

1. Übungsblatt zur PC III : Chemische Bindung und Spektroskopie

SS 2004

Rückgabe: 22.4.2004, 11 Uhr HS 2

Aufgabe 1:

(4 Punkte)

Zeigen Sie explizit, unter Benutzung der Eigenschaften der H-Eigenfunktionen, daß für das H_2^+ Molekül, daß für einen Ansatz der Wellenfunktion

$$\Psi_e = c_1 1s(A) + c_2 1s(B)$$

der Erwartungswert der Energie $\langle E \rangle$ gegeben ist als:

$$\langle E \rangle = \frac{(c_1^2 + c_2^2)\alpha + 2c_1c_2\beta}{c_1^2 + c_2^2 + 2c_1c_2S}$$

Aufgabe 2:

(4 Punkte)

Bestimmen Sie die Eigenenergien und normierten Eigenkoeffizienten, die sich aus dem linearen Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \alpha - E & \beta - S \cdot E \\ \beta - S \cdot E & \alpha - E \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ergeben.

Aufgabe 3:

(4 Punkte)

Berechnen Sie explizit das Überlappungsintegral S und das Coulombintegral α für das H_2^+ Molekül als Funktion des Kernabstandes R für ein 1s-H Orbital.

Aufgabe 4:

(4 Punkte)

Bestimmen Sie, für den aus dem Variationsprinzip und dem Ansatz

$$\Psi_e = c_1 1s(A) + c_2 1s(B)$$

gewonnenen Ausdruck für die Energie der H_2^+ Moleküls

$$E = E(1s) + \frac{e^2}{4R} \left(\frac{(1 + R_a)e^{-2R_a} + (1 - \frac{2}{3}R_a^2)e^{-R_a}}{1 + (1 + R_a + \frac{1}{3}R_a^2)e^{-R_a}} \right)$$

$$R_a = \frac{R}{a_0} \quad a_0 = \text{Bohr - Radius}$$

den Bindungsabstand und die Bindungsenergie.