

TC PC II (Jaquet)

SS2003 1. Aufgabenblatt

Abgabe: bis Di., 29. April um 18 Uhr, Briefkasten vor

Dekanat

Wiederholungen zu TCPC I (siehe Atkins: Physikalische Chemie (Auflage 1996), Kapitel 11, 12 und 13):

1) Zwei unnormierte Wellenfunktionen von angeregten Zuständen des H-Atoms lauten

(a) $\psi = (2 - \frac{r}{a_0})e^{-\frac{r}{a_0}}$

(b) $\psi = r \sin \theta \cos \theta e^{-\frac{r}{2a_0}}$

Normieren Sie beide Funktionen auf 1.

2) Verifizieren Sie, dass eine Funktion der Form e^{-gx^2} eine Lösung der Schrödinger-Gleichung eines harmonischen Oszillators für den Grundzustand ist, und drücken Sie g durch die Masse und die Kraftkonstante des harmonischen Oszillators aus.

3) Zeigen Sie durch explizite Integration, dass (a) wasserstoffähnliche 1s- und 2s-Orbitale und (b) $2p_x$ - und $2p_y$ - Orbitale orthogonal sind.

TC PC II (Jaquet)

SS2003 1. Aufgabenblatt

Abgabe: bis Di., 29. April um 18 Uhr, Briefkasten vor

Dekanat

Wiederholungen zu TCPC I (siehe Atkins: Physikalische Chemie (Auflage 1996), Kapitel 11, 12 und 13):

1) Zwei unnormierte Wellenfunktionen von angeregten Zuständen des H-Atoms lauten

(a) $\psi = (2 - \frac{r}{a_0})e^{-\frac{r}{a_0}}$

(b) $\psi = r \sin \theta \cos \theta e^{-\frac{r}{2a_0}}$

Normieren Sie beide Funktionen auf 1.

2) Verifizieren Sie, dass eine Funktion der Form e^{-gx^2} eine Lösung der Schrödinger-Gleichung eines harmonischen Oszillators für den Grundzustand ist, und drücken Sie g durch die Masse und die Kraftkonstante des harmonischen Oszillators aus.

3) Zeigen Sie durch explizite Integration, dass (a) wasserstoffähnliche 1s- und 2s-Orbitale und (b) $2p_x$ - und $2p_y$ - Orbitale orthogonal sind.