

## Aufgabe 10

Die Funktion einer Matrix  $\underline{\underline{\mathbf{B}}} = f(\underline{\underline{\mathbf{A}}})$  ist definiert durch die Taylor-Entwicklung der Funktion  $f(x)$  an der Stelle  $x = \underline{\underline{\mathbf{A}}}$ .

- Wie lauten die Matrixelemente der Matrix  $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$  in der Basis der Eigenzustände der Matrix  $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$ ?
- Wie kann man daher vorgehen, wenn die Matrix  $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$  nicht in der Basis der Eigenzustände gegeben ist?
- Finden Sie die Wurzel der Matrix:

$$\underline{\underline{S}} = \begin{pmatrix} 1 & s \\ s & 1 \end{pmatrix}$$

## Aufgabe 11

Betrachten Sie die folgenden beiden Hybridorbitale, die durch Linearkombination von 2 p-Valenzorbitalen am selben Atom gebildet wurden:

$$\begin{aligned} |h_1\rangle &= N [|p_x\rangle + 1.29152|p_y\rangle] \\ |h_2\rangle &= N [|p_x\rangle - 1.29152|p_y\rangle] \end{aligned}$$

Beide Hybride haben die Form eines p-Orbitals, dessen Achse in der xy-Ebene liegt.

- Bestimmen Sie die Normierungskonstante  $N$ .
- Zeigen Sie, dass die beiden Hybride nicht orthogonal sind.
- Welchen Winkel bilden die Achsen der beiden Hybride miteinander?
- Addieren Sie zu beiden Hybridoren noch einen s-Anteil:

$$\begin{aligned} |\chi_1\rangle &= a|h_1\rangle + b|s\rangle \\ |\chi_2\rangle &= a|h_2\rangle + b|s\rangle \end{aligned}$$

Welche Werte müssen die Koeffizienten  $a$  und  $b$  haben, damit diese neuen Hybride normiert und orthogonal sind?

## Aufgabe 12

In der Vorlesung wurden zwei Methoden (VB und MO) für die Beschreibung der chemischen Bindung zwischen zwei Atomen A und B vorgestellt. Beide gehen davon aus, dass an jedem Zentrum ein normiertes Atomorbital  $\chi_A(r)$  bzw.  $\chi_B(r)$  zur Verfügung stehen.

- Wie lauten die Ansätze für die Orts-Wellenfunktion des untersten Zustandes in der MO- bzw. der VB-Theorie?
- Leiten Sie für beide Fälle den Wert der Normierungskonstanten her (ausgedrückt im Überlappintegral  $S = \langle \chi_A | \chi_B \rangle$ ).
- Skizzieren Sie den Verlauf der Potentialkurven, die man mit beiden Methoden für das Molekül  $\text{H}_2$  erhält. Welches Modell gibt das Dissoziationsverhalten richtig wieder, und warum? Was ist der Grund für das Versagen des anderen Modells?