

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

Blatt 2

Aufgabe 5: *Schwingungen.*

Zeigen Sie, dass für den harmonischen Oszillator aus Aufgabe 4 die Energieerhaltung gilt. (Berechnen Sie $E = p^2/2m + V(x)$ als Funktion der Zeit, und zeigen Sie, dass E konstant ist.)

Aufgabe 6: *Wellen.*

Zeigen Sie, dass die Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = 0 \quad (1)$$

allgemein durch $y = f(x \pm ct)$ gelöst wird, wobei f eine beliebige Funktion ist.

Aufgabe 7: *Molekulare Rotationen.*

1. Zeigen Sie, dass ein Molekül wie $\text{Os}(\text{CO})_4\text{Cl}_2$ zwei verschiedene Trägheitsmomente ($z =$ höchstzählige Molekülachse)

$$I_{\parallel} = I_z = 4m_{\text{CO}}R^2 \quad (2)$$

$$I_{\perp} = 2m_{\text{CO}}R^2 + 2m_{\text{Cl}}R'^2 \quad (3)$$

besitzt ($R =$ Os-CO-Bindungslänge, $R' =$ Os-Cl-Bindungslänge).

2. Zeigen Sie, dass die klassische Rotationsenergie durch

$$E = \frac{l^2}{2I_{\perp}} + \left(\frac{1}{2I_{\parallel}} - \frac{1}{2I_{\perp}} \right) l_z^2 \quad (4)$$

gegeben ist ($l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$).

