

1 Molekülbindungen

Erklären Sie qualitativ

- (a) warum es bei der Zusammenführung zweier Atome zu einem Molekül zur Aufspaltung in zwei Energieniveaus kommt.
- (b) warum die symmetrischen und anti-symmetrischen Wellenfunktionen einen bindenden bzw. antibindenden Zustand bilden (anhand der Energie-Abstands-Funktion).
- (c) Wo erwartet man bei tiefen Temperaturen den Bindungsabstand der Moleküle. Was geschieht bei höheren Temperaturen?
- (d) Wieso kommt es nicht zur Bildung eines He₂-Moleküls?

2 KCl-Molekül

- (a) Schätzen Sie die Bindungsenergie eines KCl-Moleküls ab, indem Sie die elektrostatische potentielle Energie berechnen, wenn sich die K⁺-Ionen und die Cl⁻-Ionen in ihrem Gleichgewichtsabstand 280 pm entfernt befinden. Gehen Sie davon aus, dass jedes Ion eine Ladung vom Betrag 1 *e* trägt.
- (b) Die gemessene Bindungsenergie von KCl beträgt 4,43 eV. Schätzen Sie mithilfe des Ergebnisses aus (a) den Beitrag der sich abstoßenden Elektronenwolken zur Bindungsenergie ab.

3 Lennard-Jones-Potential

Molekül-Bindungen, in denen die Dipol-Dipol-Wechselwirkung dominiert, können durch das Lennard-Jones-Potential beschrieben werden:

$$V_{LJ}(r) = \frac{a}{r^{12}} - \frac{b}{r^6}.$$

$V_{LJ}(r)$ ist die potentielle Energie des einen Atoms relativ zum anderen Atom. Dabei ist r der Abstand zwischen den Atomen und a und b sind positive Konstanten. Dieses Potential ist geeignet, die Wechselwirkungen von Edelgasatomen zu beschreiben. Für Argon ist $a = 1,50 \cdot 10^{-134} \text{ Jm}^{12}$ und $b = 1,03 \cdot 10^{-77} \text{ Jm}^6$.

- (a) Wie sieht $V_{LJ}(r)$ grafisch aus, und was veranschaulicht diese Darstellung?
- (b) Berechnen Sie daraus den Bindungsabstand eines Ar₂-Moleküls im Grundzustand.
- (c) Wie sieht die abstandsabhängige Kraft $F(r)$ zwischen den Atomen aus?
- (d) Welche Arbeit W_A muss aufgewendet werden, um die Atome voneinander zu trennen?

4 Benzol-Molekül

Das ringförmige aromatische Molekül Benzol C_6H_6 hat im ultravioletten Spektralbereich eine charakteristische Absorptionsbande bei 256 nm. Jedes C-Atom bildet sp^2 σ -Bindungen mit einem H-Atom und zwei benachbarten C-Atomen. Zusätzlich tragen noch 6 π -Elektronen zur Bindung bei, welche ein auf dem Ring freies eindimensionales Elektronengas bilden. Berechnen Sie die Wellenlängen des energetisch niedrigsten optischen Übergangs. Vergleichen Sie ihre Ergebnisse mit der oben genannten Absorptionsbande und diskutieren Sie das Ergebnis.

Lösungshinweise:

- Benutzen Sie als vereinfachtes Modell für das Elektronengas einen Potentialkasten (s. frühere Übungsaufgabe) für die 6 π -Elektronen. Besetzen Sie die Elektronen unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips und errechnen sie den niedrigsten Energieübergang.
- Nehmen Sie als Bindungslänge zwischen den C-Atomen $d = 1,4 \text{ \AA}$ an.