

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I Sommersemester 2017

11. Übungsblatt

12.7.2017

1. Berechnen Sie die Summe der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten der drei $2p$ -Orbitale für die Koordinaten (r, ϑ, φ) . Entnehmen Sie die entsprechenden Funktionen Ψ_{2p_x} , Ψ_{2p_y} , Ψ_{2p_z} dem Skript bzw. der einschlägigen Literatur.

$$|\psi_{2p_x}^2 + \psi_{2p_y}^2 + \psi_{2p_z}^2|^2 = (2p_x)^2 + (2p_y)^2 + (2p_z)^2$$

Sie benötigen das Integral $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$ (für $a > 0$, n positive ganze Zahl).

2. 3 Elektronen sind so in Spinorbitalen anzuordnen, daß die Elektronen nicht unterscheidbar sind und eine antisymmetrische Wellenfunktion entsteht (Slaterdeterminante). Die Ortsfunktionen seien die Wasserstofforbitale ψ_{1s} und ψ_{2s} . Geben Sie die Determinante an und rechnen Sie sie aus.
3. In der Vorlesung wurde der Vertauschungsoperator \hat{P}_{12} eingeführt, der die Koordinaten von 2 Teilchen vertauscht. Ebenso wurde der Antisymmetrisierungsoperator $\hat{\mathcal{A}}$ eingeführt, der eine Wellenfunktion antisymmetrisiert. Berechnen Sie für die 2-Elektronen-Produkt-Wellenfunktion $\Psi(1, 2) = \phi_{1s}(1) \cdot \phi_{2p}(2)$

(a)

$$\hat{P}_{12}\Psi(1, 2)$$

(b)

$$\hat{\mathcal{A}}\Psi(1, 2) = \frac{1}{2!}(\hat{1} - \hat{P}_{12})\Psi(1, 2)$$

- (c) Was passiert, wenn sie $\hat{\mathcal{A}}$ ein weiteres Mal auf das Ergebnis von b) anwenden, wenn Sie also $\hat{\mathcal{A}}^2\Psi(1, 2)$ berechnen?

Dabei bedeutet die Kurzschreibweise $\Psi(1, 2) = \Psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2)$ und $\phi(1) = \phi(\vec{r}_1, \sigma_1)$.