

## Übungen zu Moleküle, Kerne, Teilchen, Festkörper - Physik IV

Sommersemester 2016

Ausgabe 26.5.2016 Abgabe 02.06.2016 (Max. 24 Pkte)

1. Was ist ein zweiatomiges Molekül? (1 Punkt)
2. Welche Energieterme müssen in der Schrödingergleichung zur Beschreibung eines zweiatomigen Moleküls berücksichtigt werden? (5 Punkte)
3. Was beschreibt ein molekulares Potential? (1 Punkte)
  - a. Die Energie der Elektronen des Moleküls als Funktion des Kernabstandes.
  - b. Die potentielle Energie der Kerne.
  - c. Die Energie der Elektronen des Moleküls als Funktion des Abstandes Elektron – Kern.
4. Das einfachste Molekül ist das  $\text{H}_2^+$ -Molekülion. Wie kann man die elektronischen Wellenfunktionen der zwei niederenergetischsten Molekülorbitale in der LCAO Näherung approximieren? (2 Punkte)
5. Durch welche Quantenzahlen werden die Molekülorbitale des  $\text{H}_2^+$ -Molekülions beschrieben? (3 Punkte)
6. Mit wie vielen Elektronen können die Molekülorbitale  $1s\sigma$ ,  $2p\pi$  und  $3d\delta$  jeweils besetzt werden? (3 Punkte)
7. Zur Beschreibung der elektronischen Wellenfunktion des  $\text{H}_2$ -Moleküls kann entweder mit dem Molekülorbitalnäherungsansatz oder dem Heitler London Ansatz gearbeitet werden.
  - a. Wie lauten die elektronischen Wellenfunktionen des  $\text{H}_2$  Grundzustandes unter Verwendung der zwei verschiedenen Näherungsmethoden? (2 Punkte)
  - b. Durch die Berücksichtigung/Vernachlässigung welcher Terme unterscheiden sich die Ansätze? (2 Punkte)
8. Welche molekularen Orbitale entstehen durch die Annäherung zweier atomarer  $1s$  Wasserstofforbitale?
  - a. Benennen Sie die Terme in der Notation  $\lambda_{g/u}nl$ . (2 Punkte)
  - b. Wie lauten die zugehörigen Wellenfunktionen in der LCAO Näherung? (2 Punkte)
  - c. Welche Bedeutung haben die Indizes  $g/u$ ? (1 Punkt)