



Übungsblatt Nr. 7

Ausgabe: 07.06.2018

Aufgabe 1: Orbitalmodell

Die radiale Wellenfunktion des 1s Orbitals des Li^{2+} -Ions als wasserstoffähnliches Atom ist wie folgt gegeben:

$$R_{1,0} = 2 \left(\frac{3}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{3r}{a_0}}$$

- a) Wie groß ist der wahrscheinlichste Abstand r des Elektrons vom Kern in diesem 1s-Orbital? Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem für das H-Atom (siehe Vorlesung bzw. Skript) und diskutieren Sie den Grund für die Abweichung.
- b) Berechnen Sie den mittleren Abstand des Elektrons vom Kern des Li^{2+} 1s Orbitals über:

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r^3 R_{1,0}^2 dr$$

Nutzen Sie zur Berechnung das Hilfsintegral:

$$\int_0^{\infty} x^3 e^{-bx} dx = \frac{6}{b^4} \quad (\text{für } b > 0)$$

- c) Vergleichen Sie ihr Ergebnis aus Teilaufgabe a) mit dem aus Teilaufgabe b). Wie kommt der Unterschied zustande?

Aufgabe 2: Knotenflächen

- a) Bestimmen Sie die Anzahl der radialen, sowie der gesamten Knotenflächen für ein 2s, 2p, 3p sowie ein 3d Orbital.
- b) Gegeben sei die radiale Wellenfunktion des 2s Orbitals:

$$R_{2,0} = \left(\frac{1}{2a_0} \right)^{3/2} \cdot \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

Zeigen Sie, dass die 2s Radialwellenfunktion ein Extremum (d.h. Maximum oder Minimum) besitzt und berechnen Sie, bei welchem Abstand dieses auftritt. Erklären Sie Ihr Ergebnis anhand einer typischen Abbildung des 2s-Orbitals.