



Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

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

Übungsblatt 24

27. 1. 2004

Aufgabe 24.1

Die Streckschwingung des H_2 -Moleküls wird im Raman-Spektrum bei einer Wellenzahl von 4400 cm^{-1} beobachtet.

- Berechnen Sie die reduzierte Masse und die Kraftkonstante der Bindung.
- Wie ändert sich die Wellenzahl bei schwerem Wasserstoff D_2 , wenn die Stärke der Bindung in erster Näherung gleich bleibt?

Aufgabe 24.2

- 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!
- 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 24.3

Stellen Sie den Hamiltonoperator \hat{H} für die Moleküle H_2^+ und H_2 auf. Skizzieren Sie die Potentialkurve von H_2 und geben Sie an, welche Teile von \hat{H} beim Gleichgewichtsabstand und für $R \rightarrow \infty$ wichtig sind.

Aufgabe 24.4

Geben Sie aufgrund der Hundschen Regeln die energetische Reihenfolge der folgenden möglichen Zustände des Stickstoffatoms ($2s^2 2p^3$) an: ^2D , ^4S und ^2P .

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

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