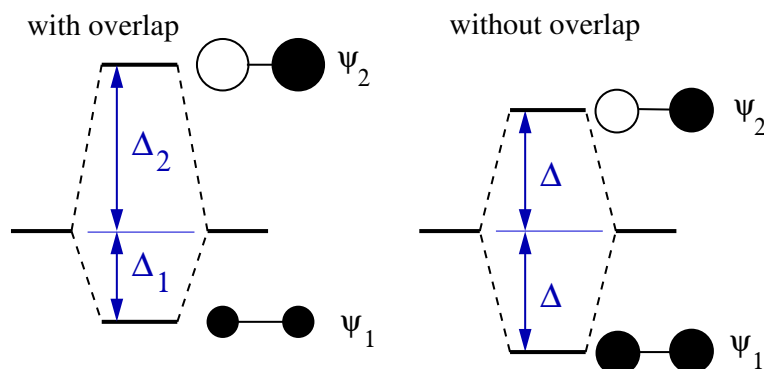


Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I: Teil 2, Chemische Bindung (Modul A8)

Blatt 5

Aufgabe 10: *Das symmetrische 2-Orbital-Problem.*

Im *symmetrischen 2-Orbital-Problem* spalten zwei Atomorbitale ϕ_A und ϕ_B mit Energien H_{AA} und $H_{BB} = H_{AA}$ je nachdem, ob man den endlichen Überlapp berücksichtigt oder nicht, wie folgt auf:



1. Bestimmen Sie die Aufspaltung Δ allgemein bei Vernachlässigung von Überlapp.
2. Wie groß ist Δ speziell für das H_2^+ -Ion bei einem Bindungsabstand von $R = 2 a_0$? (Hinweis: Verwenden Sie Gl.(63) im Skript, vernachlässigen Sie dabei den Überlapp.)
3. Bestimmen Sie die Aufspaltungen Δ_1 und Δ_2 allgemein bei Berücksichtigung des endlichen Überlapps.
4. Wie groß sind Δ_1 und Δ_2 speziell für das H_2^+ -Ion bei einem Bindungsabstand von $R = 2 a_0$? (Hinweis: Verwenden Sie die Gln.(62)-(64) im Skript.)

Aufgabe 11: *Das asymmetrische 2-Orbital-Problem.*

1. Zeigen Sie, dass im *asymmetrischen 2-Orbital-Problem ohne Überlapp* ($H_{AA} \neq H_{BB}$, $S_{AB} = 0$), die (Molekül-) Orbitalenergien durch

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \left(H_{AA} + H_{BB} \pm 2\sqrt{\delta^2 + H_{AB}^2} \right)$$

mit

$$\delta = \frac{1}{2} (H_{AA} - H_{BB})$$

gegeben sind.

2. Was ergibt sich für die Orbitalenergien im Grenzfall $\delta^2 = 0$?
3. Was ergibt sich für die Orbitalenergien im Grenzfall $\delta^2 \gg H_{AB}^2$?