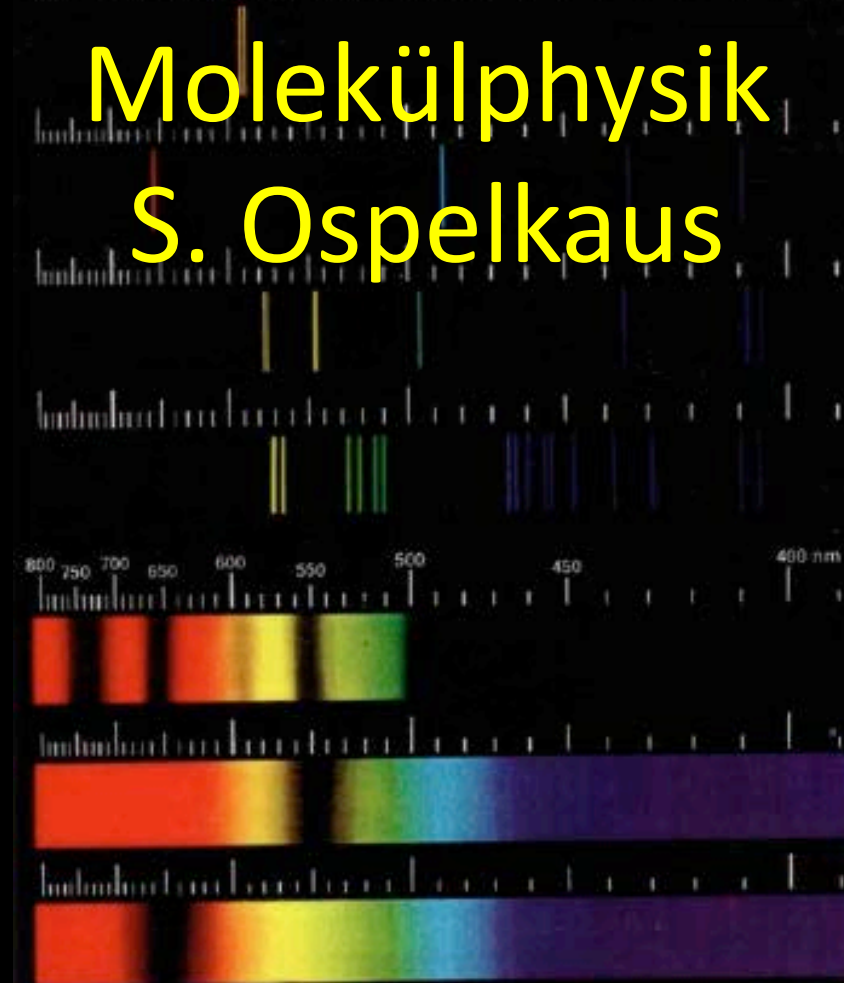


Molekülphysik

S. Ospelkaus



Molekulare Orbitale H_2^+

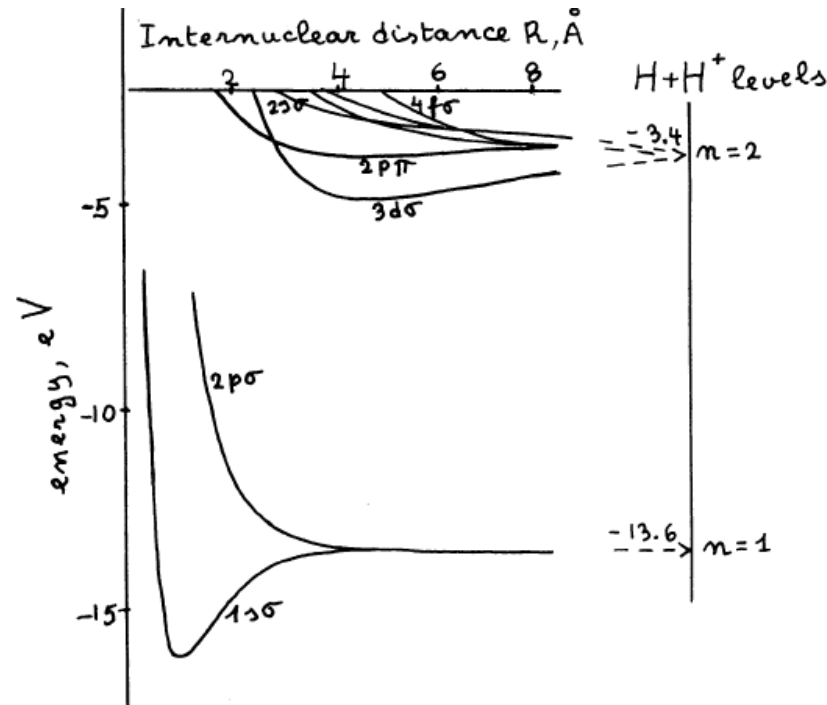


Abbildung 3.8: Potentialkurven für das H_2^+ -Molekülion. Der $1s\sigma$ -Zustand ist bindend und das Minimum liegt bei einem Gleichgewichtsabstand $R_e = 2,0 a_0$. Bezogen auf den Limes entfernter Kerne $R \rightarrow \infty$ ist die Bindungsenergie $E_B = -2,79 \text{ eV}$. (Die einfache LCAO-Rechnung ergibt $R_e = 2,5 a_0$ und $E_B = -1,76 \text{ eV}$.)

[nach: Fano & Fano, Physics of Atoms and Molecules]

Molekulare Orbitale

Tabelle 2.1: Quantenzahlen und Termbezeichnung eines Elektrons im Molekül mit Bahndrehimpulsquantenzahl ℓ und Projektionsquantenzahl $\lambda = |m_\ell|$.

Quantenzahlen			Termbezeichnung
n	ℓ	λ	
1	0	0	1 $s\sigma$
2	0	0	2 $s\sigma$
2	1	0	2 $p\sigma$
2	1	1	2 $p\pi$
3	2	0	3 $d\sigma$
3	2	2	3 $d\delta$

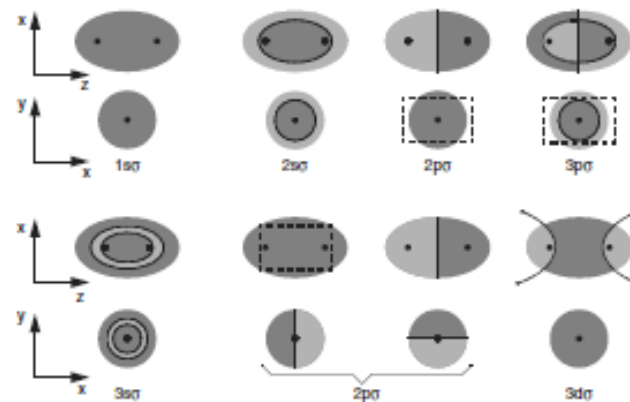


Abb. 2.12: Elektronische Wellenfunktionen für einige Zustände des H_2^+ (dunkelgrau = positive, hellgrau = negative Werte). *Oben:* Blick senkrecht zur Molekülachse; *unten:* Blickrichtung in die Molekülachse. Wenn die Zeichenebene Knotenebene ist, wird das Vorzeichen oberhalb der Ebene angegeben [2.11].

Anschauliche Interpretation

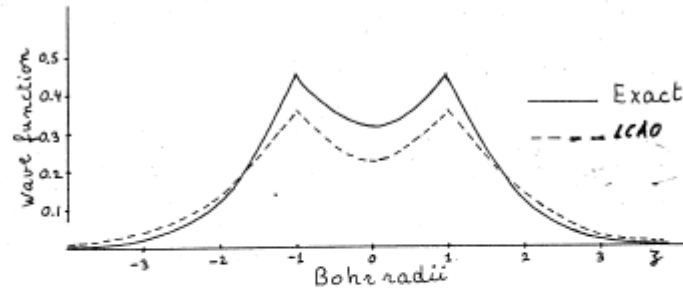


Abbildung 3.4: Schnitt des Molekülorbitals Ψ_s entlang der z -Achse. Dieses Molekülorbital hat keine Knotenflächen, hat also die Quantenzahlen $1s\sigma$. Durchgezogen die exakte Lösung, gestrichelt die LCAO-Näherung.

[nach: Fano & Fano, Physics of Atoms and Molecules]

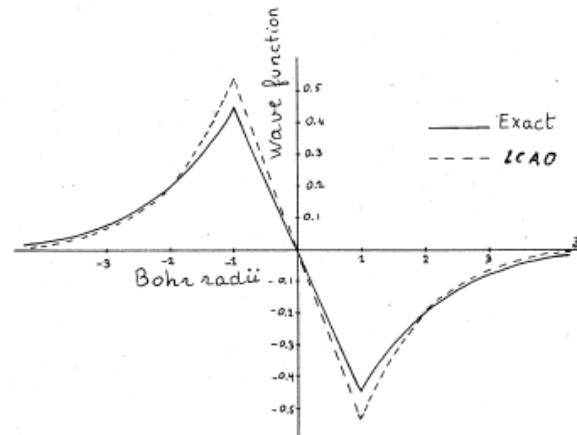


Abbildung 3.5: Schnitt des Molekülorbitals Ψ_a entlang der z -Achse. Dieses Molekülorbital hat eine Knotenebene bei $z = 0$, also eine hyperbolische Knotenfläche. Die Quantenzahlen sind $2p\sigma$. Durchgezogen die exakte Lösung, gestrichelt die LCAO-Näherung.

[nach: Fano & Fano, Physics of Atoms and Molecules]

H₂-Molekül

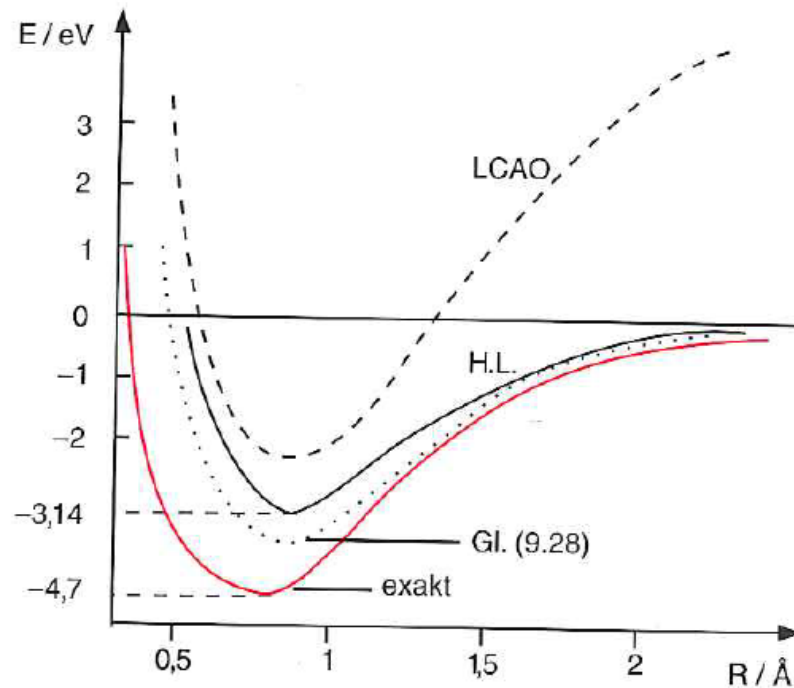


Abb. 9.14. Potentialkurven $E(R)$ des H₂-Grundzustandes für die verschiedenen Näherungen

From Demtröder: Experimentalphysik 3