



Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

Übungsleiter: Tanja Asthalter · Zimmer 9-356 · Tel. 4464 · e-mail t.asthalter@ipc.uni-stuttgart.de

Übungsblatt 28

8. 2. 2005

Aufgabe 28.1

Das Stickstoffatom (Elektronenkonfiguration $2s^2 2p^3$) kann drei verschiedene elektronische Zustände besitzen, die sich nur in der Verteilung der drei p-Elektronen auf ihre Orbitale unterscheiden.

- Skizzieren Sie für jeden dieser Zustände die Besetzung der Orbitale $2s$ und $2p$ ($m_l = -1, 0, 1$).
- Bestimmen Sie aufgrund der Hundschen Regeln die energetische Reihenfolge der Zustände.
- Geben Sie für denjenigen Zustand, der den größten Bahndrehimpuls besitzt, S , L , und alle möglichen Werte des Gesamtdrehimpulses J an.
- Geben Sie für diesen Zustand die energetische Reihenfolge der Zustände mit verschiedenen Werten von J an.

Aufgabe 28.2

- Stellen Sie den Hamilton-Operator für H_2^+ und für H_2 auf! Geben Sie für jeden Term kurz an, welche Energie/Wechselwirkung er beschreibt.
- Skizzieren Sie das bindende und das antibindende Molekülorbital des Wasserstoffmoleküls! Wo ist die Elektronendichte (proportional zu Ψ^2) jeweils maximal?
- Zeigen Sie, daß die Molekülorbitale des H_2

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}}(\varphi_A + \varphi_B) \quad \text{und} \quad \sigma^* = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}}(\varphi_A - \varphi_B) \quad \text{mit} \quad S = \int \varphi_A \varphi_B dV$$

orthogonal zueinander sind, wenn φ_A und φ_B jeweils normiert, aber nicht orthogonal zueinander sind.

Aufgabe 28.3

Bei der Aufstellung von hybridisierten Wellenfunktionen werden aus einer s-Funktion ψ_s und einer bis drei p-Funktionen ($\psi_{p_x}, \psi_{p_y}, \psi_{p_z}$) eine entsprechende Anzahl Basisorbitale gebildet, die genauso wie die Ausgangsorbitale orthonormiert sind.

- Bestimmen Sie die Koeffizienten der beiden Hybridorbitale in der Basis der Ausgangsorbitale für ein sp -Hybrid, dessen „sp-Keulen“ längs der x -Achse orientiert sind. Normieren Sie die erhaltenen Orbitale.
- Ist der Funktionswert der sp -Hybridorbitale für $x = 0$ gleich Null, kleiner oder größer als Null? Wo liegt also die Knotenfläche?
- Bestimmen Sie die drei Hybridorbitale (Ausgangsorbitale seien diesmal $\{\psi_s, \psi_{p_x}, \psi_{p_y}\}$) für ein sp^2 -Hybrid. Ein Orbital sei längs der x -Achse orientiert, die beiden in einem Winkel von 120° in der xy -Ebene. Normieren Sie die erhaltenen Orbitale.

Aufgabe 28.4

Skizzieren Sie das MO-Schema der folgenden zweiatomigen Moleküle: Be_2 , BeH , OH , HeH^+ . Verwenden Sie für die Energieskala der Atomorbitale die in Übung 27 angegebenen Ionisationspotentiale.

Aufgabe 28.5

Skizzieren Sie für die folgenden Molekülorbitale das Überlappungsintegral in Abhängigkeit vom Bindungsabstand:

- | | |
|---|---|
| a) $1s-1s \sigma$ | b) $1s-1s \sigma^*$ |
| c) $1s-2p_z \sigma$ (Bindung längs z-Achse) | d) $1s-2p_x$ (Bindung längs z-Achse) |
| e) $1s-2s \sigma$ | f) $2p_x-3d_{xz} \pi$ (Bindung längs z-Achse) |

Die Übungen sind im PDF-Format erhältlich unter <http://www.ipc.uni-stuttgart.de/~tanja/pcuebungen.html>.