

## 12. Physik der Moleküle und Festkörper

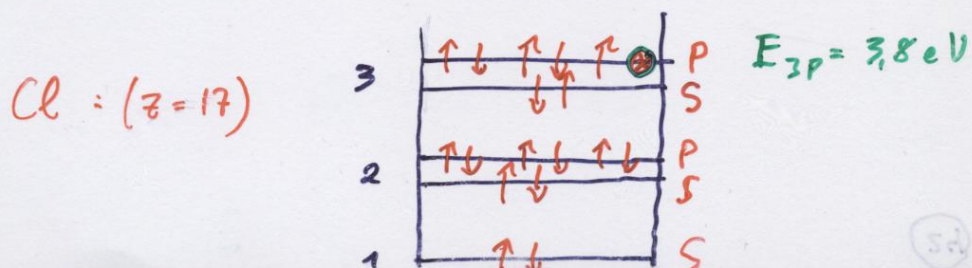
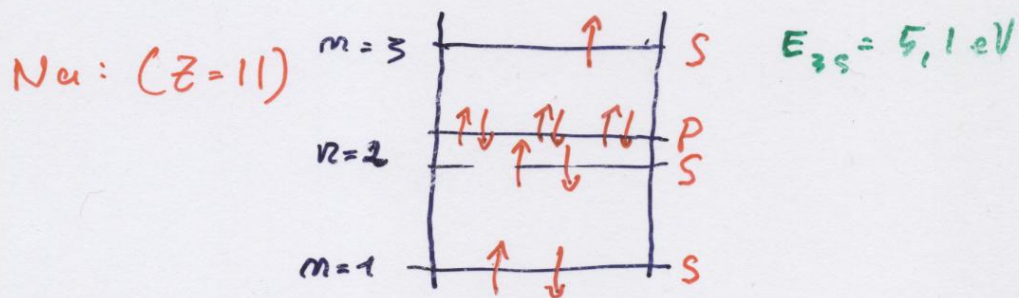
### 12.1. Bindungen

**Molekül**: Ansammlung von Atomen, die durch elektrische Kräfte stabil gebunden sind.

#### 1. Heteropolare Bindungen (Ionenbindungen)

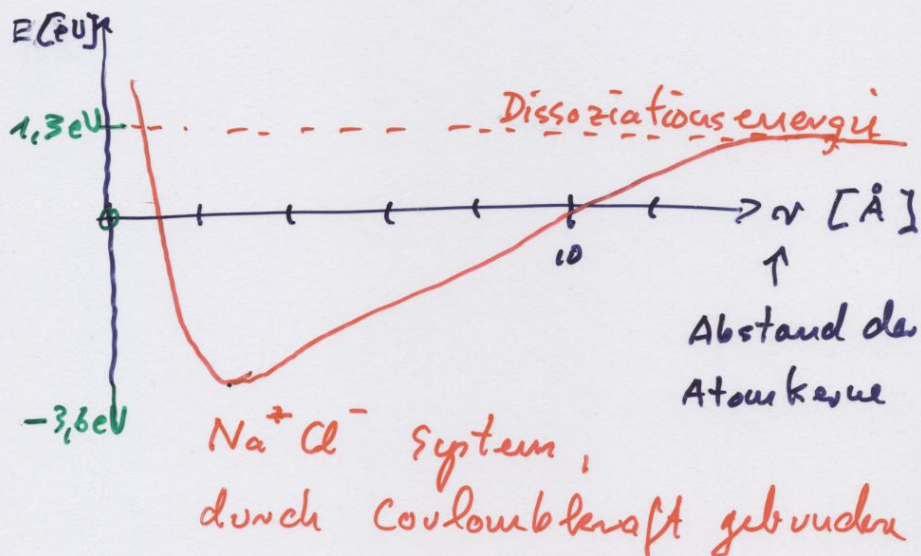
Anziehung zw. pos. und neg. geladenen Ionen haben.

Bsp: Na Cl : Ionisches Molekül



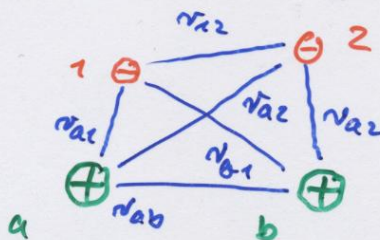
Bindung: Übergabe einer  $e^-$  vom Na  
zum Cl:

$$\Delta E = E_{\text{Na}} - E_{\text{Cl}} = 1,3 \text{ eV}$$



2] Homöopolare Bindungen, auch  
kovalente Bindungen: Elektronenaustausch  
zwischen gleichen  
Partnern

Bsp:  $\text{H}_2$



Berücksichtigen  
aller Kräfte  
zwischen 1, 2, a, b

Ausatz:

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{a1}}}_{H_1}$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{b2}}}_{H_2}$$

$$\underbrace{-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_{a1}} + \frac{1}{r_{a2}} \right)}_{\text{Überlappkräfte}}$$

$$+ \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} \right)}_{\text{Abstoßende Kräfte}}$$

Wellenfunktion:

$$\psi = \psi_A \cdot \chi_s \quad \uparrow\uparrow$$

$$= \psi_s \cdot \chi_A \quad \uparrow\downarrow$$

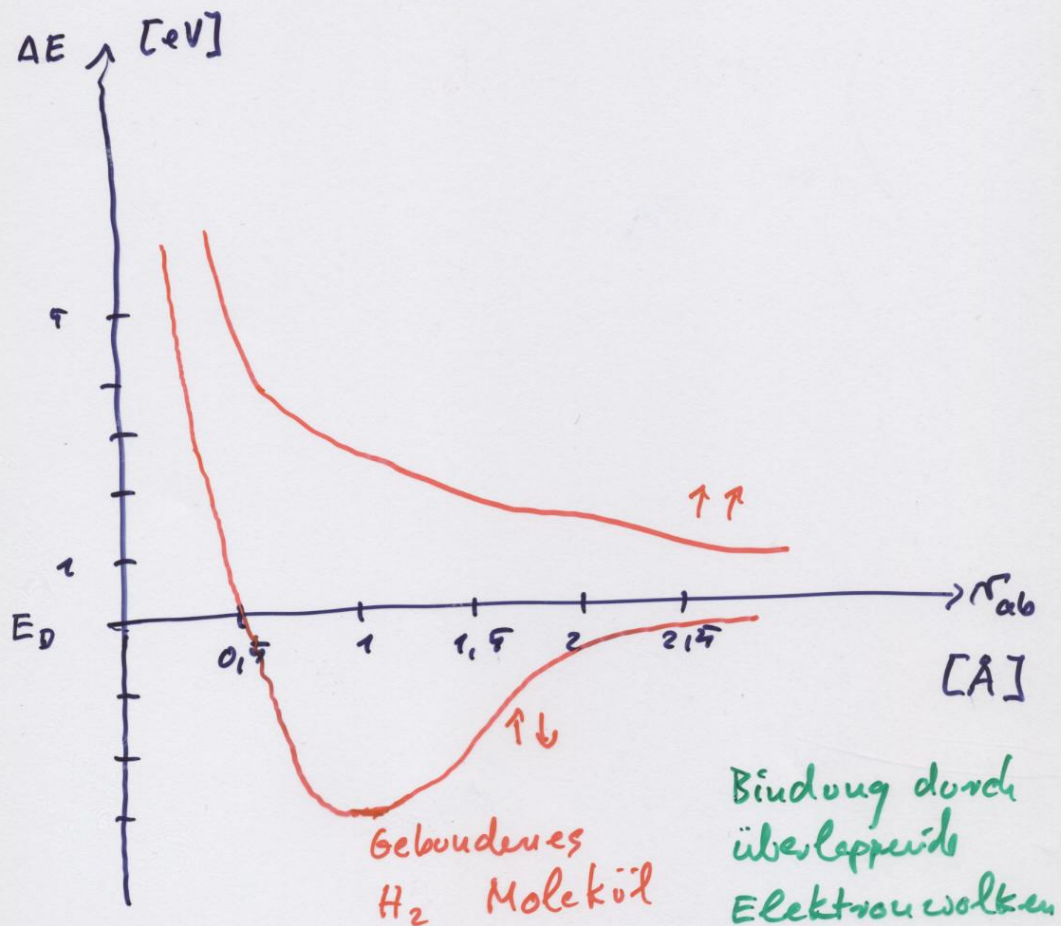
↳ Räuml. W.F.



$$\psi_{s/A}(1,2) = [\psi_a(1) \cdot \psi_b(2) \pm \psi_b(1) \cdot \psi_a(2)] \cdot c$$

$c$ : Normierung

Setze in Schrödingergleichung ein,  
iteriere (Hartree-Fock-Verfahren)



## 12.2 Energiezustände

Ansatz:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_1} \nabla^2 - \frac{\hbar^2}{2M_2} \nabla^2 + V(r_{12})$$

Bewegung von Kern 1 und 2 im Verbund

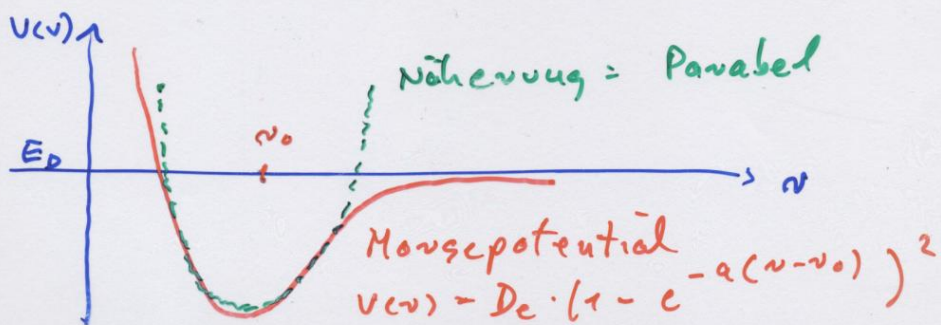
$$\rightarrow \vec{r} = \vec{r}_{12}, \quad \mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$$

Schwerpunktsystem

$$\rightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{j(j+1)}{r^2}$$

2 Energieanteile:

Rotation } der Kerne  
Vibration }



## Energie niveaus des bewegten Kerns

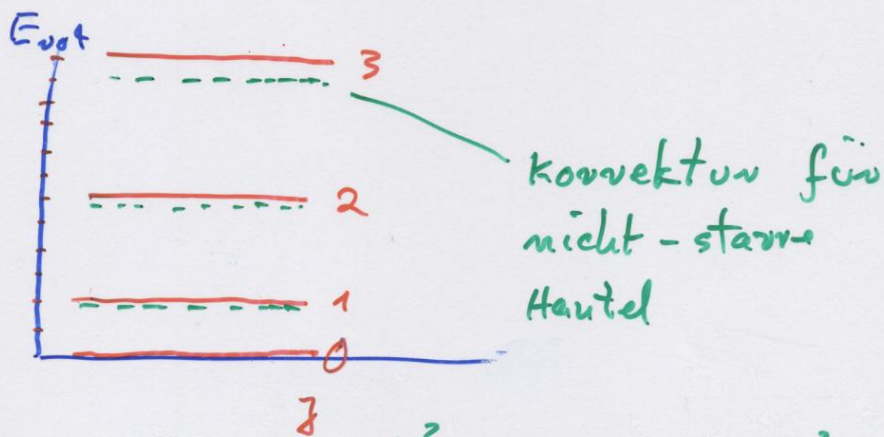
### 1. Rotation:

Annahme: starre Hantel

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2\Theta} J(J+1), \quad \Theta \text{ Trägheitsmom.} \\ J = 0, 1, \dots \quad = \mu r_0^2$$

Übergangsenergie:

$$\Delta E_{\text{rot}}(J_1, J_2) = E_{\text{rot}}(J_1) - E_{\text{rot}}(J_2) \\ = \pm \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \cdot 2J \\ \text{für } \Delta J = \pm 1$$

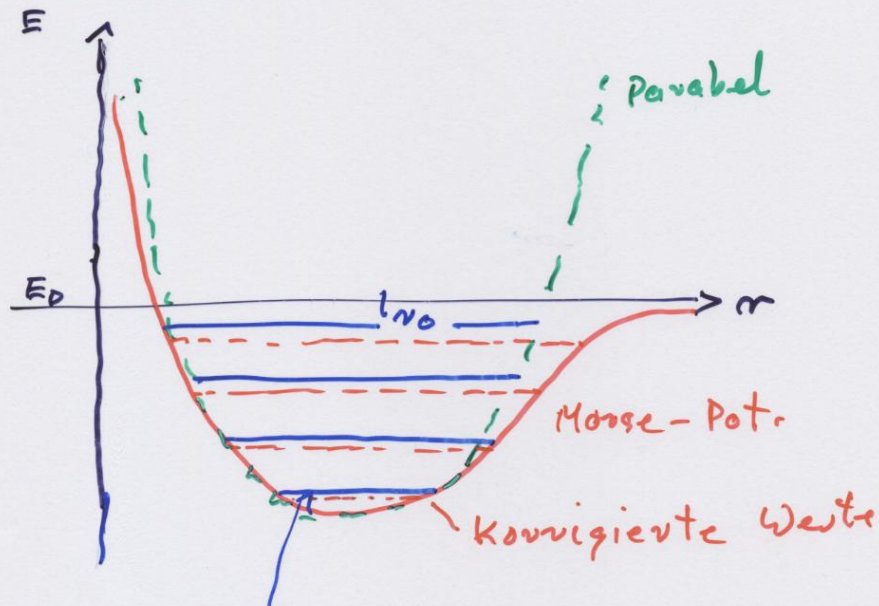


$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} (J(J+1)) - C J^2(J+1)^2 + \dots$$



## 2) Vibration

Annahme Parabel  $\hat{=}$  harmon. Oszillator



$$E_{vib} = \hbar \omega \left( v + \frac{1}{2} \right), \quad v = 0, 1, 2, \dots$$

Vibrationsquantenzahl

$$E_{vib} = \hbar \omega \left( v + \frac{1}{2} \right) - c \hbar \omega \left( v + \frac{1}{2} \right)^2 + \dots$$

B<sub>0</sub>: HCl

$$E_D = 4,4 \text{ eV}$$

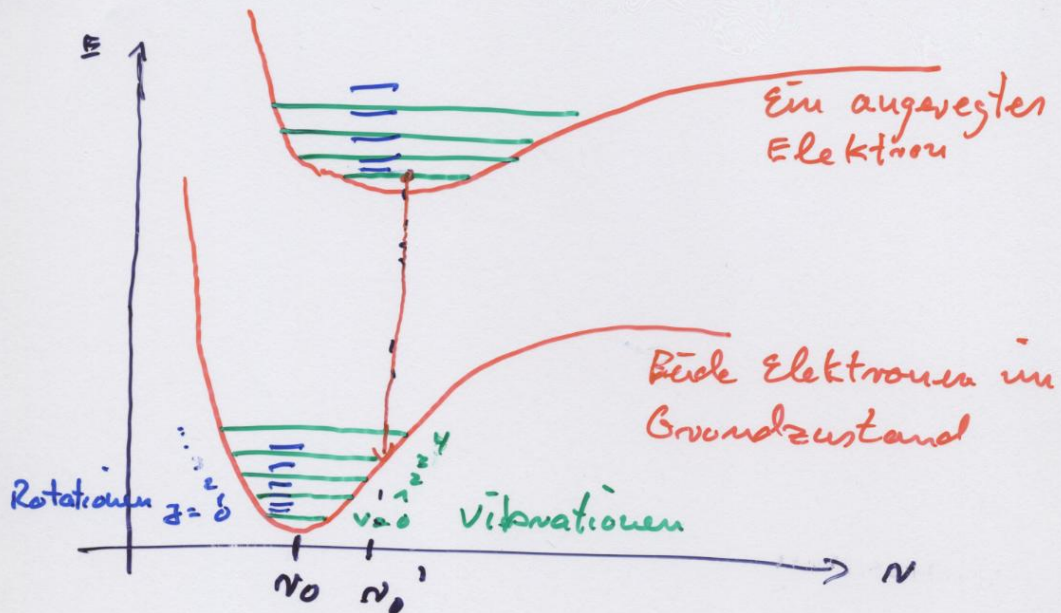
$$v_0 = 1,3 \text{ Å}$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu v_0^2} = 1,5 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$$

$$\Rightarrow \Delta E_{rot} = 2,6 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \cdot J$$

$$\Delta E_{vib} = 0,3 \text{ eV} \cdot v$$

### 3 ] Anregungen in der Hülle



Übergang zw. angeregtem System  
und abgeregtem System geht in einen  
hoch angeregten Vibrationszustand  
[Frank - Condon - Prinzip]

(Da Kerne nicht so schnell näher kommen  
können wg. ihrer Trägheit)