

Übungsblatt 13

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.
- ${}^2\Pi \leftrightarrow {}^2\Pi$
 - ${}^3\Pi \leftrightarrow {}^3\Pi$
 - $\Sigma \leftrightarrow \Delta$
 - $\Sigma^+ \leftrightarrow \Sigma^-$
 - ${}^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow {}^1\Delta_u^+$
- b) Erstellen Sie ein Diagramm der MO-Energieniveaus für NF und bestimmen Sie das Termsymbol im Grundzustand. Bedenken Sie, dass das Sigma-Bindungsortital (σ_3) eine niedrigere Energie als das π -Bindungsortital hat (π_1). (Hinweis: Die Parität des Zustandes muss nicht bestimmt werden.)