

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie für LA Chemie (Modul VM11)

Blatt 10

Aufgabe 27: *Das H_2^+ -Molekulation.*

Die aus einer LCAO-MO-Variationsrechnung gewonnenen Ausdrücke für die niedrigsten bindenden und antibindenden MOs von H_2^+ sind

$$\psi_{1\sigma_g} = \frac{1}{\sqrt{2(1+S_{AB})}}(\varphi_A + \varphi_B) \quad (1)$$

und

$$\psi_{1\sigma_u} = \frac{1}{\sqrt{2(1-S_{AB})}}(\varphi_A - \varphi_B) \quad (2)$$

und die zugehörigen elektronischen Energien

$$E_{1\sigma_g} = \frac{H_{AA} + H_{AB}}{1 + S_{AB}} \quad (3)$$

und

$$E_{1\sigma_u} = \frac{H_{AA} - H_{AB}}{1 - S_{AB}} \quad (4)$$

mit den in der Vorlesung genannten Definition der auftretenden Größen.

1. Zeichnen Sie die beiden Potentialkurven und MOs qualitativ.
2. Berechnen Sie Bindungsenergie

$$\Delta E = E_1 - H_{AA} \quad (5)$$

mit und ohne der Näherung $S_{AB} \approx 0$.

3. Berechnen Sie die Anregungsenergie

$$\Delta \tilde{E} = E_{1\sigma_u} - E_{1\sigma_g} \quad (6)$$

mit und ohne der Näherung $S_{AB} \approx 0$.

4. Wenn Sie zu H_2^+ ein Elektron hinzufügen, entsteht H_2 . Erwarten Sie für H_2 einen kleineren oder größeren Gleichgewichtsabstand R_0 ? Begründen Sie Ihre Aussage.

Aufgabe 28: *Zweiatomige Moleküle.*

1. Arrangieren Sie die Spezies O_2^+ , O_2 , O_2^- , O_2^{2-} gemäß steigender Bindungslänge. Geben Sie jeweils die Bindungsordnung an.
2. Von welchen der Moleküle N_2 , Li_2 , O_2 , C_2 , F_2 und NO würden Sie erwarten, dass das Hinzufügen eines Elektrons eine Stabilisierung bewirkt? Bei welchen wirkt sich das Entfernen eines Elektrons stabilisierend aus?
3. Warum ist O_2 im Grundzustand ein Triplett?