zustände die Besetzung der Orbitale 2s und 2p ($m_l = -1, 0, 1$).
- b) Geben Sie für den ²D-Zustand S , L , und alle möglichen Werte des Gesamtdrehimpulses J an.
- c) Geben Sie die energetische Reihenfolge der verschiedenen ²D _{J} -Zustände an!

Aufgabe 22.4

Bei der Aufstellung von hybridisierten Wellenfunktionen werden aus einer s-Funktion ψ_s und einer bis drei p-Funktionen (ψ_{p_x} , ψ_{p_y} , ψ_{p_z}) eine entsprechende Anzahl Basisorbitale gebildet, die genauso wie die Ausgangsorbitale orthonormiert sind.

- a) Bestimmen Sie die beiden Hybridorbitale, d.h. deren Koeffizienten in der Basis der Ausgangsorbitale $\{\psi_s, \psi_{p_x}\}$ für ein sp-Hybrid, dessen „sp-Keulen“ längs der x -Achse orientiert sind. Normieren Sie die erhaltenen Orbitale.
- b) Bestimmen Sie die drei Hybridorbitale (Ausgangsortorbitale $\{\psi_s, \psi_{p_x}, \psi_{p_y}\}$) für ein sp²-Hybrid. Ein Orbital sei längs der x -Achse orientiert, die beiden anderen in einem Winkel von 120° in der xy -Ebene. Normieren Sie die erhaltenen Orbitale.

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