Universität Potsdam
Theoretische Chemie
Prof. Dr. Saalfrank

SoSe 2019

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie für LA Chemie (Modul VM11)

Blatt 8

Aufgabe 21: *Bohrsches Atommodell*

Ein Myon-Atom besteht aus einem Atomkern der Ladungszahl Z und einem eingefangenen Myon, das sich im Grundzustand befindet. Das Myon ist ein Teilchen, dessen Masse 207 mal so groß ist wie die des Elektrons; seine Ladung ist der Elektronenladung gleich.

Berechnen Sie unter Verwendung des Bohrschen Atommodells

1. die Bindungsenergie eines Myons, das von einem Proton eingefangen worden ist,
2. den Radius der entsprechenden Bohrschen Bahn mit $n = 1$,
3. die Energie des Photons, das ausgestrahlt wird, wenn das Myon vom Zustand $n = 2$ in den Grundzustand springt.

Aufgabe 22: *Wasserstoff-Atom: Quantenmechanik I*

1. Geben Sie (in Einheiten der Grundzustandsenergie) die Energie des Wasserstoffatoms an, wenn sich das Elektron im Orbital (i) $2p_x$, (ii) $3p_z$, (iii) $3d_{xy}$, und (iv) $4d_{xy}$ befindet. Wieviele *radiale* Knoten besitzt die jeweils zugehörige (elektronische) Wellenfunktion?
2. Geben Sie den Entartungsgrad für die Zustände eines Wasserstoffatoms mit den Energien i) $-\,hcR_H$; ii) $-\,1/9\ hcR_H$; iii) $-\,1/25\ hcR_H$ an.
3. Welche der folgenden Übergänge sind in einem normalen Emissionsspektrum eines (H-)Atoms erlaubt:
   i) 2s $\rightarrow$ 1s, ii) 2p$\rightarrow$ 1s, iii) 5p $\rightarrow$ 3s?
4. Berechnen Sie die drei längsten Wellenlängem (in nm), die in der Balmerserie auftauchen!

Aufgabe 23: *Wasserstoff-Atom: Quantenmechanik II*

In sogenannten atomaren Einheiten wird $4\pi\epsilon_0 = \hbar = e = m_e = 1$ gesetzt. Damit werden Energien in Einheiten von Hartree (1 E_h = 27.211383 eV), und Längen in Einheiten von Bohr (1 a_0 = 0.52918 Å) "gemessen".

1. Geben Sie die Grundzustandsenergie des H-Atoms, des He^+-Ions und des Li^{2+}-Ions in atomaren Einheiten (E_h) an.

2. Zeigen Sie, dass die Funktion

$$\psi_{1s} = \left(\frac{Z^3}{\pi}\right)^{1/2} \exp(-Zr) \tag{1}$$

eine auf Eins normierte Wellenfunktion ist.

Hinweis: Es gilt

$$\langle \psi_{1s} | \psi_{1s} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{1s}|^2 \, dx \, dy \, dz = \int_0^{\infty} 4\pi r^2 \, |\psi_{1s}|^2 \, dr \tag{2}$$

und außerdem die Formel

$$\int_0^{\infty} r^n \exp(-ar) \, dr = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad . \tag{3}$$

3. Schaffen Sie es mit der letzten Formel auch noch zu zeigen, dass der mittlere Abstand des Elektrons vom Atomkern in atomaren Einheiten (a_0) durch $\frac{3}{2Z}$ gegeben ist? (Sie müssen hierzu den Erwartungswert $\langle \psi_{1s} | r | \psi_{1s} \rangle$ ausrechnen.)