

**Übungsblatt 9** (zu bearbeiten bis 21.12.2011)**Aufgabe 1: Chemische Bindung in zweiatomigen Molekülen**

(a) Ordnen Sie die Moleküle bzw. Molekülionen O_2 , O_2^+ , O_2^- (i) nach der Stärke der kovalenten Bindung und (ii) nach der Stärke der paramagnetischen Suszeptibilität. Begründen Sie Ihre Antwort mit Hilfe eines MO-Diagramms. (Hinweis: Die paramagnetische Suszeptibilität χ_{para} steigt mit dem Gesamtspin S des Moleküls, $\chi_{para} \propto S \cdot (S+1)$.)

(b) Geben Sie für die Moleküle H_2 , HCl und Cl_2 an, ob deren Ionisierungsenergien jeweils größer, kleiner oder etwa gleich groß sind wie die Ionisierungsenergien der Atome, aus denen sie aufgebaut sind. Begründen Sie Ihre Antwort mit Hilfe von MO-Diagrammen unter Berücksichtigung der relevanten bindenden, nichtbindenden und antibindenden Orbitale!

Aufgabe 2: MO-Modell von Stickstoffmonoxid

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

Erklären Sie mit Hilfe des MO-Schemas die folgenden experimentellen Befunde:

- Die Ionisierungsenergie von NO ist mit 9.3 eV deutlich niedriger als die Ionisierungsenergien von N_2 (15.6 eV) oder CO (14.0 eV).
- Das Nitrosylkation NO^+ als Ionisierungsprodukt von NO ist vergleichsweise stabil.
- Die Bindungslänge von NO^+ ist mit 106 pm kürzer als die von neutralem NO (115 pm).