

Besprechung am 18.02.2022

Übungsblatt 13

1) MO Schema

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.

2) Termsymbole

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. ${}^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow {}^1\Delta_u^+$

3) Variationsprinzip für homonukleare zweiatomige Moleküle

Anwendung des Variationsprinzips liefert für homoatomare zweiatomige Moleküle Orbitalenergien von:

$$\varepsilon_{\pm} = \frac{\alpha \pm \beta}{1 \pm S}$$

Für ein heteroatomares zweiatomiges Molekül kann gezeigt werden, dass sich die Orbitalenergien unter Vernachlässigung des Überlapp-Integrals ($S = 0$) ergeben zu:

$$\varepsilon_{\pm} = \frac{1}{2}(\alpha_A + \alpha_B) \pm \frac{1}{2}(\alpha_A - \alpha_B) \sqrt{1 + \left(\frac{2\beta}{\alpha_A - \alpha_B}\right)^2}$$

Die Ionisierungsenergien von Xe 5p- und O 2p-Elektronen betragen 12,1 und 13,6 eV. Welche Energien und Zusammensetzungen haben die bindenden und antibindenden Molekülorbitale von XeO ? Verwenden Sie ein Resonanz-Integral von -1,2 eV.