2. Übungsblatt zur PC III: Chemische Bindung und Spektroskopie

SS 2004 **Rückgabe: 04.05.2004, 10.00 Uhr, HS 2**

Aufgabe 1:

Zeichnen Sie für das H_2^+-Ion:

a) Das Überlappungsintegral S, das Coulombintegral α und das Bindungsintegral β als Funktion des Kernabstandes R im Bereich von 0 bis 8 a_o.

b) Verwenden Sie die Ergebnisse aus a), um die elektronischen Energiekurven für den bindenden und den antibindenden Zustand von H_2^+ zu zeichnen (in Einheiten des Skalierungsfaktors E_1).

(4 Punkte)

Aufgabe 2:

Betrachten Sie die Elektronendichte von H_2^+ entlang einer Geraden, die durch die beiden Protonen geht.

a) Berechnen und zeichnen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für den bindenden und den antibindenden Zustand – einschließlich des Gebietes außerhalb der Kerne. Der Kernabstand soll auf $R = 2a_o$ fixiert sein.

b) Was sagt das Ergebnis über die Stabilität von H_2^+ im bindenden und antibindenden Zustand aus?

Verwenden Sie:

$$\Psi_b = \frac{1}{\sqrt{2+2S}}\left(\phi_{1S}(A)+\phi_{1S}(B)\right), \qquad \Psi_a = \frac{1}{\sqrt{2-2S}}\left(\phi_{1S}(A)-\phi_{1S}(B)\right)$$

mit

$$\phi_{1S}(A)=\sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}\,e^{-r_A/a_o}, \quad \phi_{1S}(B)=\sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}\,e^{-r_B/a_o},$$

und

$$S = \left[1+\frac{R}{a_o}+\frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_o}\right)^2\right] e^{-R/a_o}$$

Zwischen den Kernen gilt: $r_A + r_B = R$, außerhalb: $r_B = R + r_A$ bzw. $r_A = R + r_B$. Nutzen Sie die Symmetrie des Problems aus.

(4 Punkte)

Aufgabe 3:

Ein Teilchen der Masse m ist im Grundzustand eines drei-dimensionalen exponentiellen Potentials

$$V(r) = -\left(4\hbar^2/3ma^2\right)e^{-r/a}, \quad a > 0$$

gebunden. Verwenden Sie das Variationsprinzip mit der normierten Testfunktion

$$\Psi(r) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}}(\beta/a)^{3/2}e^{(-\beta r/2a)}, \quad \beta > 0$$

a) Erhalten Sie einen Ausdruck für $E(\beta)$, der Form: $E(\beta) = \frac{\hbar^2}{8m}(...)^2 - \frac{4\hbar^2}{3ma^2}(...)^3$.

b) Bestimmen Sie den optimalen Wert des Variationsparameters β .

c) Zeigen Sie, dass $-\hbar^2/\left(24ma^2\right)$ eine obere Grenze für die Energie des Grundzustandes ist.

(4 Punkte)

Aufgabe 4:

Geben Sie die Grunzustandwellenfunktion und Energie für

a) 3 quantenmechanische Spin-0 Teilchen

b) 3 quantenmechanische Spin – ½ Teilchen

in einem 1-dimensionalen Potentialkasten der Länge L an.

(4 Punkte)