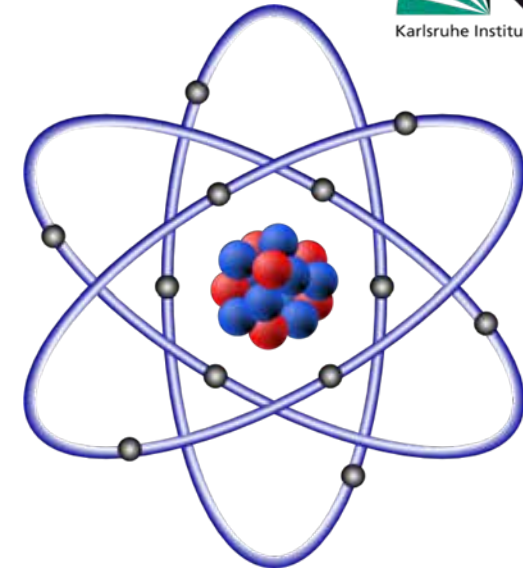


Atome, Kerne & Moleküle



Thomas Müller, Institut für Experimentelle Teilchenphysik

12. Physik der Moleküle

- 12.1 Molekülbindungen
- 12.2. Energiezustände
- 12.3 Systeme mit vielen gebundenen Atomen

12. Physik der Moleküle und Festkörper

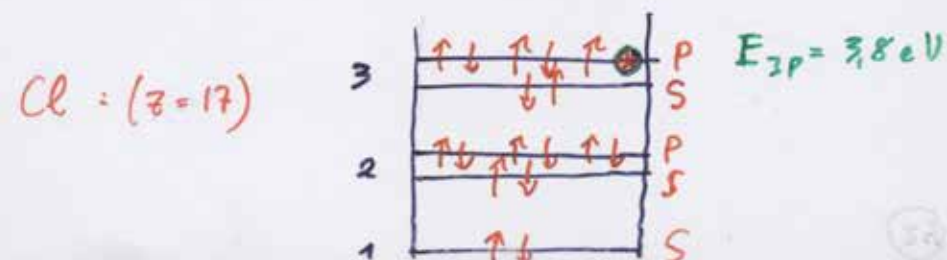
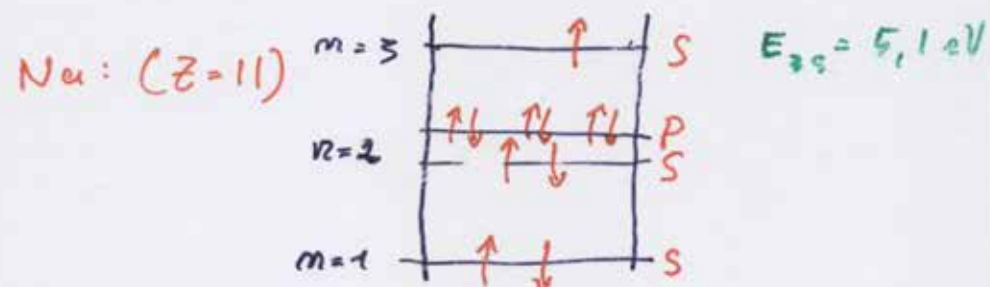
12.1. Bindungen

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

1. Heteropolare Bindungen (Ionenbindungen)

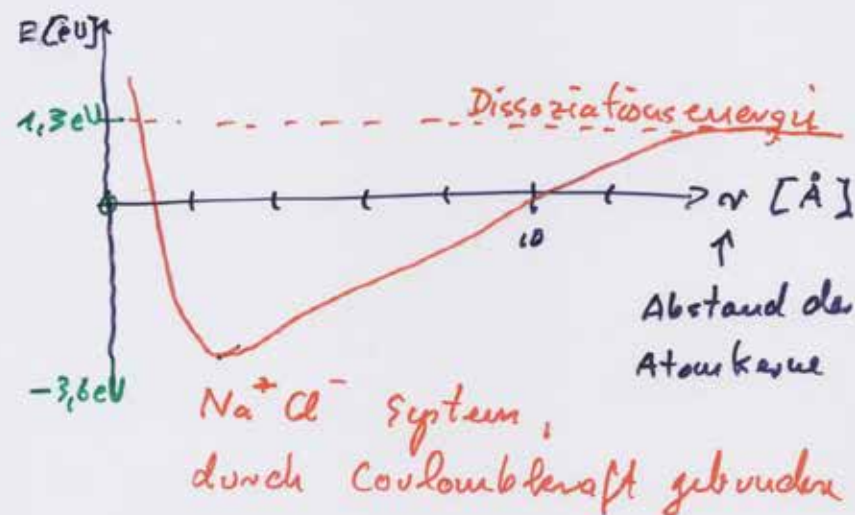
Anziehung zw. pos. und neg. geladenen
Ionen

Bsp: Na Cl : Ionisches Molekül



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

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



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

Bsp: H_2



Berücksichtige
alle Kräfte
zwischen 1, 2, a, b

Ausatz:

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

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

$$- \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{a2}} \right)}_{\text{Überlappkräfte}}$$

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

Wellenfunktion:

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

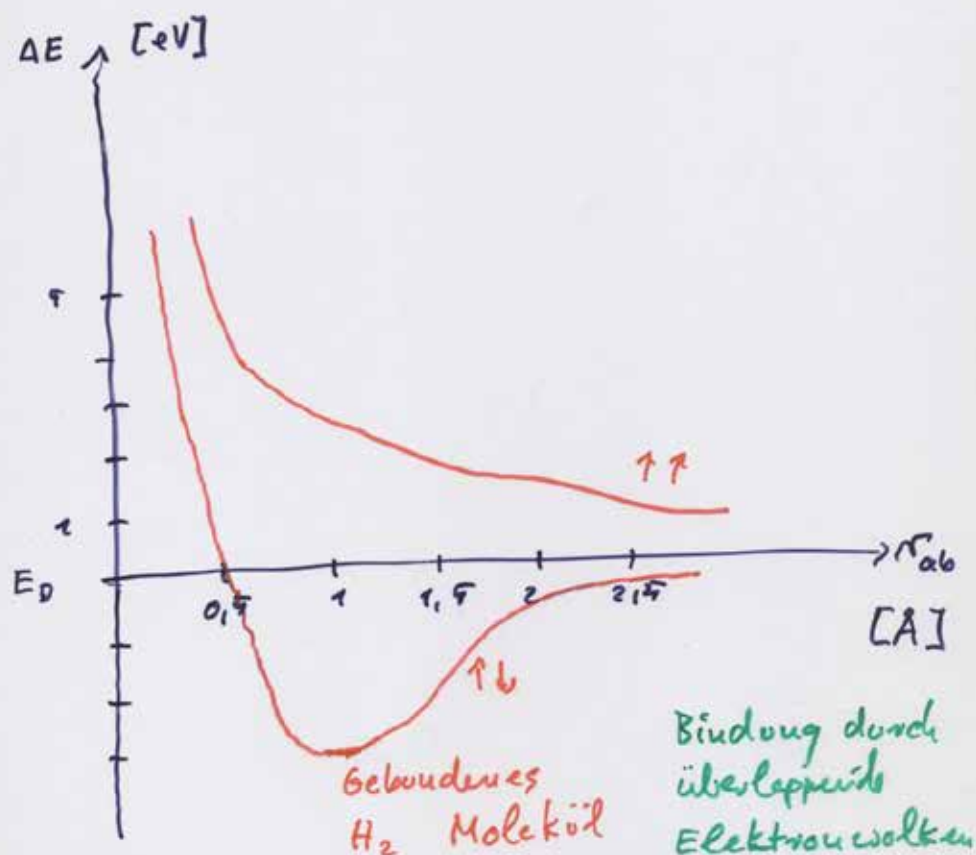
$$= \psi_s \cdot \chi_A \quad \uparrow\downarrow$$

↳ 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

Ausatz:

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

Bewegung von Kern 1 und 2 im Verbund

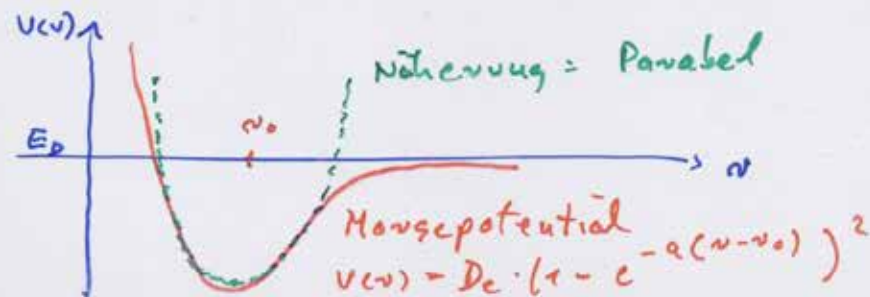
$$\rightarrow \vec{v} = \vec{v}_{12}, \quad \mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$$

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 } des Kernes
Vibration }



Energie niveaus des bewegten Kerns

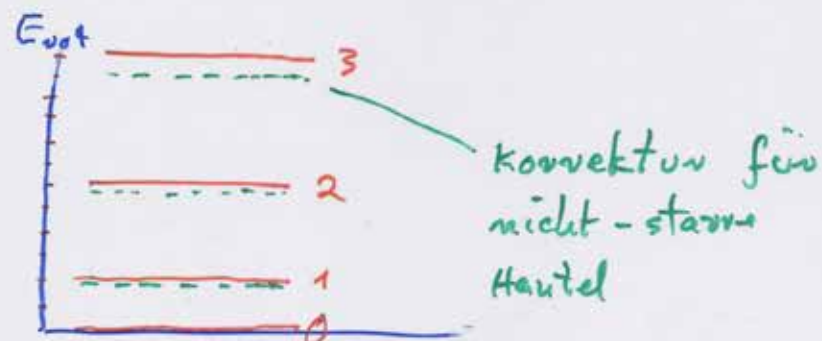
1. Rotation:

Annahme: starrer Hantel

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

Übergangsenergie:

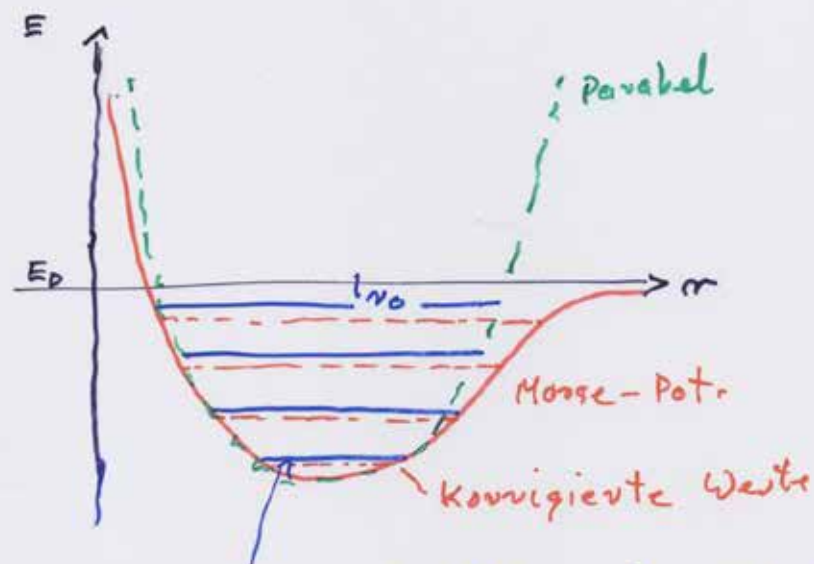
$$\Delta E_{\text{rot}}(J_1, J_2) = E_{\text{rot}}(J_1) - E_{\text{rot}}(J_2) \\ = \pm \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \cdot 2J \\ \text{für } \Delta J = \pm 1$$



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

2) Vibration

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



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

Vibrationsquantenzahl

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

Be: HCl

$$E_D = 4.4 \text{ eV}$$

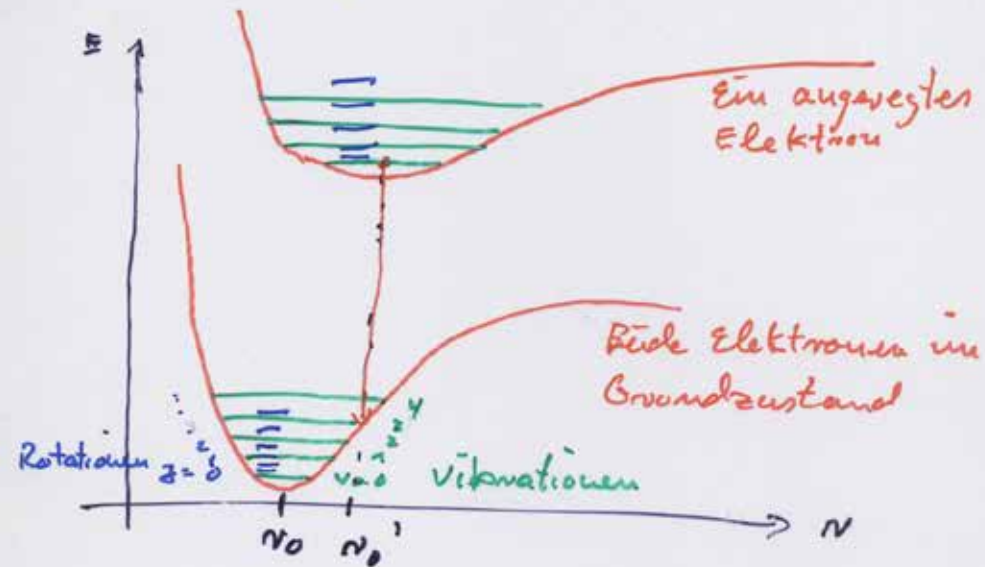
$$v_0 = 1.3 \text{ \AA}$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu v_0^2} = 1.5 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$$

$$\Rightarrow \Delta E_{rot} = 2.6 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \cdot J$$

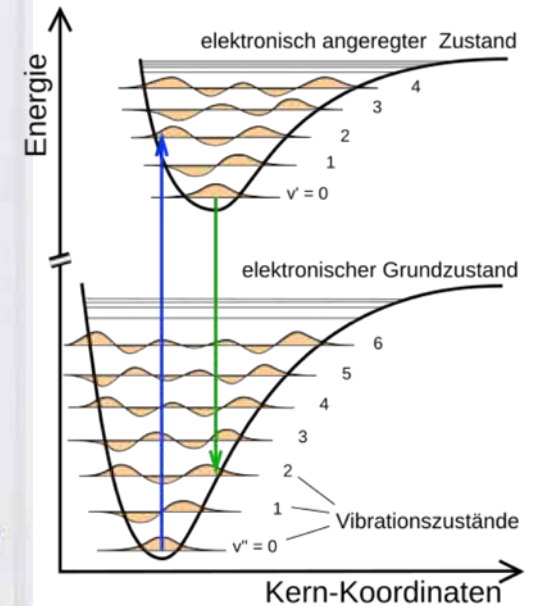
$$\Delta E_{vib} = 0.3 \text{ eV} \cdot v$$

3] Anregungen in der Hülle



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

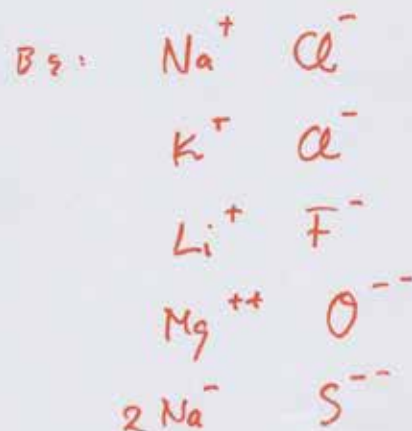
(Da Kerne nicht so schnell näher kommen
können wg. ihrer Trägheit)



12.3 Systeme mit vielen gebundenen Atomen

1. Bindungen

a. Heteropolare Bindung: Anziehung von Ionen



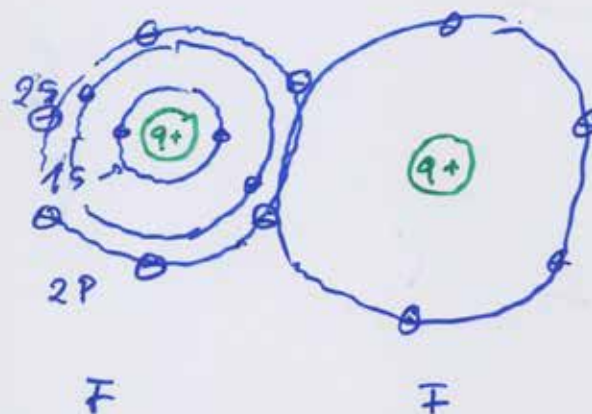
Gebunden durch
Elektronenaustausch,
elektrost.
Anziehung

b. Homöopolare Bindung: Austausch von Elektronen der äußeren Hülle



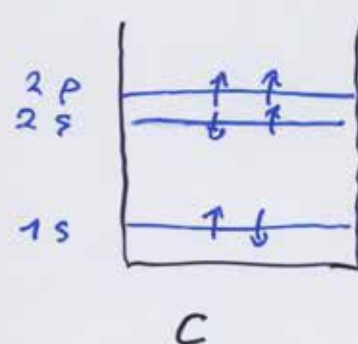
Hüllenabstoßung

Bsp: $F - F$ ($z = 9$)

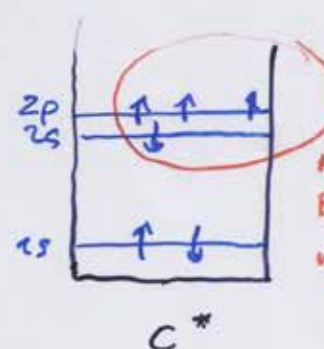


Hüllenabschluss
in 2p
Schale

Spezialfall: Kohlenstoffbindung

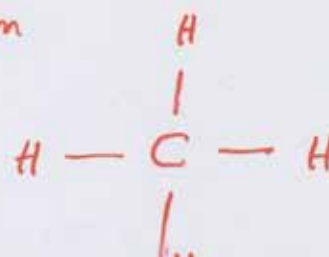


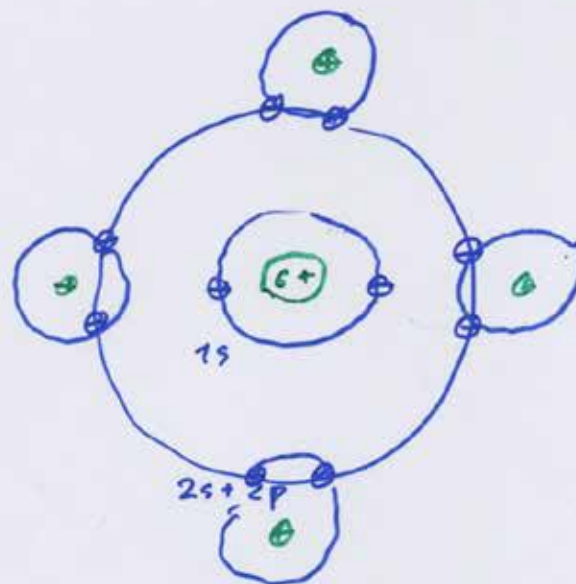
+ 2 eV



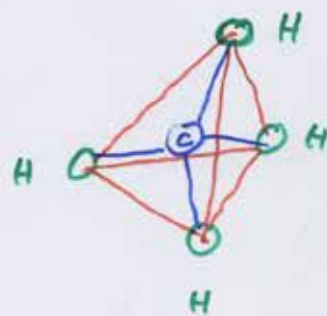
Kovalente
Bindung
möglich

Bsp: Methan

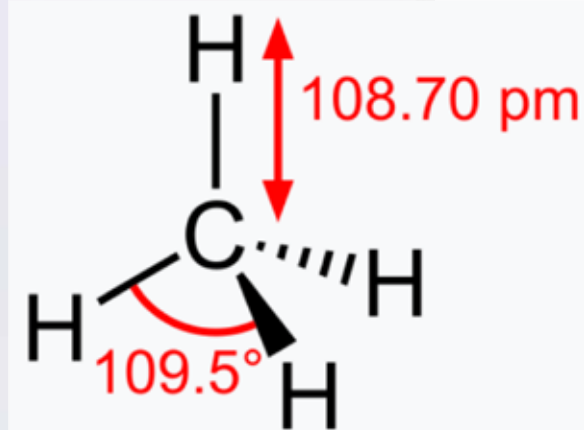




Ordnet sich räumlich an:



Tetraeder

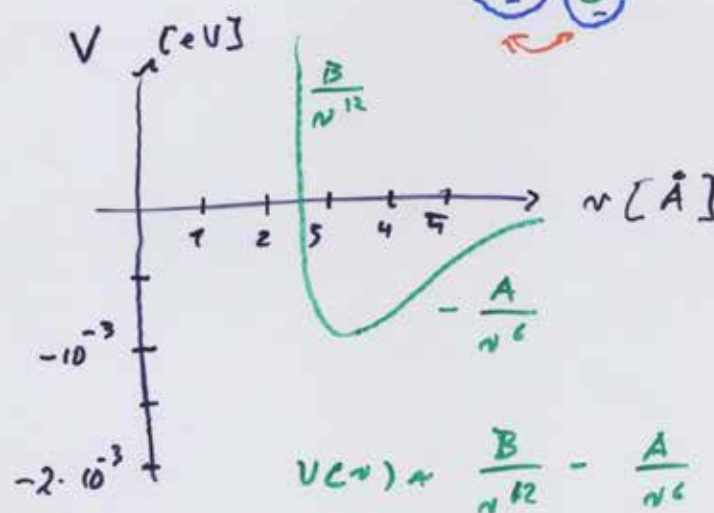


C. Van der Waals - Bindung

Edelgasatome mit abgeschlossener Hülle!!

Van der Waal:

- Deformation der Hüllen
- Bildung von Dipolen
- Ausrichtung und Anziehung



Bz: He - He: $V_{\min} = -0,8 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$

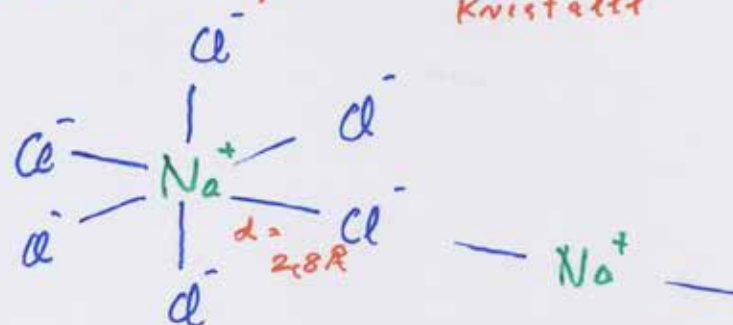
vgl. H - H: $V_{\min} = -4,5 \text{ eV}$

→ Bindung nur bei sehr tiefen Temperaturen

2. Festkörper : Kristalle

a. Ionische Kristalle

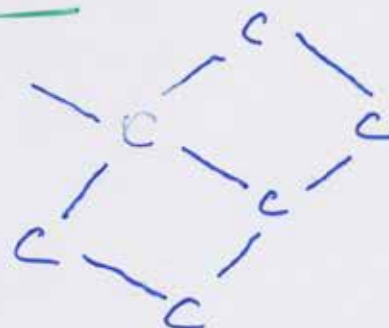
Alkali-, Halogene : kubische ionische Kristalle



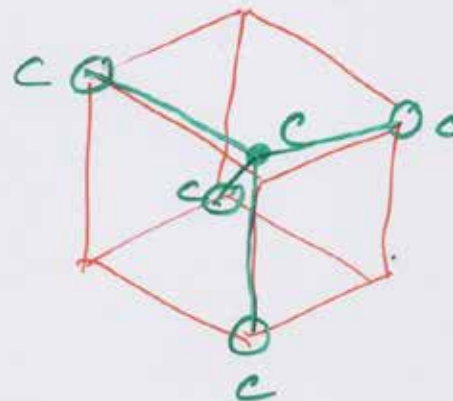
Feste Bindung durch elektrost. Anziehung
 $V = -16,5 \text{ eV}$ pro Ionenpaar.

b. Kovalente Kristalle

z.B. C



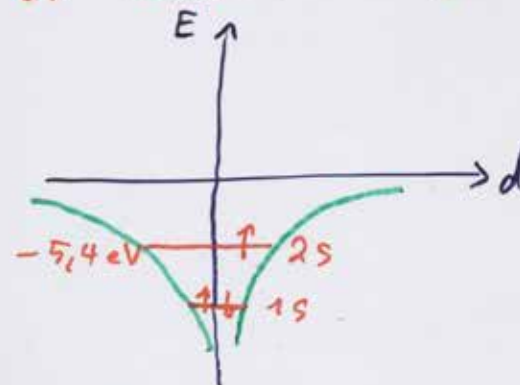
Bs. Diamant



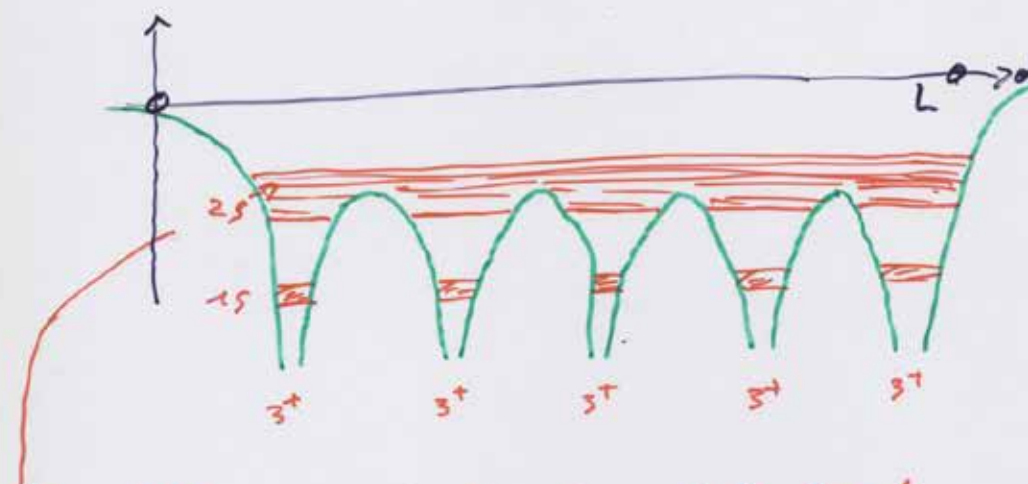
c Metallische Kristalle

Gitter aus pos. Ionen mit freien Valenzelektronen

Bsp. Lithium ($z = 3$)

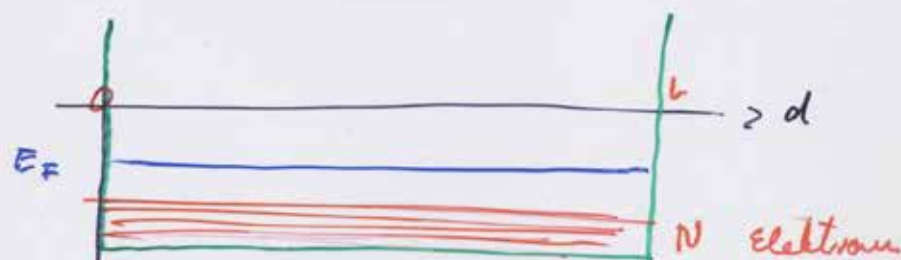


Lithiumkristall (1d)



Valenzelektronen: Gas im Valenzband
frei beweglich

Beschreibung durch Annäherung eines
Kontinuumspotentials (Fermi Gas Modell)





this is the end