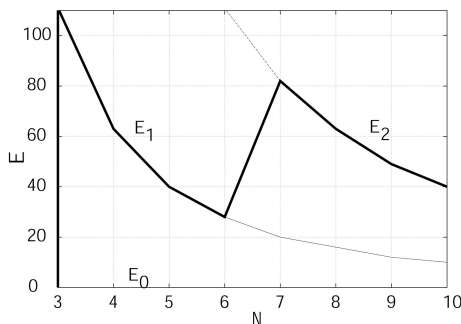


**Lsg. 16)**

$N$	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$E_{HOMO}$
3	0	111	444	111
4	0	63	250	63
5	0	40	160	40
6	0	28	111	28
7	0	20	82	82
8	0	16	63	63
9	0	12	49	49
10	0	10	40	40



- Günstig: 2, 6, 10 Elektronen =  $4n + 2$
- Besonders ungünstig: 1 mehr als volle Schale
- Sehr instabil!
- Je größer das System, desto tiefer das Niveau
- Wenn eine Schale energetisch günstig liegt, wird sie mit Elektronen gefüllt!
- Die  $s^2p^6$ -Schale wird von  $\text{Na}^+$  zu  $\text{N}^{3-}$  immer instabiler (ab  $\text{O}^{2-}$  nicht mehr stabil)!

**Lsg. 17)**

$$-1/2\mu \cdot \psi'' + k/2 \cdot x^2\psi = \left( \frac{-\sqrt{k\mu}}{-2\mu} + \frac{\sqrt{k\mu^2}}{-2\mu} x^2 + \frac{k}{2} x^2 \right) \psi = \psi \cdot 1/2\sqrt{k/\mu}; E = 1/2\sqrt{k/\mu}$$

**Lsg. 18)**

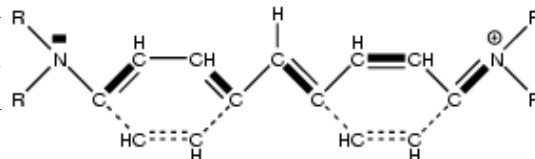
- $\mu = M_1 \cdot M_2 / (M_1 + M_2) = 1.007U \cdot 1.007U / (2 \cdot 1.007U) = 0.50035U = 0.50035 \cdot 1823 \text{ a.u.} = 918 \text{ a.u.}$
- $\Delta E = 4000 \text{ cm}^{-1} = 4000/8065 \cdot \text{eV} = 0.5 \cdot \text{eV} = 0.5/27.27117 \text{ a.u.} = 18 \text{ ma.u.}$
- $\Delta E = \sqrt{k/\mu}; k = \Delta E^2 \cdot \mu = 0.3 \text{ a.u.} = 4.7 \text{ N/cm}$
- $\psi^2$  ist maximal bei  $x = 0$ .  $\psi^2 = e^{-\sqrt{k\mu}x_0^2} = e^{-1}$  für  $x_0 = 1/\sqrt[4]{k\mu} = 1/\sqrt[4]{0.3 \cdot 918} = 0.24 \text{ a.u.}$
- $2x_0 = 0.48 \text{ a.u.}; BL = 86 \text{ pm} = 86/52.7 \cdot \text{a.u.} = 1.63 \text{ a.u.}$ . Das sind  $0.48/1.63 \cdot 100\% = 29\%$

**Lsg. 19)**

$up + down = ((\cos \alpha + \cos \beta)/\sqrt{2}; (\sin \alpha + \sin \beta)/\sqrt{2}; 1/2 - 1/2 = 0)$   
 Länge<sup>2</sup> =  $1/2(\cos^2 \alpha + 2 \cos \alpha \cos \beta + \cos^2 \beta + \sin^2 \alpha + 2 \sin \alpha \sin \beta + \sin^2 \beta + 0) = 1/2 + \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta + 1/2 = 1 + \cos(\alpha - \beta) = 1(1 + 1) = 2; \cos(\alpha - \beta) = 1; \alpha = \beta$   
 Beide Spinvektoren liegen genau übereinander. Z.B.  $1/\sqrt{2}, 0, 1/2$  und  $1/\sqrt{2}, 0, -1/2$ . Winkel zwischen parallelen Spins:  $\langle up | down \rangle = 1/2 + 0 - 1/4 = |up| \cdot |down| \cdot \cos \gamma = \sqrt{3/4} \cdot \sqrt{3/4} \cdot \cos \gamma; 1/4 = 3/4 \cdot \cos \gamma; \cos \gamma = 1/3; \gamma = 70.5^\circ$ ; Spinvektoren  $35\frac{1}{4}^\circ$  nach oben bzw. nach unten.  
 Anmerkung: In der Vorlesung hatten wir als Winkel eines up-spins gegen die up-Richtung:  $\tan \theta = \sqrt{2}; \theta = 54\frac{3}{4}^\circ$ , das ist  $90^\circ - 35\frac{1}{4}^\circ$ .

**Lsg. 20)**

!! CH hat eine  $\sigma$ -Bindung, isoelektronisches N hat eine  $\sigma$ -LonePair!! Das Lonpair am terminalen N ist vom  $\pi$ -Typ. Es gibt also in beiden Verbindungen 6  $\pi$ -Paare.



Die N-Verbindung absorbiert geringere-frequenz-längerwellig-röter (im Roten) als die CH-Verbindung (im Gelben). Daher ist die CH-Verbindung blau und N-Verbindung grün.