

17) Gib Orbitalbesetzung, Spinmultiplizität, Drehimpuls in Molekülachsen-Richtung, und Summe der Wechselwirkungen (Bindungsordnung) an für Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , O_2^- , F_2 , Ne_2 . Beachte: dass " $2s\sigma_g$ tiefer als $2s\sigma_u$ höher"; dass $2p\sigma_g$ und $2p\pi_u$ vergleichbar sind.

18) Konstruiere ein MO-Schema für LiF und für CH_2 (nichtlinear):

- a) AO-Niveaus mit AO-Symbolen (für Atom-Orbitalenergien: siehe WEB-Seite)
- b) Klassifizierung nach Molekülsymmetrie
- c) Konstruktion der MO-Niveaus
- d) Charakterisierung der MOs
- e) Besetzung mit Elektronen
- f) Gesamtspin, Bahndrehimpuls
- g) Strichformel

19) Kommentieren Sie den Effekt auf R_e und D_e beim Entfernen eines Elektrons aus den MOs von N_2 : (a) $3\sigma_g$, (b) $1\pi_u$, (c) $2\sigma_u$.

20) Diskutieren Sie anhand der Kimball-Tabellen die MO-Schemata für AH_3 , AH_4 , AH_5 und AH_6 -Moleküle, wobei von A nur s und p-AOs beitragen. Bei AH_5 müssen Strukturen mit nichtäquivalenten Positionen der H-Atome (formal AB_4C oder AB_3C_2) in Betracht gezogen werden. Was ergibt sich speziell für BH_3 , NH_3 , CH_4 , NH_5 und OH_6 ? (zu Kimball: siehe Kutzelnigg Band II oder WEB-Seite)