

06.01.2015

Dr. Marco Busch
Institut für Physik
Humboldt-Universität zu Berlin
Brook-Taylor-Straße 6 (MHP)

Übungen zur Vorlesung „Mehrelektronenatome und Moleküle“

Blatt 10

(Abgabe: 13.01.2015 **VOR** der Vorlesung)

Aufgabe 22: (6 Punkte)

Zeigen Sie durch explizites Lösen des LCAO-Ansatzes (LCAO=linear combination of atomic orbitals) für den Grundzustand des H_2^+ -Molekülions, dass nur eines der beiden Molekülorbitale einen bindenden Zustand beschreibt. Ermitteln Sie das Energieminimum des bindenden Zustandes.

Aufgabe 23: (4 Punkte)

Berechnen Sie die allgemeine Lösung der Bewegungsgleichungen für das lineare (entlang einer Koordinatenachse angeordnete) CO_2 -Molekül, bei dem die Bindungen des C-Atoms mit den beiden O-Atomen durch zwei Federn mit gleicher Federkonstante k vereinfacht beschrieben werden. Bestimmen Sie die Linearkombinationen der Koordinaten der drei Atome, die die gleichförmige Schwerpunktbewegung sowie die symmetrische und die antisymmetrische Schwingung der O-Atome bezüglich des C-Atoms angeben.