

Nr 1

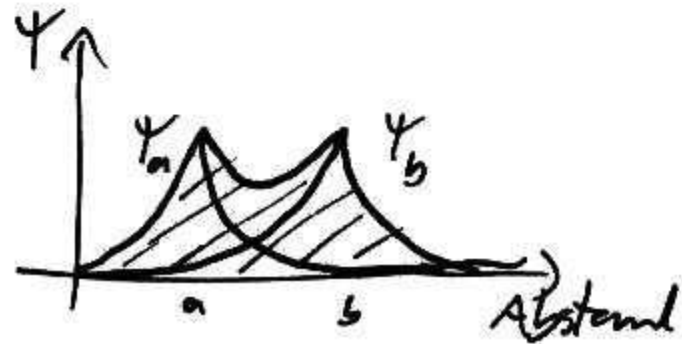
a) Ansatz  $\Psi = c_1 \Psi_a + c_2 \Psi_b$   
 „Linear-komb. aus Atomeigenfun'n“

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

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

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

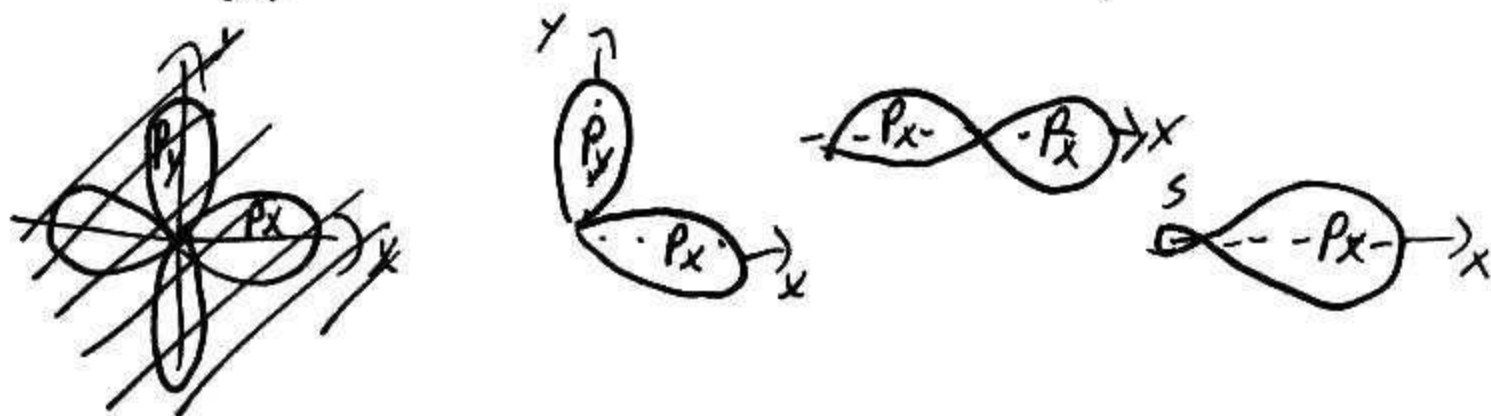
$E = \frac{\dots}{\dots + S} \Rightarrow E$  wird kleiner für größere  $S$ .



Nr 2

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

b)



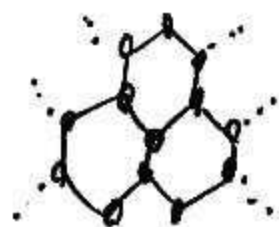
- c) Modellierung eines Orbitals als Linearkombination von Wellenfunktionen

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

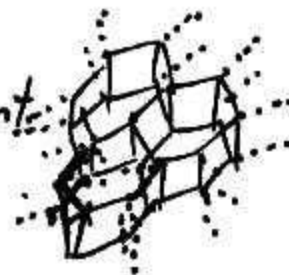
Diamant ist  $sp^3$ -kovalent  $\Rightarrow$  Gitter-Struktur in 3D (tetragonal)

$\Rightarrow$  3D-Gitter, das sehr stabil ist.

Graphit:



Diamant:



Nr 3

a)	Bindungsart	Eigenschaft	Beispiel (+ Bind. En.)
	Kovalente Bindung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Hybridisierung</li> <li>- unipolare Bindung</li> <li>- Zustände bindend &amp; anti-bindend</li> <li>- große Härte</li> <li>- Energiebander</li> <li>- Überlappungsintegral</li> </ul>	Diamant (7,3 eV)
	Metallische Bindung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- gute el. Leitfähigkeit</li> <li>- Langreichweitige Orbitale</li> <li>- Dichteste Kugelpackung</li> <li>- s, p, d - 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>- OET Kristallstr.</li> <li>- oft anorganischen el. Leitfähig</li> <li>- El. Leitf. d. Ionen dagegen groß =&gt; Batterien</li> </ul>	NaCl (etwa 5 eV)
	Van der Waal	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Gegenseitige Polarisation</li> <li>- relativ schwach, eher bei Edelgasen beachtenswert</li> <li>- Langreichweitig</li> <li>- Potential <math>\propto \frac{1}{r^6}</math></li> <li>- Nichtleiter</li> </ul>	Gecko-Fuß (5-50 meV)
	Wasserstoff-Brücken-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 0,1 eV)

Verd. Wärme klein -> Groß:

Van-der-Waal -> Wasserst.-brückenbindung -> Metall -> Ionenbindung  
-> kovalente Bindung

b) Kovalent : Elektr. Paar. Bild mögli :  $H_2, F_2, O_2, \text{Diamant}$   
 Metallisch : Kubisch raumzentriert :  $Ba, V, Nb, Ta, W, Mo, \dots$   
 Atomrümpfe m. fr. Außenel. :  
 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  
⇒ wenig Nachbarn, Reichweite Kerne

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

Nr 4

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

$$E_{\text{bind}} = \frac{1}{2} \sum_i \psi_i = \frac{N}{2} \psi_m = 2N\epsilon \left( \sum_{i \neq j} \left( \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) \right)$$

Edelgasgitter  $\Rightarrow$  12 nächste Nachbarn, danach 6

$$\Rightarrow E_{\text{bind}} = 2N\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} \left( \frac{12}{1^{12}} + \frac{6}{\sqrt{2}^{12}} + \dots \right) - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \left( \frac{12}{1^6} + \frac{6}{\sqrt{2}^6} + \dots \right) \right)$$

$\rightarrow 12, 13 \quad \quad \quad \rightarrow 14, 45$

$$\frac{dE_{\text{bind}}}{dR} \Big|_{R_0} \stackrel{!}{=} 0 \stackrel{!}{=} \left[ 2N\epsilon \left( -\frac{12\sigma^{12}}{R^{13}} \cdot 12,13 + \frac{6\sigma^6}{R^7} \cdot 14,45 \right) \right] \Big|_{R_0}$$

$$\Rightarrow 0 = \left[ -12 \cdot 12,13 \frac{\sigma^{12}}{R^{13}} + 6 \cdot 14,45 \cdot \frac{\sigma^6}{R^7} \right] \Big|_{R_0} \Rightarrow R_0 \approx 1,09 \sigma$$

$$\Rightarrow E_{\text{bind}} = 2 \cdot N\epsilon \cdot \left( \left( \frac{1}{1,09} \right)^{12} \cdot 12,13 - \frac{6}{1} \left( \frac{1}{1,09} \right)^6 \cdot 14,45 \right)$$

$$\approx -8,6 N\epsilon$$

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

$\theta = \frac{K_L P}{1 + K_L P} = \frac{K_L}{\frac{1}{P} + K_L}$ ,  $\frac{1}{P} \xrightarrow{P \ll 1} \text{sehr groß} \Rightarrow \frac{1}{P} + K_L \xrightarrow{K_L P} \frac{1}{P}$   
 $\Rightarrow \theta \xrightarrow{K_L P} \frac{K_L}{\frac{1}{P}} = K_L \cdot P$

$\Gamma = \frac{\Gamma_{\text{max}} K_L P}{1 + K_L P} = \Gamma_{\text{max}} \theta$ , also wie oben

$\theta = \frac{s_1}{s} = \frac{\text{besetzt}}{\text{Gesamt}} \stackrel{!}{=} \frac{1}{2} = \frac{K_L}{\frac{1}{P} + K_L} \Rightarrow 2K_L = \frac{1}{P} + K_L$

$\Rightarrow P = \frac{1}{K_L}$

b)  $K_L = K_L^0 \cdot e^{-\frac{q}{k_B T}}$ ,  $K_L^0 = \frac{\sigma_A \epsilon_0}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$

$T = 20^\circ\text{C} = 293,15 \text{ K}$ ,  $\epsilon_0 = 10^{-18}$ ,  $\sigma_A = 10^{-19} \text{ m}^2$

$m = 14 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \rightarrow 10,32 \text{ g/mol} \quad (\text{N}_2)$

$\theta = \frac{K_L}{\frac{1}{P} + K_L}$ ,  $K_L^0 = \frac{10^{-18} \cdot 10^{-19} \text{ m}^2}{\sqrt{2\pi \cdot 14 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot k_B \cdot 293,15 \text{ K}}} = 6,27 \cdot 10^{-23}$