Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Übungsblatt 12
zur Vorlesung Physikalische Chemie II
WS 2012/13 Prof. E. Bartsch

12.1 L Zeichnen Sie schematisch für die Orbitale 1s, 2s, 3s, 4s, $2p_z$, $3p_z$ und $4p_z$ des H-Atoms

a) die Wellenfunktion gegen den Kernabstand r;
b) die Wahrscheinlichkeitsdichte gegen den Kernabstand r;
c) die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte gegen den Kernabstand r.
d) Zeichnen Sie für die Orbitale $2p_z$, $3p_z$ und $4p_z$ die Wellenfunktion **und** die Wahrscheinlichkeitsdichte gegen die z-Koordinate-

12.2 M Berechnen Sie den Radius der Kugel, die ein Gebiet umschließt, das eine 90 %ige Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das 1 s Elektron des Wasserstoffs hat.

Hinweis: Die transzendente Gleichung $\left(1+x+\frac{x^2}{2}\right)\exp(-x)=0.1$ hat die Lösung $x \approx 5.322$.

Das Integral $\int_0^R \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2 dr$ hat die Lösung: $-\frac{a_0}{4}\left[\exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)\left(2r^2+2a_0 r+a_0^2\right)\right]_0^R$

12.3 M Der Erwartungswert $\langle A \rangle$ einer Observablen A mit dem zugehörigen Operator $\hat{A}$ ist definiert als

$$\langle A \rangle = \int_V \psi^* \hat{A} \psi dV$$

In welchem Orbital des Wasserstoffatoms ist das Elektron im Mittel weiter vom Kern entfernt, im 2s oder im 2p? Berechnen Sie dazu die Erwartungswerte des Abstandes $\langle r \rangle$ für die folgenden Orbitale des H-Atoms

a) ψ_{200} b) ψ_{21-1}

Hinweise:

$$\int_0^\infty r^n \exp\{-r/\alpha\} dr = n!\alpha^{n+1} \quad \text{und} \quad \int \sin^3\vartheta d\vartheta = -\cos\vartheta + \frac{1}{3}\cos^3\vartheta$$

$$\psi_{200} = \sqrt{\frac{1}{32\pi a_0^3}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \qquad \psi_{21-1} = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\sin\vartheta\exp(-i\varphi)$$

12.4 M Ein wasserstoffähnliches 1s-Orbital in einem Atom mit der Ordnungszahl Z hat die Wellenfunktion $\psi_{1s} = \psi_{100} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right)$.

a) Ermitteln Sie die radiale Verteilungsfunktion P(r) und leiten Sie einen Ausdruck für den wahrscheinlichsten Abstand des Elektrons vom Kern her!

b) Berechnen Sie den mittleren und den wahrscheinlichsten Abstand für Wasserstoff, Helium und Fluor! Stellen Sie die Ergebnisse in einer Tabelle zusammen

c) Skizzieren Sie die Wellenfunktion und die radiale Verteilungsfunktion für den Fall des Wasserstoffatoms in Abhängigkeit vom Radius (Abstand) *r*, tragen Sie in die Skizze den wahrscheinlichsten und den mittleren Abstand ein!

Hinweis: $P(r) = \frac{dW(r)}{dr} = \int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \Psi_{100}^{*} \Psi_{100} r^2 \sin\vartheta \, d\varphi \, d\vartheta$