



## Übungsblatt 8

### Aufgabe 1: Born-Oppenheimer-Näherung

Erklären Sie den Begriff *Born-Oppenheimer-Näherung* und nennen Sie die Bedingungen, unter denen diese Näherung gültig ist. Worin besteht ihre zentrale Bedeutung für die Chemie?

### Aufgabe 2: Molekularer Hamilton-Operator

Stellen Sie den vollständigen Hamilton-Operator für das Wasserstoff-Molekül auf und geben Sie dabei die einzelnen Terme explizit an! Welcher Teil des Gesamtoperators ist der elektronische Hamilton-Operator?

### Aufgabe 3: Physikalische Ursachen der chemischen Bindung

Erklären Sie mit Hilfe einer Energiebetrachtung, wie die Bindung zwischen H und H<sup>+</sup> im Wasserstoff-Molekülion H<sub>2</sub><sup>+</sup> zustande kommt. Diskutieren Sie dazu die Rollen von kinetischer und potentieller Energie im Verlauf der Bindungsbildung und erinnern Sie sich insbesondere an die Heisenbergsche Unschärferelation und das Potentialkasten-Modell! Verwenden Sie gegebenenfalls folgende Literatur: W. Kutzelnigg, *Was ist Chemische Bindung?*, Angew. Chem. 85 (1973) 551 und J. Reinhold, *Quantentheorie der Moleküle*, Teubner 1994, Kap. 5.

### Aufgabe 4: Erwartungswert

Berechnen Sie den Erwartungswert für das Quadrat des Impulses,  $\langle p^2 \rangle$ , für die Elektronen im Energieniveau E<sub>5</sub> eines eindimensionalen Kastenpotentials! Dieser Zustand wird durch die Wellen-

funktion  $\psi_5 = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(5\frac{\pi}{L}x\right)$  beschrieben. Benutzen Sie für die Berechnung einerseits den

allgemeinen Ausdruck für den Erwartungswert eines Operators und berechnen Sie  $\langle p^2 \rangle$  andererseits aus dem Ausdruck für die Energie dieses Zustands im Kastenpotential!

### Aufgabe 5: Chemische Bindung in zweiatomigen Molekülen

(a) Ordnen Sie die Moleküle bzw. Molekülionen O<sub>2</sub>, O<sub>2</sub><sup>+</sup>, O<sub>2</sub><sup>-</sup> (i) nach der Stärke der kovalenten Bindung und (ii) nach der Stärke der paramagnetischen Suszeptibilität. Begründen Sie Ihre Antwort mit Hilfe eines MO-Diagramms.

(b) Geben Sie an, ob die Ionisierungsenergien der Moleküle H<sub>2</sub>, HCl, Cl<sub>2</sub> größer, kleiner oder etwa gleich groß sind wie die Ionisierungsenergien der Atome, aus denen sie aufgebaut sind. Begründen Sie Ihre Antwort mit Hilfe von MO-Diagrammen unter Berücksichtigung der relevanten bindenden, nicht-bindenden und anti-bindenden Orbitale!