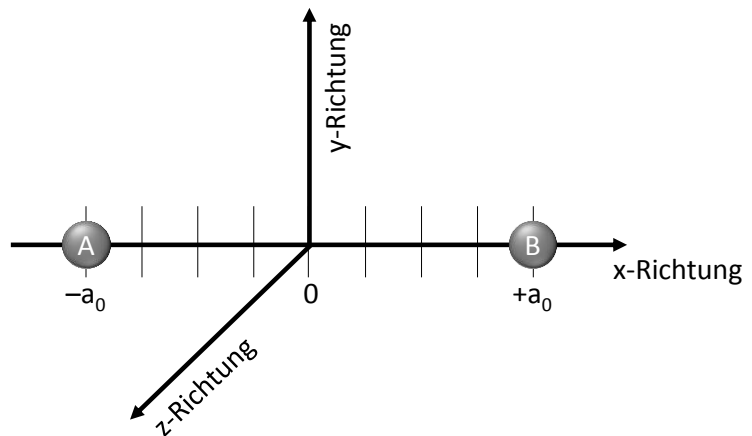


# Übungsblatt Nr. 8

## Aufgabe 1: Das $H_2^+$ -Moleküllion

Betrachten Sie das  $H_2^+$ -Moleküllion und berechnen Sie, sowohl für I) das  $\sigma$ - als auch II) das  $\sigma^*$ -Molekülorbital (MO), die Wahrscheinlichkeit, mit der sich das Elektron an einem bestimmten Ort a), b) & c) befindet ( $V = 1 \text{ pm}^3$ ). Gehen Sie davon aus, dass sich die Bindungslänge  $R$  von  $2 \cdot a_0$  beim Übergang von  $\sigma$  nach  $\sigma^*$  nicht ändert.

- a) am Kern A
- b) am Kern B
- c) in der Mitte zwischen A und B



Hinweis 1: Sie haben die mathematische Funktion des radialen Anteils des 1S-Atomorbitals (AO) des Wasserstoffatoms bereits in einem vorigen Übungsblatt kennengelernt:

$$\psi_{1s}(r) = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Hinweis 2: Da sich alle zu untersuchenden Punkte (A, B & Nullpunkt) auf der x-Achse befinden, können Sie die obige Wellenfunktion ohne Änderungen auf diese Achse beziehen und y- und z-Achse vernachlässigen.

Hinweis 3: Berücksichtigen Sie, dass die Funktion für das Atom A um einen Wert  $x_A = -a_0$  (die des Atoms B um  $x_B = +a_0$ ) entlang der x-Achse verschoben werden muss.

Hinweis 4: Achten Sie darauf, dass die Vorzeichen in den Exponenten so gewählt sind, dass beide Wellenfunktionen im Bereich  $[-a_0; +a_0]$  sinnvoll definiert sind.

Hinweis 5: Erstellen Sie die Linearkombinationen der AO für die beiden MO mit den entsprechenden Vorfaktoren  $c_i$ . S ist hierbei das Überlappungsintegral.

$$\Psi_{MO} = \sum_{i=1}^N c_i \cdot \psi_{AO_i} \quad c_{\sigma_{1s}} = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} \quad c_{\sigma_{1s}^*} = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} \quad S = \left(1 + \frac{R}{a_0} + \frac{1}{3} \left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right) e^{-\frac{R}{a_0}}$$

Hinweis 5: Bilden Sie für beide MO das Betragsquadrat  $\rho_{MO_i} = |\Psi_{MO_i}|^2$ , um jeweils eine Funktionen zu erhalten, die die Elektronendichte beschreibt.

Hinweis 6: Setzen Sie die in der Aufgabenstellung gegebenen Positionen ein und multiplizieren Sie die Ergebnisse mit  $1 \text{ pm}^3$  um von der Elektronendichte zu einer Wahrscheinlichkeit zu gelangen.