

12) Wie lautet der räumliche Anteil der VB-Wellenfunktion einer OH-Bindung, die (a) rein ionisch und (b) als Überlagerung kovalenter und ionischer Anteile beschrieben wird?

13) Berechne die Elektronendichte eines C-Atoms mit der Elektronenkonfiguration $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$ gemäß der Formel $\rho(r) = \sum n_i \cdot \varphi_i^2(r)$, wo φ_i orthogonale Orbitale und n_i

die Besetzungszahlen sind! Sei $1s = f(r)$, $2s = g(r)$, $2p_{x,y} = \begin{cases} x \cdot h(r) \\ y \cdot h(r) \end{cases}$. Wie variiert

$\rho(r)$ mit dem Winkel ϕ in der $x - y$ -Ebene? Hybridisiere das C-Atom zu $1s^2 2s^1 q^3$, wo die drei orthogonalen $2s 2p^2$ q -Hybride gegeben sind als $q_1 = \sqrt{\frac{1}{3}}(s + \sqrt{2}p_x)$,

$q_{2,3} = \sqrt{\frac{1}{3}}(s + \sqrt{2}(-\frac{1}{2}p_x \pm \frac{\sqrt{3}}{2}p_y))$. Zeige für ein Paar q_i, q_j die Orthogonalität! Berechne die Elektronendichte des hybridisierten C-Atoms! Wie unterscheidet sie sich von der ursprünglichen Dichte $\rho(r)$?

14) Die quasiklassische Dichte im H_2^+ ist

$$\rho_{QK} = \frac{1}{2}((\varphi_a)^2 + (\varphi_b)^2),$$

wobei φ_a und φ_b Wasserstoff-1s-Funktionen um die Kerne sind:

$$\varphi_a = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r_a}, \quad \varphi_b = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r_b}.$$

\vec{R}, \vec{r}_a und \vec{r}_b spannen ein Dreieck auf (machen Sie sich das bildlich klar !!). Stellen Sie den Wert von ρ_{QK} sowie den von der LCAO-Dichte

$$\rho_{LCAO}^{\pm} = (\psi_{\pm})^2; \quad \psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm S)}}(\varphi_a \pm \varphi_b)$$

entlang der z -Achse (Kernverbindungsachse) dar. Für H_2^+ nehmen Sie den Gleichgewichtsabstand $R = R_e$ und für S nehmen Sie den Ausdruck von Übung 11.