

7. Übungsblatt (zu bearbeiten bis 11.06.2007)

26. Erklären Sie den Begriff *Born-Oppenheimer-Näherung*!

27. Stellen Sie den vollständigen Hamilton-Operator für das Wasserstoff-Molekül auf!  
Welcher Teil davon ist der elektronische Hamilton-Operator?

28. Stickstoffmonoxid (NO) ist die einfachste thermisch stabile Verbindung mit ungerader Elektronenzahl.

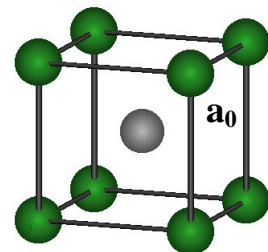
a) Konstruieren Sie ein qualitatives MO-Schema von NO, bezeichnen Sie darin die Atom- und Molekülorbitale und besetzen Sie die Orbitale mit Elektronen! Nehmen Sie an, dass die Energiezustände des O-Atoms etwas niedriger liegen als die des N-Atoms. Warum ist diese Annahme sinnvoll?

b) Erklären Sie mit Hilfe des MO-Schemas folgende experimentelle Ergebnisse:

- Die Ionisierungsenergie von NO ist mit 9.3 eV deutlich niedriger als die von N<sub>2</sub> (15.6 eV) oder CO (14.0 eV).
- Das Nitrosylkation NO<sup>+</sup> als Ionisierungsprodukt von NO ist vergleichsweise stabil.
- Die Bindungslänge von NO<sup>+</sup> ist mit 106 pm deutlich kürzer als die von neutralem NO (115 pm).

29. *Ionenkristalle*: a) Berechnen Sie die molare Gitterenergie von CsCl mit Hilfe eines Born-Haber-Kreisprozesses. Entnehmen Sie die dazu benötigten Daten aus dem *Chemistry WebBook* des *National Institute of Standards and Technology* (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>).

b) Berechnen Sie den Coulomb-Anteil der Gitterenergie. Vergleichen Sie diesen Wert mit der thermodynamischen Gitterenergie aus Teil (a) und berechnen Sie den Anteil der Pauli-Repulsion. Die Gitterkonstante  $a_0$  von CsCl beträgt 4.115 Å, die Madelungkonstante 1.76268.



CsCl-Struktur