

Übg. 5: Übungen zur Physikalischen und Theoretischen Chemie I

Teil TC, Jan./Feb. 2003

Hier: TC1

Ausgabe Fr., 7.02.03 (oder Internet), Abgabe: bis Mi, 12.02.03, z.B. Briefkasten AR-K6

21) Diskutiere Atome halbklassisch: Die Elektronen sind um den Kern mit Ladung $+Z \cdot e$ am Koordinatenursprung in jeder Richtung ortsverschmiert zwischen $+R$ und $-R$, also $\bar{x} = 0$ und $\Delta x = R$, was dem Atomradius entspricht. Die mittlere potentielle Energie eines Elektrons ist dann $Ze \cdot -e/R$. Jedes Elektron hat auch verschmierte Geschwindigkeit, mit Impuls $\bar{p} = 0$ und kinetischer Energie $T = p^2/2m$. $p^2 = \Delta p^2$ ergibt sich aus der Heisenberg'schen Bedingung $\Delta x \cdot \Delta p \approx n$. Stationäre Zustände mit Energie E_n erhält man aus der Bedingung $dE/dR = 0$. Bestimme optimalen Orbitalradius, Geschwindigkeitsbetrag, T, V, E und das "Virialverhältnis" $T : V : E$.

22) In einem Atom mit n Elektronen ist die scheinbare Energie eines Elektrons, die Orbitalenergie, $\epsilon = h + (n - 1) \cdot J$. Da ist $h =$ kinetische + Kernanziehungs-Energie, J die Abstoßungsenergie von einem anderen Elektron. Die atomare Gesamtenergie ist $E = n \cdot h + n(n - 1)/2 \cdot J$. Betrachte ein Übergangsmetallatom mit $n = 3$ Valenzelektronen. Diskutiere die 3 möglichen Konfigurationen d^3, d^2s, ds^2 . Wie groß sind die Energien E und die Orbitalenergien ϵ_s und ϵ_d in den drei Fällen? Nimm die Werte $h_s = -15eV$, $h_d = -17eV$, $J_{ss} = 2eV$, $J_{sd} = 3,5eV$, $J_{dd} = 5eV$.

23) Zeichne Radialwellenfunktion $R(r)$, Radialdichte $D(r) = 4\pi r^2 R(r)^2$ und Konturliniendiagramm der Orbitalfunktion in einer Ebene: von $4p_x, 2p_+, 3d_{z^2}$.

24) Ordne die Orbitale $1s$ bis $6s$ von Cer a) nach ihrer Ausdehnung, b) nach ihrer Energie. Welche Orbitale sind Valenzorbitale mit hoher Energie? Welches sind Atomrumpforbitale mit tiefer Energie? Welche Orbitale können gut, weniger gut, gar nicht mit Nachbaratomen überlappen, d.h. Kovalenzen bilden? Welche Orbitale können sich an ionischer Bindung beteiligen? Welches sind starre Atomrumpforbitale, welches sind "halb-valenzaktive" Rumpforbitale? Mache eine Tabelle mit Core, semi-Core, Valenz und Pauli-abstoßend, ionisch aktiv, covalent aktiv.

25) Gegeben seien zwei (Orts-)Orbitale $a(r)$ und $b(r)$, $r =$ Positionsvektor eines Elektrons. Die 3 (Triplet)-Spinfunktionen $\alpha(s_1)\alpha(s_2), \alpha(s_1)\beta(s_2) + \beta(s_1)\alpha(s_2), \beta(s_1)\beta(s_2)$ sind permutationssymmetrisch, die 1 (Singulett)-Spinfunktion $\alpha(s_1)\beta(s_2) - \beta(s_1)\alpha(s_2)$ ist permutationsantisymmetrisch. $s =$ Spinrichtungsvektor, α und β beschreiben *spin-up* bzw. *spin-down*. Welche Zweiteilchen-Ortsfunktion aa, ab, ba, bb bzw. deren Linearkombinationen lassen sich mit welchen Spinfunktionen verknüpfen bzw. gar nicht verknüpfen, gemäß Pauli-Verbot-Prinzip.