



# Übungsblatt Nr. 9

Ausgabe: 21.06.2018

## Aufgabe 1: Orthogonalität der Wellenfunktionen des 1D-Kastens

Gegeben seien die Wellenfunktionen  $\psi_n$  und  $\psi_m$  eines 1D Kastens der Länge  $L$ .

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \qquad \psi_m = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right)$$

- Bestimmen Sie den Energieeigenwert von  $\psi_n$ .
- Zeigen Sie dass die Wellenfunktionen  $\psi_n$  und  $\psi_m$  für  $n \neq m$  orthogonal sind.

Nutzen Sie dazu den Ausdruck

$$\sin(a) \cdot \sin(b) = \frac{1}{2} [\cos(a - b) - \cos(a + b)]$$

## Aufgabe 2: Bindungsenergie und Gleichgewichtsabstand von $\text{H}_2^+$

Die Bindungsenergie des  $\text{H}_2^+$  als Funktion des Kernabstandes  $R$  ist durch folgende Gleichung gegeben:

$$\Delta E = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R} - \frac{C + D}{1 + S}$$

Hierbei entspricht  $C$  der potentiellen Energie aufgrund der Anziehung zw. der Elektronenverteilung eines ungestörten H-Atoms und dem anderen Kern (Coulomb-Integral),  $D$  der potentiellen Energie aufgrund der Anziehung der Überlappungsdichte durch die beiden Atomorbitale (Austausch-Integral) und  $S$  dem Überlappungsintegral.

Zahlenwerte der Parameter sind in der folgenden Tabelle angegeben. Zeichnen Sie die Potentialkurve des Moleküls auf und bestimmen Sie die Bindungsenergie und den Gleichgewichtsabstand.

$$E_h = 27.3 \text{ eV}, \quad a_0 = 52.9 \text{ pm}, \quad E_H = -\frac{1}{2} E_h$$

$R/a_0$	0	1	2	3	4
$C/E_h$	1	0.729	0.473	0.330	0.250
$D/E_h$	1	0.736	0.406	0.199	0.092
$S$	1	0.858	0.587	0.349	0.189

Wie wäre der Verlauf der entsprechenden Energie, wenn kein quantenmechanischer Austausch zwischen den beiden Atomorbitalen möglich wäre (d.h.  $D = 0$  sowie  $S = 0$  für jeden Abstand  $R$ )? Diskutieren Sie dieses Ergebnis im Vergleich zum obigen.