---

10) Sei r der Atomradius und sei die Energie freier Atome $E_A = t/r^2 - Z_{eff}/r + C/r$. Typische Größen sind $t = 3$ für den kinetischen Energie-Parameter, $Z_{eff} = 4$ für die effektive Kernanziehung; und $C = 1$ für den Coulombschen Abstoßungsparameter.
(a) Bestimme den optimalen Atom-Radius r_A aus $dE_A/dr = 0$.
(b) Wie groß sind bei den Atomen die kinetische Energie T_A, die Kern-Elektronen-Anziehungs-Energie V_A und die Coulomb-Abstoßungs-Energie C_A? Wie groß sind kinetische, potentielle, Gesamtenergie?
(c) Bei "Sharing" der Elektronen zwischen zwei Atomen sinkt der kinetische-Energie-Parameter t typischerweise um 10% auf 2.7, bei "Charge Transfer" von Elektronen von den elektropositiven zu wesentlich stärker elektronen-anziehenden, stark elektronegativen Atomen steigt die mittlere effektive Kernladung Z_{eff} typischerweise um 5% auf 4.2. Sogenannte Elektronenpaarung hat eine Ausweichen der Elektronen vor einander (!!!), "Elektronen-Korrelation", mit Absinken des Abstoßungsparameters typischerweise um 20% auf $C = 0.8$ zur Folge. Setze ein Molekül aus unveränderten Atomen ($r = r_A$) zusammen. Gib für die drei Fälle einer Sharing-Bindung, einer ionischen Bindung, einer Pairing-Bindung jeweils an: $\Delta T, \Delta V, \Delta C, \Delta E_{pot}, \Delta E_{tot}$.
(d) Bestimme den Radius r_M der "Atome im Molekül" aus $dE_M/dr = 0$.
(e) Wie groß ergeben sich die Energieänderungen bei korrekten "Atom-Radien". Mache eine Tabelle und vergleiche mit (c)!

11) Die LCAO-Näherung: Mit Hilfe des Ansatzes $\phi(\vec{r}) = c_1 a(\vec{r}) + c_2 b(\vec{r})$, wobei a und b reelle H-Atomorbitale sein sollen (und zwar um die Kerne zentriert) wurde die Energie für das H_2^+-Molekül berechnet. Für die Matrixelemente $H_{aa} =< a|\hat{H}|a >$ und H_{ab} sowie das Überlappungsintegral S erhält man nach Integration über die H-Atom-1s-AOs folgende Ausdrücke als Funktion des Abstandes R:

$$H_{aa} = -\frac{1}{2} + (1 + \frac{1}{R})e^{-2R}$$

$$H_{ab} = (\frac{1}{R} - \frac{1}{2} - \frac{7}{6}R - \frac{1}{6}R^2)e^{-R}$$

$$S = (1 + R + \frac{1}{3}R^2)e^{-R}$$

Tabellieren Sie $H_{aa}, H_{ab}, E_+ = \frac{H_{aa}+H_{ab}}{1+S}, E_- = \frac{H_{aa}-H_{ab}}{1-S}, \beta = H_{ab} - SH_{aa}$ im Bereich $R = 1$ bis 10 a_o, stellen Sie diese Größen graphisch dar und kommentieren Sie das Ergebnis. Weitere Fragen: Warum gibt es zwei Lösungen E_+ und E_-? Was stellen diese Lösungen dar? Wie kann man E_+ und E_- als Funktion von H_{aa} und β schreiben?