



Übungsblatt 7 Abgabe bis 11.06.2018 vor der Übung

Vorname, Name:

1. Zur Berechnung des elektronischen Übergangs von $n=1$ nach $n=2$ in einem Molekül mit konjugierten Doppelbindungen kann man die Schrödingergleichung für den eindimensionalen Fall anwenden:

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8m_e a^2} \quad \text{wobei } h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js ; } m_e = 9.1095 \cdot 10^{-31} \text{ kg ; } (1 \text{ J} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2})$$

$a = \text{Kastenlänge} = \text{Moleküllänge} = 2.94 \cdot 10^{-9} \text{ m}$

Berechnen Sie die Wellenlänge λ (in Meter) für den Übergang gemäß $\Delta E = \frac{hc}{\lambda}$
mit $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$
(20 Punkte)

2. Geben Sie fünf Strukturisomere mit der Summenformel $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$ an, die der Oktettregel gehorchen.
(25 Punkte, jeweils 2 Bonuspunkte für jedes weitere, maximal 10 Bonuspunkte, maximal 100 Punkte für das Übungsblatt erreichbar)

3. Mit welcher der Ihnen bekannten Rechenmethoden (aus Vorlesung 1-7, also Kraftfelder, Moleküldynamik, quantenmechanische Methoden) können Sie herausfinden, welches der Strukturisomere aus Aufgabe 2 das energetisch stabilste ist? Kurze Begründung warum andere Verfahren das nicht können. (10 Punkte)

4. Wieviel Rumpf- und Valenzelektronen haben die folgenden Molekülsysteme? (Sie benötigen ein Periodensystem) Rumpfelektronen sind die der aufgefüllten Schalen; Zusätzliche Elektronen zählen zu den Valenzelektronen.

Rumpfelektronen	Valenzelektronen
-----------------	------------------

H₂

CH₄

HCl

Cs⁺

PO₄³⁻

O₂²⁻

(24 Punkte)

5. Welche der folgenden Aussagen über Elektronen trifft zu (Ja/Nein)?

(12 Punkte)

- a) Besitzen als Fermionen einen halbzahligen Spin
- b) Besitzen als Bosonen einen ganzzahligen Spin
- c) Sind etwa 1800 mal schwerer als Protonen
- d) Besitzen Wellencharakteristik
- e) Besitzen Teilchencharakteristik
- f) Sind nicht unterscheidbar

6. Warum ist die Wellenfunktion für sich genommen keine physikalische Observable?
(kurze Begründung)

(9 Punkte)