

**Übungsblatt 8** (zu bearbeiten bis 14.12.2011)**Aufgabe 1: Kugelflächenfunktionen**

Das  $p_z$ -Orbital wird durch die Kugelflächenfunktion  $Y_1^0$  beschrieben. Stellen Sie diese Kugelflächenfunktion sowie ihr Quadrat in einem xz-Diagramm dar, indem Sie die Funktionswerte bzw. ihre Quadrate auf Strahlen abtragen, die den Winkel  $\vartheta$  mit der z-Achse einschließen.

**Aufgabe 2: Radiale Wellenfunktionen im Wasserstoffatom**

(a) Skizzieren Sie die Lösungen der radialen Schrödingergleichung,  $R_{nl}(r)$ , und die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte,  $r^2 R_{nl}^2(r)$  für die Fälle  $n = 1, 2, 3$  und alle erlaubten Werte für die Nebenquantenzahl  $l$ ! Geben Sie die Radien  $r$ , an denen Nullstellen (Knoten) auftreten, explizit als Vielfache des BOHRschen Radius  $a_0$  an!

(b) Berechnen Sie für die 1s-Funktion  $R_{10}(r)$ , bei welchem Radius  $r$  die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte  $r^2 R_{nl}^2(r)$  am höchsten ist. Vergleichen Sie mit dem Bahnradius im BOHRschen Atommodell! Welche Werte erwarten Sie bei  $\text{He}^+$  und  $\text{Li}^{2+}$ ?

**Aufgabe 3: 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 4: Molekularer Hamilton-Operator**

Stellen Sie den 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 5: Physikalische Ursachen der chemischen Bindung**

Erklären Sie auf Grundlage einer Energiebetrachtung, wie die Bindung zwischen H und  $\text{H}^+$  im Wasserstoff-Molekülion  $\text{H}_2^+$  zustande kommt. Diskutieren Sie dazu die Rollen von kinetischer, potentieller und Gesamt-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*, Vieweg+Teubner 2006, Kapitel 5.