

---

Übungsblatt 2: Termine: 8./ 10./ 11. November (16P)

---

Aufgabe 2: Im Wasserstoffatom besetzt das Elektron im Grundzustand den Zustand  $1s$ : (5P)

$$R_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \quad \text{Diese Funktion ist normiert: } 4\pi \int_0^{\infty} r^2 \cdot R_{1s}(r) dr = 1$$

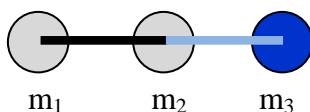
- Berechnen Sie die Ladungsdichte des Elektrons als Funktion von  $r$ . (1P)
- Zeichnen Sie diese Ladungsdichte als Funktion von  $r$  im Bereich  $0 \leq r \leq 10 \cdot a_0$  (1P)
- Berechnen Sie die gesamte Ladung  $q(r_k)$  innerhalb einer Kugel des Radius  $r_k$ . (1P)
- Berechnen Sie damit das Potential eines Wasserstoffatoms  $V(r)$ . (1P)
- Zeichnen Sie dieses Potential für  $0.1 \cdot a_0 \leq r \leq 5 \cdot a_0$  (1P)

Rechnen Sie analytisch oder numerisch. Die Zeichnungen müssen quantitativ sein und korrekte Achsbeschriftungen mit Einheiten haben.

---

Aufgabe 3: Das Molekül  $N_2O$  kann man sich klassisch als aus den 3 Atomkernen mit Massen  $m_1, m_2$  und  $m_3$  und "Federn"  $D_{12}$  und  $D_{23}$  vorstellen. (6P)

$N_2O$  (Lachgas) ist ein lineares Molekül mit folgenden Daten:



Die Bindungslängen sind: 112.6 pm (N-N) und 118.6 pm (N-O)

Die "Federkonstanten" sind:  $D_{12} = 1601$  N/m (N-N) und  $D_{23} = 1178$  N/m (N-O). Diese Werte sind aus dem Bruker Almanac.

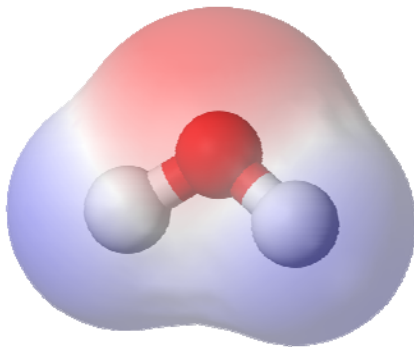
- Stellen Sie die 3 (gekoppelten) Bewegungsgleichungen für  $x_1, x_2, x_3$  auf. (1P)
- Mit harmonischen Ansätzen der Form  $x_j(t) = x_{j,0} \cdot \exp(-i \cdot \omega \cdot t)$  stellen Sie die Eigenwertgleichung der Bewegung auf. (2P)

c) Lösen Sie nach den 2 relevanten Eigenwerten von  $\omega^2$  und bestimmen Sie die Eigenvektoren. (2P)

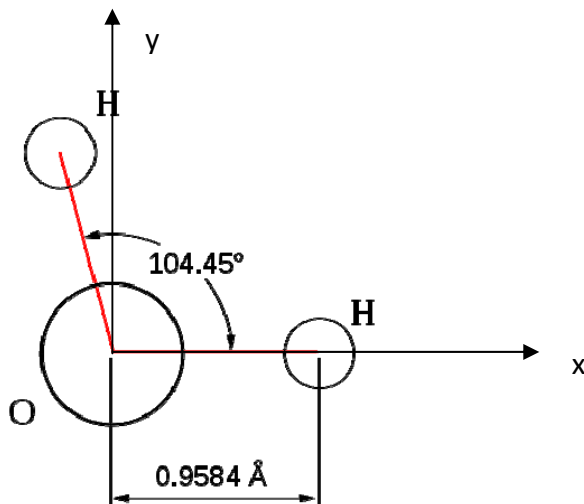
d) Wie groß sind die zwei relevanten Schwingungsfrequenzen des Moleküls in  $\text{cm}^{-1}$ . (1P)  
 Vergleichen Sie diese gerechneten Werte mit den experimentellen Werten und bestimmen Sie den jeweiligen Fehler in %.

(Exp. Werte: Mark Bryant et. al., Journal of Chemical Education, Vol.85, No.1, 2008, p. 121).

Aufgabe 3: Trägheitsmomente und Trägheitsachsen des Wassermoleküls. (5P)



Wichtig für das Trägheitsmoment sind jedoch nur die Atomkerne. Bei "normalen" Wasser sind dies  $1 \times {}^{16}\text{O}$  und  $2 \times {}^1\text{H}$ . Die Bindungslängen und Bindungswinkel sind bekannt:



Die Entfernungen sind in  $\text{Å} = 100 \text{ pm}$  angegeben.

Die Positionen der einzelnen Atome sind:  
 O: (0,0) H: (95.84 pm, 0) , H: (-23.915 pm , 92.808 pm)

Die Massen sind:  
 O:  $16 \cdot \text{amu}$  , H:  $1 \cdot \text{amu}$  ,  $\text{amu} = 1.673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ .

a) Berechnen Sie die 3 Hauptträgheitsachsen und die Hauptträgheitsmomente mit einer beliebigen Methode. (4P)

b) Skizzieren Sie die Lage der 3 Hauptträgheitsachsen. (1P)