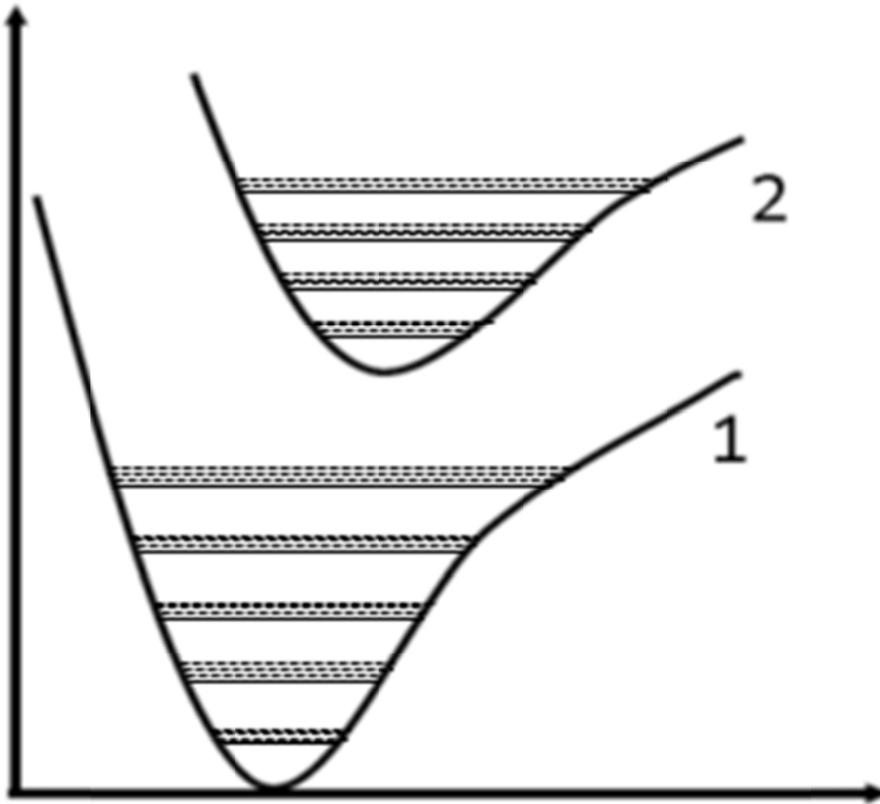


## 1. Born-Oppenheimer Näherung



Das Bild zeigt die nach der Born-Oppenheimer Näherung berechneten Energiezustände eines 2-atomigen Moleküls im Grundzustand 1 und im niedrigsten optisch (auch bei großen Kernabständen) anregbaren Zustand 2.

- Beschriften Sie die Achsen. Geben Sie die Quantenzahlen der dissoziierten Atome für Zustand 2 an, unter der Annahme, dass es sich bei dem Molekül um  $\text{H}_2$  handelt (Bsp. Grundzustand =  $1s + 1s$ ). Was stellen die Kurven 1 und 2 dar?
- Was stellen die horizontal eingezeichneten durchgezogenen und gepunkteten Energieniveaus dar?
- Erklären Sie, wie die Existenz einer endlichen Grundzustands-Vibrationsenergie mit der Unschärferelation zusammenhängt.
- Ein  $\text{H}_2$  Molekül werde zum Zeitpunkt  $t=0$  künstlich gedehnt, d.h. der Kernabstand größer als der Gleichgewichtsabstand gemacht. Was passiert danach? Begründen Sie dies quantenmechanisch. Welche Energiezustände aus der Skizze sind für die Beschreibung des Problems notwendig? Wie entwickelt sich die elektronische Wellenfunktion währenddessen?

**Aufgabe 1. Ionenbindung**

(3p)

Bei welchem Abstand  $x$  zwischen einem Natriumatom (Ionisationsenergie  $E_I = 5,1$  eV) und einem Chloratom (Elektronenaffinität  $E_A = 3,7$  eV) springt das Elektron der äußeren Schale von Natriumatom zum Chloratom über, wenn eine reine Ionenbindung angenommen wird? Betrachten Sie also die Potentialkurve  $\text{Na}^+\text{Cl}^-$ .

**Aufgabe 2: Ionisierungsenergie des  $\text{H}_2$ -Moleküls**

- a) Wie groß ist die Ionisierungsenergie des  $\text{H}_2$ -Moleküls, wenn seine Bindungsenergie  $D(\text{H}_2) = -4,48$  eV, die Bindungsenergie  $D(\text{H}_2^+) = -2,65$  eV und die Ionisationsenergie des H-Atoms 13,6 eV sind? Zeichnen Sie die Molekülpotential-Kurven in einem Diagramm zur Illustration der Berechnung. (2 Pkte.)
- b) Wie groß wird die gesamte elektronische Energie ohne Kernabstoßung (Gesamtbindungsenergie der beiden Elektronen) im  $\text{H}_2$ -Molekül, wenn man den Kernabstand  $R$  gegen Null gehen lässt (Grenzfall des vereinigten Atoms)?

Bem.: Der Zahlenwert für die Antwort ist in Kap. 4 der Vorlesung zu finden, keine Berechnung notwendig. (2 Pkte.)

**Aufgabe 3: Helium Molekül?** (10 p)

Zeigen Sie, dass das Helium kein  $\text{He}_2$  Molekül bilden sollte.

Benutzen Sie hierfür die Konstanten  $\epsilon \approx 10$  Kelvin und  $\sigma = 2,5 \cdot 10^{-10} \text{m}$  im Lennart-Jones Potential.

$$V_{\text{eff}}(R) \approx 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]$$

Schätzen Sie hierzu die maximale Tiefe der Potentialkurve  $U_b$  und Nullpunktsenergie  $U_0$  eines  $\text{He}_2$  Moleküls ab.

*Tatsächlich wurde die tatsächliche Bindungsenergie ( $U_B + U_0$ ) und der mittlere Abstand  $\langle R \rangle$  durch Beugung eines ultrakalten Helium Strahls (der auch Helium-Dimere enthielt) an einem Transmissionsgitter bestimmt. Es ergab sich 1.1mK und  $\langle R \rangle = 52 \text{ \AA}$ , also ein extrem schwach gebundenes Molekül (das schwächste überhaupt). Ein interessanter Artikel hierzu ist: <http://physics.aps.org/story/v6/st9>*