

Nr 1

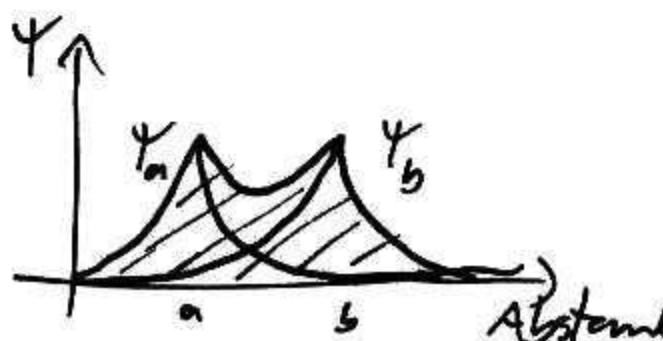
a) Ansatz  $\Psi = c_1 \Psi_a + c_2 \Psi_b$   
 „Linearkomb. aus Atomeigenfkt.“

b)  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \Rightarrow c_1, c_2 \in \{x \in \mathbb{C} \mid |x|^2 \leq 1\}$

c)  $S = |\Psi|^2 = |c_1 \Psi_a + c_2 \Psi_b|^2, \quad 0 < S = \int \Psi_a^* \Psi_b dV$

$\Rightarrow \Psi_a^* \Psi_b > 0 \Rightarrow$  Bindend  $\Rightarrow$  Elektronendichte zwischen Atomkernen wirkt anziehend

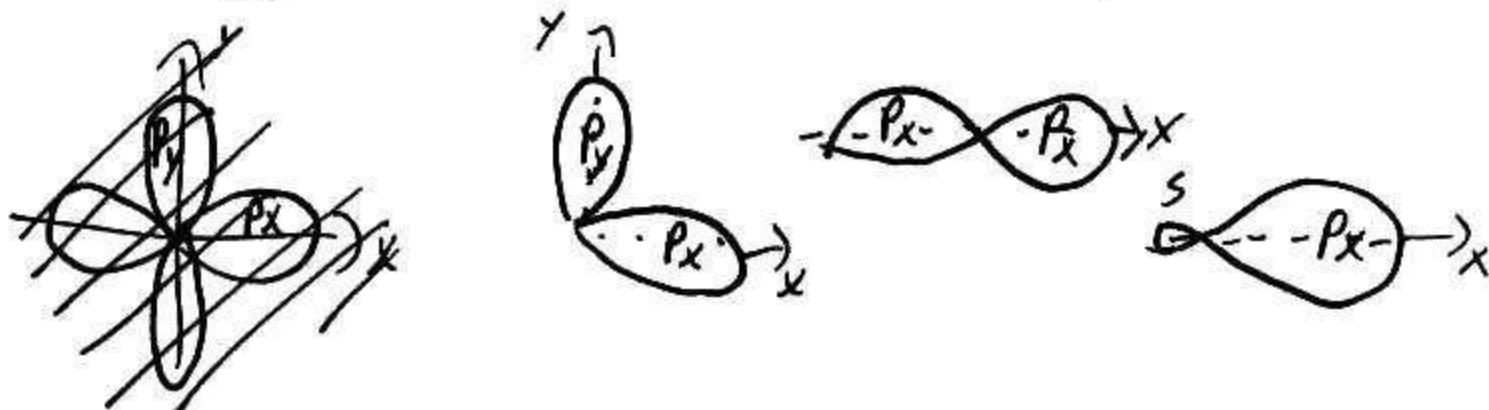
$E = \dots + S \Rightarrow E$  wird kleiner für größere  $S$ .



Nr 2

- a) Kovalente Bindung  $\Rightarrow$  Überlappung d. Orbitale  $\Rightarrow$  Ein Orbital muss zumindest in Richtung d. nächsten Nachbarn zeigen.  $\Rightarrow$  Wahrscheinld. dichte nicht kugelsymmetrisch sondern zylindrisch um Achse bei p Orbitalen etc.

b)

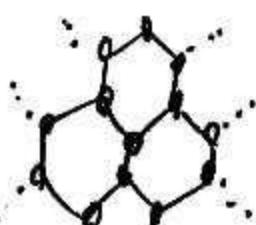


- c) Modellierung eines Orbitals als Linearkombination von Wellenfunktionen

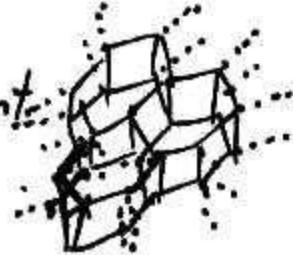
Graphit ist  $sp^2$ -kovalent gebunden  $\Rightarrow$  6-Ecke-Struktur (2D)  
 $\Rightarrow$  Ebenen, die sich aufeinander stapeln lassen

Diamant ist  $sp^3$ -kovalent  $\Rightarrow$  Gitterstruktur in 3D (tetragonal)  
 $\Rightarrow$  3D-Gitter, das sehr stabil ist.

Graphit:



Diamant:



# Übungen zu Exphy IV

Blatt 1 Dalton Bezugswerte

Nr 3

a)	Bindungsart	Eigenschaft	Beispiel (+Bind.En.)
	Kovalente Bindung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- <del>nicht-elektr.</del> Nichtleiter</li> <li>- Hybridesozial</li> <li>- unpolare Bindung</li> <li>- Zustände bindend &amp; anti-</li> <li>- <del>größte Häufigkeit</del></li> <li>- Energiedonor</li> <li>- Überlappungsintegral</li> </ul>	Diamant (7,3 eV)
	Metallische Bindung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Gute El. Leitfähigkeit</li> <li>- Langreichweite Orbitalc</li> <li>- Dichteste Kugelpackung</li> <li>- S,Pd-Orbitalaufspaltung</li> <li>- Kristallstr. bevorzugt.</li> </ul>	Natrium (3,9 eV)
	Ionenbindung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Ionisierungsenergie,</li> <li>- Elektronenaffinität</li> <li>- Coulombenergie</li> <li>- Madelungkonstante</li> <li>- Oft Kristallstr.</li> <li>- oft unregelmäßige el. Leitfähigkeit</li> <li>- El. Leitf. d. Ionen dagegen groß <math>\Rightarrow</math> Batterien</li> </ul>	NaCl (etwa 5 eV)
	Van der Waal	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Gegenseitige Polarisierung</li> <li>- relativ schwach, aber bei Edelgasen beachtenswert</li> <li>- Langreichweity</li> <li>- Potential <math>\frac{1}{r}</math></li> <li>- Nichtleiter</li> </ul>	Gecko-Fuß (5-50 meV)
	Wasserstoff-Briicken-Bindung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- bevorzugt bei el-neg. Atomen mit hoher El. Affinität</li> <li>- sehr schwach</li> <li>- Dichteanomalie</li> <li>- Hohe Verd.wärme</li> </ul>	Wasser (etwa 0,7 eV)

Verd.Wärme klein  $\rightarrow$  Groß:

Van-der-Waal  $\rightarrow$  Wasserst.-brückenbindung  $\rightarrow$  Metall-Ionenbindung  
 $\rightarrow$  kovalente Bindung

- b) Kovalent : Elekt. Paar. Bild mögl:  $H_2$ ,  $F_2$ ,  $O_2$ , Diamant  
 Metallisch : Kubisch Raumzentriert :  $Ba$ ,  $V$ ,  $Nb$ ,  $Ta$ ,  $W$ ,  $Mg$ ,  $Fe$   
 Van der Waal : Dipole (ind./Fest) :  $CH_4$ ,  $H_2O$  etc.  
 (Eis)

c) kovalent:  
2 Kerne bilden miteinander ein Elektronenpaar.  
⇒ Direkte Bindung mit direkten Nachbarn  
⇒ wenige Nachbarn, Reichweite Kerne

metallisch:  
~~Kerne~~ Atome bilden Gitterstruktur  
mit delokalisierten Elektronen (Wolke)  
⇒ Höhere Reichweite mit vielen Kernen, da Kraft über Wolke im Gitter wirkt.

# Übungen zu Exphy IV

Blatt 1

Julian Bergmann

~~Nach~~

$$\varphi(x) = A \cdot \frac{1}{r^{12}} - B \cdot \frac{1}{r^6} = 4\epsilon \left( \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right)$$

$$E_{\text{Bind}} = \frac{1}{2} \sum_i \varphi_i = \frac{N}{2} \varphi_m = 2Ne \left( \sum_{i \neq j} \left( \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6 \right) \right)$$

Edelgassgitter  $\Rightarrow$  12 nächste Nachbarn, danach 8

$$\Rightarrow E_{\text{Bind}} = 2Ne \left( \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} \left( \underbrace{\frac{12}{1^{12}} + \frac{6}{\sqrt{2}^{12}} + \dots}_{\rightarrow 12,73} \right) - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6 \left( \underbrace{\frac{12}{2^{12}} + \frac{6}{\sqrt{2}^{12}} + \dots}_{\rightarrow 14,45} \right) \right)$$

$$\frac{dE_{\text{Bind}}}{dR} \Big|_{R_0} = 0 \quad \therefore \left[ 2Ne \left( -\frac{12 \sigma^{12}}{R^{13}} \left( \frac{1}{12,73} \cdot 12,73 + \frac{6}{R^7} \cdot 14,45 \right) \right) \right]_{R_0}$$

$$\Rightarrow 0 = \left[ -12 \cdot 12,73 \frac{\sigma^{12}}{R^{13}} + 6 \cdot 14,45 \cdot \frac{\sigma^6}{R^2} \right]_{R_0} \Rightarrow R_0 \approx 1,09 \sigma$$

$$\Rightarrow E_{\text{Bind}} = 2 \cdot Ne \cdot \left( \left(\frac{1}{1,09}\right)^{12} \cdot 12,73 - \left(\frac{1}{1,09}\right)^6 \cdot 14,45 \right)$$

$$\approx -8,6 Ne$$

Übungen zu ExPhy IV Blatt 1 Julian Bezugmann

Nr 5

a)  $\Theta = \frac{k_L p}{1 + k_L p}$ ,  $1 + k_L p \xrightarrow{p \ll 1} 1 \Rightarrow \Theta \xrightarrow{k_L p} \frac{k_L}{1} \cdot p$

oder

$$\Theta = \frac{k_L p}{1 + k_L p} = \frac{k_L}{\frac{1}{p} + k_L}, \quad \frac{1}{p} \xrightarrow{p \ll 1} \text{sehr groß} \Rightarrow \frac{1}{p} + k_L \xrightarrow{k_L \ll \frac{1}{p}} \frac{1}{p}$$

$$\Rightarrow \Theta \xrightarrow{k_L p} \frac{k_L}{\frac{1}{p}} = k_L p$$

$$\Gamma = \frac{\Gamma_{\text{max}} k_L p}{1 + k_L p} = \Gamma_{\text{max}} \Theta, \text{ also wie oben}$$

$$\Theta = \frac{s_1}{s} = \frac{\text{besetzt}}{\text{gesamt}} \doteq \frac{1}{2} = \frac{k_L}{\frac{1}{p} + k_L} \Rightarrow 2k_L = \frac{1}{p} + k_L$$

$$\Rightarrow p = \frac{1}{k_L}$$

b)  $k_L = k_L^0 \cdot e^{\frac{q}{k_B T}}$ ,  $k_L^0 = \frac{e_A \tilde{\tau}_0}{\sqrt{2 \pi m k_B T}}$

$$T = 20^\circ C = 293,15 K, \quad \tilde{\tau}_0 = 10^{-73}, \quad e_A = 10^{-19} m^2$$

$m = 14 \text{ g/mol} = 10,32 \text{ g/mol} (N_2)$

$$\Theta = \frac{k_L}{\frac{1}{p} + k_L} \quad *, \quad k_L^0 = \frac{10^{-73} \cdot 10^{-19} m^2}{\sqrt{2 \pi \cdot 14 \frac{g}{\text{mol}} \cdot k_B \cdot 293,15 K}} = 6,27 \cdot 10^{-23}$$