

3. Übungsblatt zur PC III: Chemische Bindung und Spektroskopie

SS 2004

Rückgabe: 11.05.2004, 10.00 Uhr, HS 2

Aufgabe 1:

Zeigen Sie, dass die beiden Ansätze für eine Wellenfunktion

$$\Psi_{VB} = C_n [1s(A1)1s(B2) + 1s(A2)1s(B1)] \\ + C_i [1s(A1)1s(A2) + 1s(B1)1s(B2)]$$

und

$$\Psi_{MO} = C_b [1s(A1) + 1s(B1)] [1s(A2) + 1s(B2)] \\ + C_a [1s(A1) - 1s(B1)] [1s(A2) - 1s(B2)]$$

identisch sind.

Was sind dann die Beziehungen zwischen $\frac{c_i}{c_n}$ und $\frac{c_a}{c_b}$

(4 Punkte)

Aufgabe 2:

Zeigen Sie, dass nur für die Wellenfunktion Ψ_1 ein Austauschintegral J auftaucht, nicht aber für die Wellenfunktion Ψ_2 . Was bedeutet dies?

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \{1s(A1) \cdot 1s(B2) + 1s(A2)1s(B1)\}$$

$$\Psi_2 = \{1s(A1) \cdot 1s(B2)\}$$

(4 Punkte)

Aufgabe 3:

Betrachten Sie ein H₂-Molekül mit A im Koordinatenursprung und B im Abstand R in Richtung der z-Achse. Zeigen Sie explizit, dass das 2s-Orbital um A

$$2s_A = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^3} \left(2 - \frac{r_A}{a_0} \right) e^{-r_A/a_0}$$

mit dem 2p_x Orbital um B

$$2p_{xB} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^3} \frac{r_B}{a_0} \cdot e^{-r_B/2a_0} \sin\theta_B \cos\varphi_B$$

keinen Überlapp besitzt.

{Hinweis: Dazu müssen Sie das Integral nicht ausrechnen, sondern nur zeigen, dass sich zwei Teile gegenseitig aufheben.}

(4 Punkte)

Aufgabe 4:

Benutzen Sie die MO-Theorie um zu erklären warum die

- Dissoziationsenergie von N₂ größer als von N₂⁺
- Dissoziationsenergie von O₂ kleiner als von O₂⁺ ist.

Geben Sie die Grundzustands-Termsymbole für diese Moleküle an.

(4 Punkte)