

Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
WS2008/2009

Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II
Prof. Dr. E. Bartsch
(L = leicht, M = mittel, S = schwer)
12. Übungsblatt

- 12.1 L Die Bindungslänge von $^1\text{H}^{19}\text{F}$ ist 91,7 pm. Die Rotationsachse liegt im Schwerpunkt des Moleküls. In welchen Abständen zu ^{19}F und ^1H liegt die Rotationsachse?
- 12.2 L Die Rotationskonstante des Molekül $^{127}\text{I}^{79}\text{Br}$ ist $B = 0,1142 \text{ cm}^{-1}$. Die Atommassen sind $m(^{127}\text{I}) = 126,90 m_u$ und $m(^{79}\text{Br}) = 78,92 m_u$ ($m_u = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$). Berechnen Sie die Bindungslänge von $^{127}\text{I}^{79}\text{Br}$.
- 12.3 L Berechnen Sie das Trägheitsmoment, den Betrag des Drehimpulses und die Energie der Rotation für den Zustand $J = 1$ des $^{16}\text{O}_2$ – Moleküls (Bindungslänge: 120,8 pm, Masse $^{16}\text{O}: 15,99 m_u$).
- Hinweis: üblicherweise wird bei der Behandlung von Rotationen in der Molekülspektroskopie der Buchstabe J für die Rotationsquantenzahl benutzt, um eine Verwechslung mit der Nebenquantenzahl ℓ zu vermeiden. Mathematisch sind die Behandlung der Molekülrotation und der Kreisbewegung des Elektrons um den Atomkern analog, d.h. man erhält denselben Ausdruck für die Energieeigenwert, nur dass bei der Molekülrotation ℓ durch J ersetzt wird.
- 12.4 S Ein Teilchen mit der Masse m ist in einen rechteckigen Potentialkasten mit den Kantenlängen a und b in x- bzw. y- Richtung eingeschlossen. Für das Potential gilt:
- $$V(x, y) = 0 \text{ für } 0 \leq x \leq a \text{ und } 0 \leq y \leq b \text{ sowie } V(x, y) = \infty \text{ sonst.}$$
- a) Bestimmen Sie die Eigenfunktionen und Eigenwerte für das Teilchen im zweidimensionalen Kasten durch ausführliche Rechnung!
- b) Geben Sie die Anzahl der Zustände und die Anzahl der Energieniveaus im Bereich zwischen $E=0$ und $E=2h/(ma^2)$ für einen quadratischen Potentialkasten $a = b$ an!

12.5M Zeigen Sie durch explizite Lösung der Integrale, dass für das H-Atom die Funktionen ψ_{100} und ψ_{200} orthogonal sind.

$$\psi_{100} = \sqrt{\frac{1}{\pi a^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a}}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{2\pi a^3}} \cdot \left(2 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$$

Hinweis: $\int_0^{\infty} r^n e^{-r/\alpha} dr = n! \alpha^{n+1}$