

Besprechung am 10.02.2023

Übungsblatt 12

1) Termsymbole und MO-Diagramm

- a) Welche der folgenden Übergänge sind elektrisch erlaubt? Erklären Sie hierfür kurz die verschiedenen Komponenten der Termsymbole und die Auswahlregeln für elektrische Dipolübergänge.
- i. ${}^2\Pi \leftrightarrow {}^2\Pi$
 - ii. ${}^3\Pi \leftrightarrow {}^3\Pi$
 - iii. $\Sigma \leftrightarrow \Delta$
 - iv. $\Sigma^+ \leftrightarrow \Sigma^-$
 - v. ${}^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow {}^1\Delta_u^+$
- b) Skizzieren Sie das Molekülorbitalschema von N_2 . Das erste $p\pi$ -Molekülorbital liegt unterhalb des ersten $p\sigma$ -Molekülorbitals. Welches Molekülorbital ist das HOMO und welches das LUMO? Geben Sie außerdem das Termsymbol für den Grundzustand von N_2 an und spezifizieren Sie die Parität und (+/-)-Symmetrie.