

Übg. 4: Übungen zur Physikalischen und Theoretischen Chemie I

Teil TC, Jan/Feb. 2003

Hier: TC1

Ausgabe Fr., 5.02.03 (oder Internet), Abgabe: bis Mi, 31.01.03, z.B. Briefkasten AR-K6

16) Diskutiere die π -Elektronen-Systeme von $(CH)_N$ -Ringen. Der Umfang ist $2\pi R = N \cdot D$, D ist der $C-C$ -Abstand. Die Orbitalenergien sind $E_m = m^2/2\mu R^2$. Mache eine Tabelle mit 5 Spalten für $N=3-10$, E_0, E_1, E_2, E_{HOMO} . Benutze für Energien die Einheit $[0.001 * 2\pi^2/\mu D^2]$. Zeichne ein Diagramm $N=3-10$, $E=0-120$ [Einheit] mit Kurven für E_0, E_1, E_2 . Verbinde die E_{HOMO} -Punkte durch eine dicke Linie. a) Welche π -Elektronenzahlen von Neutralsystemen sind energetisch besonders günstig? b) Welche π -Elektronenzahlen sind energetisch besonders ungünstig? c) Wie stabil ist das System $(C_3H_3)^{3-}$ mit abgeschlossener Schale? d) Wie variiert die Energie zu fixer Quantenzahl mit der System-Größe? e) Wie ist der allgemeine Zusammenhang zwischen gefüllter Schale und Energie? f) Was erwarten Sie für die Stabilitäten der s^2p^6 -Schale von $Na^+, Ne, F^-, O^{2-}, N^{3-}$?

17) Der Hamiltonoperator für einen harmonischen Oszillator lautet $H = -1/2\mu \cdot d^2/dx^2 + k/2 \cdot x^2$. Setze $\psi = \exp(-\sqrt{k\mu}x^2/2)$ in die Schrödingergleichung ein und zeige, dass ψ tatsächlich eine Eigenfunktion ist. Welchen Wert hat der Eigenwert?

18) Die Schwingungsquanten von H_2 betragen $4 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$. In atomaren Einheiten ist $\Delta E = \sqrt{k/\mu}$. a) wie groß ist μ in U und in a.u.? b) Wie groß ist ΔE in eV und in a.u.? c) Wie groß ist k in a.u. und in N/cm? — Wie groß ist die Nullpunkts-Schwingungs-Ortsverschmierung der Wasserstoffkerne?: d) Bei welchem x_0 in a.u. ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf $1/e$ des Maximalwerts abgefallen? ψ siehe Aufgabe 17. e) Wieviele % der Bindungslänge von 86 pm überdeckt die Kernverschmierung $2x_0$ mindestens (selbst bei $T = 0\text{K}$)?

19) Es sind zwei Spinvektoren gegeben: $up = (\cos \alpha/\sqrt{2}; \sin \alpha/\sqrt{2}; +1/2)\hbar$ und $down = (\cos \beta/\sqrt{2}; \sin \beta/\sqrt{2}; -1/2)\hbar$. Der Summenvektor soll zum Triplett-Drehimpuls $l = 1$ gehören: $up + down = (\dots; \dots; 0)\hbar$. Die Länge davon muß nach der Quantenmechanik $\sqrt{1 \cdot 2}\hbar$ sein. Daraus erhält man eine Bedingung für $\cos(\alpha - \beta)$. Wie liegen die beiden Spinvektoren zueinander? Wie groß ist der Winkel zwischen zwei "parallelen" up- und down-Spins?

20) Zwei bekannte Cyaninfarbstoffe sind $[R_2N \cdot \Phi \cdot CH \cdot \Phi \cdot NR_2]Cl$ und $[R_2N \cdot \Phi \cdot N \cdot \Phi \cdot NR_2]Cl$. Zeichne je eine Lewis-Grenzformel mit π -Kette und "Henkeln". Wieviele π -Paare gibt es in den beiden Ketten? Welcher der beiden Farbstoffe sieht blau, welcher grün aus?