

Anorganische Experimentalchemie

6. Übung: Bindungstheorie, VB, MO

1. Beim H_2 -Molekül mögen die 1s-AOs gegeben sein als
1s am Atom A = a
1s am Atom B = b.
Konstruieren Sie zwei geeignete Coulson-Fischer Orbitale.
2. Welches sind die Valenzorbitale bei
 - Hauptgruppen-Elementen
 - Übergangsmetallen?
3. Welche Orbitale dienen zur Polarisierung bei
 - Hauptgruppen-Elementen
 - Übergangsmetallen?
4. Zeichnen Sie je eine sinnvolle Lewis-Formel für den Grundzustand für:
 O_2 , B_2 und S_2^+ .
5. Geben Sie die Bindungsordnungen an für:
 He_2^+ H_2^- Be_2 Li_2
6. Schreiben Sie das komplette π -Resonanzschema für das Ozon-Molekül am (minimaler Basissatz).
7. Erklären Sie, warum beim O_2 -Molekül im Grundzustand ($^3\Sigma_g$) sowie im 1. Angeregten Zustand ($^1\Delta_g$) und im 2. Angeregten Zustand ($^1\Sigma_g$) die Bindungslängen nahezu identisch sind (1.2 Å).
8. Zeichnen Sie die MO Diagramme von a) O_2 b) NO c) C_2
9. Geben Sie nach der 3. Hund'schen Regel die Termsymbole im Grundzustand an für die Atome P, Cl, H, S