

## Übungsblatt 12

### 1) Balmer Serie

Berechnen Sie die Spektrallinien der Balmer-Serie ( $n_1=2$ ,  $n_2$  bis einschließlich 6) in Wellenlängen Einheiten.

### 2) LCAO-MO

Stellen Sie mit Hilfe des LCAO-MO Ansatzes

$$|\psi\rangle \approx c_a|\alpha\rangle + c_b|\beta\rangle$$

und ausgehend vom Hamiltonoperator des Einelektronensystems

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(-\frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B} + \frac{1}{r_{AB}}\right)$$

die Schrödingergleichung in Matrixdarstellung auf.

### 3) Molekülorbitale

Skizzieren Sie das Molekülorbitalschema von  $N_2$ .