Universität Potsdam
Theoretische Chemie
Prof. Dr. Peter Saalfrank

SoSe 2019

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I: Teil 1, Quantenmechanik (Modul A8)

Blatt 9

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 Atoms erlaubt:
   i) 2s $\rightarrow$ 1s, ii) 2p$\rightarrow$ 1s, iii) 5p $\rightarrow$ 3s?

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".

Für ein wasserstoffähnliches Ion (Ladung $+Z$, 1 Elektron) lautet der Hamiltonoperator in atomaren Einheiten:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{r} \tag{1}$$

1. Zeigen Sie, dass die Funktion

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

   eine korrekt normierte Eigenfunktion von $\hat{H}$ ist, und bestimmen Sie die zugehörige Energie.

2. Zeigen Sie, dass die mittlere Entfernung des Elektrons zum Kern durch

$$\langle r \rangle = \langle \psi_{1s} | r | \psi_{1s} \rangle = \frac{3}{2Z} \tag{3}$$

   gegeben ist.

3. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Elektron sich in einer dünnen Kugelschale mit dem Radius r und der Dicke dr aufhält; zeigen Sie damit, dass der wahrscheinlichste Abstand gleich $1/Z$ ist.

   Man beachte, dass in Polarkoordinaten gilt:

$$\nabla^2 \psi_{1s} = \frac{1}{r^2}\left(\frac{d}{dr}\left[r^2 \frac{d\psi_{1s}}{dr}\right]\right) \tag{4}$$

$$dx\ dy\ dz = r^2\ sin\ \theta\ dr\ d\theta\ d\varphi \tag{5}$$

$$\int_0^\infty r^n \exp(-ar)\ dr = \frac{n!}{a^{n+1}} \tag{6}$$