

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I Sommersemester 2017

9. Übungsblatt

28.6.2017

1. Beweisen Sie die in Folie 187 benutzte Beziehung

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) + \frac{2}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \right) \right] R(r) = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) u(r)$$

wenn $u(r) = r \cdot R(r)$ bzw. $R(r) = u(r)/r$ ist.

2. Betrachten Sie die elektronischen Zustände des Wasserstoffatoms mit Energien niedriger als einem Schwellenwert von -0.9 eV.

- Wie viele Zustände existieren für $n = 0$ und $n = 5$?
- Wieviele für die folgenden Quantenzahlen bzw. Kombinationen von Quantenzahlen?
 - $n = 2, l = 3$
 - $n = 2, l = 1$
 - $n = 2, l = 0$
- Wie groß ist die maximal mögliche Hauptquantenzahl n_{max} für den angegebenen Schwellenwert?
- Wieviele Zustände *insgesamt* gibt es unterhalb der Energieschwelle für $l = 0, l = 1, l = 2, \text{ und } l = 3$?
- Wie viele Zustände gibt es insgesamt mit Energie niedriger als -0.9 eV?

Wie ändern sich die Antworten auf die Frage, wenn Sie statt des H-Atoms das wasserstoffähnliche Molekülion He^+ betrachten?

Please turn page!!

3. Zeigen Sie, dass der Gesamtdrehimpulsoperator $\hat{L} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)^T$ mit dem Hamiltonoperator $\hat{H}(r)$ für ein beliebiges Zentralkraftfeld $V(r)$ kommutiert.

4. In einem d -Zustand ist die Nebenquantenzahl $l = 2$. Welche m -Werte sind möglich? Berechnen Sie den Eigenwert für den Drehimpuls \hat{L}^2 und skizzieren Sie die möglichen Einstellungen in Bezug von L_z bzgl. der z -Achse.