Universität Potsdam
Theoretische Chemie
Prof. Dr. Peter Saalfrank

SoSe 2018

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

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

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

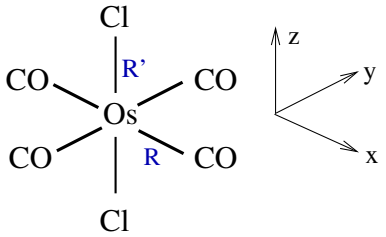
Aufgabe 7: *Molekulare Rotationen.*

1. Zeigen Sie, dass ein Molekül wie $Os(CO)_4Cl_2$ zwei verschiedene Trägheitsmomente (z = höchstzählige Molekülachse)

$$I_{\parallel} = I_z = 4m_{CO}R^2 \tag{2}$$
$$I_{\perp} = 2m_{CO}R^2 + 2m_{Cl}R' \tag{3}$$

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

2. Zeigen Sie, dass die klassische Rotationsenergie durch

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

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