Übungsblatt Nr. 8

Ausgabe: 14.06.2018

Aufgabe 1: Orthonormalität und Hybridisierung

a) Zeigen Sie, dass die zwei unten angegebenen sp^3-Hybridorbitale der 2. Hauptschale des Wasserstoffatoms sowohl normiert als auch zueinander orthogonal sind. Hinweis: Verwenden Sie dabei die Orthonormalitätsbeziehung der zugrundeliegenden s- und p-Orbitalbasis.

$$\psi_{2\mathrm{sp}^3,1} = \frac{1}{2}\left(\psi_{2\mathrm{s}} + \psi_{2\mathrm{p}_x} + \psi_{2\mathrm{p}_y} + \psi_{2\mathrm{p}_z}\right) \qquad \psi_{2\mathrm{sp}^3,2} = \frac{1}{2}\left(\psi_{2\mathrm{s}} - \psi_{2\mathrm{p}_x} - \psi_{2\mathrm{p}_y} + \psi_{2\mathrm{p}_z}\right)$$

b) Handelt es sich bei $\psi = \frac{1}{2}\left(\psi_{2\mathrm{s}} - \psi_{2\mathrm{p}_x} - \psi_{2\mathrm{p}_y} - \psi_{2\mathrm{p}_z}\right)$ ebenfalls um ein gültiges (d.h. zu den obigen orthogonales) Hybridorbital?

Aufgabe 2: H_2^+-Molekülion

Angenommen, Sie hätten einen kleinen Elektronensensor mit einem Volumen von 1 pm^3 mit dem Sie das H_2^+-Molekülion abtasten könnten.

a) Normieren Sie zunächst das bindende und das antibindende Molekülorbital $\Psi_{\sigma_{1s}}$ und $\Psi_{\sigma_{1s}^*}$ indem Sie die Linearkoeffizienten $c_{\sigma_{1s}}$ und $c_{\sigma_{1s}^*}$ bestimmen. Nutzen Sie dazu:

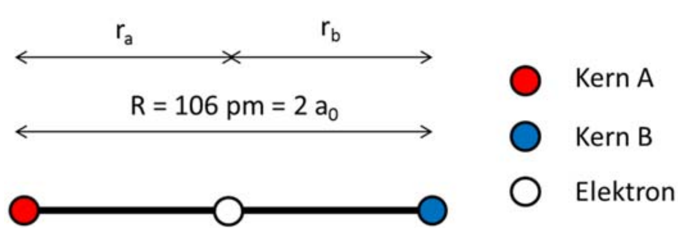
$$S = \left(1 + \frac{R}{a_0} + \frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right) e^{\frac{R}{a_0}}$$

b) Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit für den Grundzustand, an den folgenden Orten ein Elektron zu registrieren:

1) An Kern A; 2) An Kern B; 3) In der Mitte zw. A und B.

(<u>Hinweis:</u> Multiplizieren Sie dazu die Wahrscheinlichkeitsdichte an dem Ort mit dem Volumen des Sensors)

$$\psi_{1s_a}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r_a}{a_0}} \qquad \psi_{1s_b}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r_b}{a_0}}$$



c) Wiederholen Sie die Rechnungen für den Moment, gleich nachdem das Elektron in das antibindende LCAO-MO angeregt wurde (d.h. nehmen Sie dazu an, dass sich der Kern-Abstand nicht ändert).