Die Born-Oppenheimer Näherung

Erinnerung: Schrödingergleichung (S.Gl.) für Mehrelektronenatome

Jetzt: Moleküle

$$\boxed{\hat{H}_T \Psi_T = E_T \Psi_T}$$

mit $\hat{H}_T = \hat{T}_n + \hat{H}_e$

sehr komplex
sehr aufwändig

Kerne schwerer als die e^-
" träger "

Näherung: Kerne stehen still

$\Rightarrow \hat{T}_n \approx 0$

1) Erstmal $\hat{T}_n$ vernachlässigen

B.O.N.

2) $\hat{T}_n$ doch nicht null
aber verwende Lösung der el. S.Gl.; vernachlässige Terme
(sog. nicht-adiabatische Kopplungen)

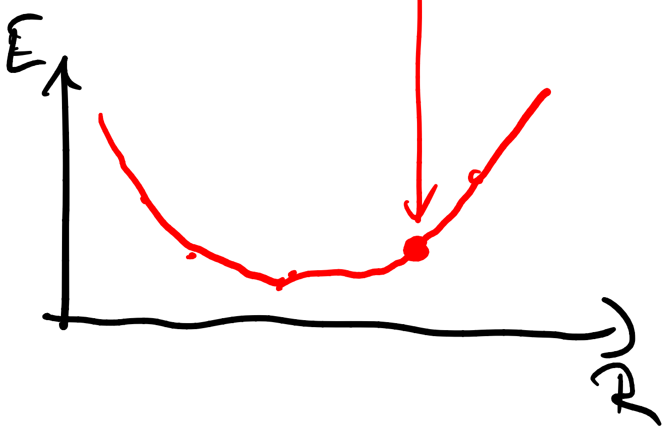
elektronische S.Gl.
komplex
aufwändig

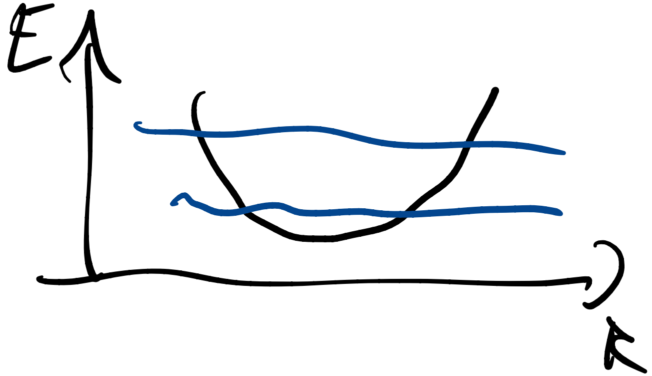
$$\boxed{\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e}$$

Kern-S.Gl.

$$\boxed{\hat{H}_n \chi_n = E_n \chi_n}$$

komplex
aufwändig





$$\hat{T}_n(R) = -\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \nabla_\alpha^2$$

$$r_{i\alpha} = |\vec{r}_i - R_\alpha| \qquad \{\vec{r}_i\} = r$$

$$R_{\alpha\beta} = |\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta| \qquad \{\vec{R}_\alpha\} = R$$

$$\hat{H}_e \left\{ \begin{aligned} \hat{T}_e(r) &= -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 \\ \hat{V}_{en}(r,R) &= -\sum_\alpha \sum_i \frac{Z_\alpha e}{4\pi\varepsilon_0 r_{i\alpha}} \\ \hat{V}_{ee}(r) &= +\sum_i \sum_{j>i} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}} \\ \hat{V}_{nn}(R) &= +\sum_\alpha \sum_{\beta>\alpha} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{4\pi\varepsilon_0 R_{\alpha\beta}} \end{aligned} \right.$$