

Aufgabe 16

- Skizzieren Sie in Polarkoordinaten die Winkelabhängigkeit der Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms $\Psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ für $l=2$ und $\varphi = 0$.
- Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons sei kugelsymmetrisch, für $r=0$ ungleich Null und verschwinde außer für $r \rightarrow \infty$ noch für vier endliche r -Werte. Um welches Orbital handelt es sich?

Aufgabe 17

Bestimmen Sie mittels der Drehimpulsoperatoren \vec{L} und L_z die Quantenzahlen l und m der Wellenfunktion $\Psi = Ar^2 e^{-r/3a_0} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi}$. Welchen Wert hat die Hauptquantenzahl?

Hinweis: In Kugelkoordinaten gilt:
$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

Aufgabe 18

Die 3d-Orbitale werden für Übergangsmetall-Komplexe oder Übergangsmetall-Ionen in Kristallen üblicherweise als Linearkombinationen der Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}$ dargestellt:

$$d_{3z^2-r^2} \text{ (oder kurz: } d_{z^2}) \rightarrow Y_{2,0}$$

$$d_{x^2-y^2} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{2,-2} + Y_{2,2})$$

$$d_{xz} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{2,-1} + Y_{2,1})$$

$$d_{yz} \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{2,-1} - Y_{2,1})$$

$$d_{xy} \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{2,-2} - Y_{2,2})$$

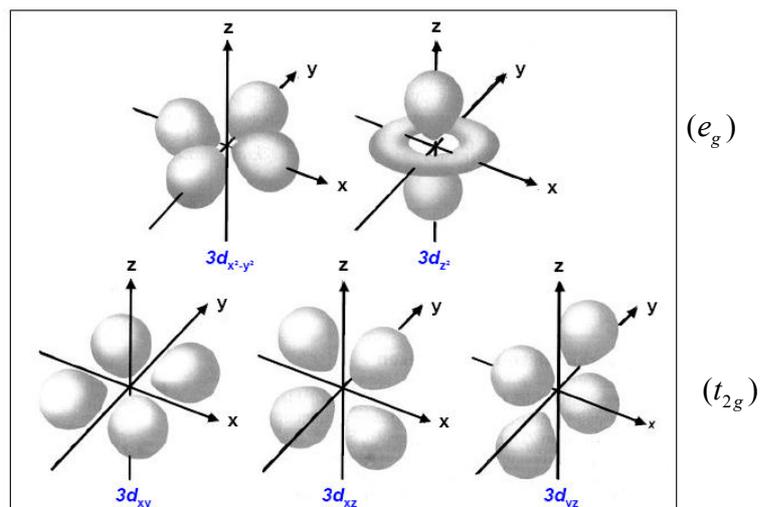


Abb. nach Mortimer, Thieme Verlag

- Zeigen Sie (unter Verwendung der Eigenschaften der $Y_{l,m}$), dass die Linearkombinationen orthogonal und normiert sind,
- dass weiterhin $l=2$, d.h. $\langle \vec{L}^2 \rangle = l(l+1)\hbar^2 = 2 \cdot 3\hbar^2$ gilt, aber $\langle L_z \rangle = 0$ ist, und
- dass ein d_{xy} -Orbital ein um 45° in der xy -Ebene gedrehtes $d_{x^2-y^2}$ -Orbital ist, indem Sie in

$$d_{x^2-y^2} \text{ den Winkel } \varphi \text{ durch } \varphi - \frac{\pi}{4} \text{ ersetzen.}$$

- Wie werden die entsprechenden p_x, p_y, p_z -Orbitale durch Linearkombinationen von $Y_{l,m}$ erzeugt?

Aufgabe 19

Ein ESR-Spektrometer arbeitet mit einer Mikrowellenfrequenz von $\nu = 9,20$ GHz. Man erhält ein ESR-Spektrum des 1,4-Benzochinonanions, dessen Zentrum bei einer Feldstärke von 327,74 mT liegt. Wie groß ist der g-Faktor des Anions? Wo liegt das Zentrum des Spektrums bei einer Messfrequenz von 9,80 GHz und wie groß ist dann der g-Faktor?