

3 Bindungen II

Ausgabe : Fr, 27.10.2017

Abgabe : Fr, 03.11.2017

Besprechung : Mo, 06.11.2017

Aufgabe 5: sp^3 -Hybridisierung

- Wann liegen kovalente Bindungen vor? Welche Atome tendieren zu kovalenten Bindungen? Was bedeutet dies für die Orbitale?
- Zeigen Sie, dass die sp^3 -Hybridbindungen von Germanium orthogonal und normiert sind und der Winkel zwischen je zwei Richtungsvektoren der Hybridbindungen $109^\circ 28'$ beträgt. Verwenden Sie hierfür die aus der Vorlesung bekannten Wellenfunktionen.

Aufgabe 6: Bindungsenergie

- NaCl (Gitterkonstante $a = 5.64\text{\AA}$), LiCl ($a = 5.14\text{\AA}$) und RbF ($a = 5.63\text{\AA}$) kristallisieren alle in der NaCl-Struktur, deren Madelungskonstante den Wert $\alpha = 1.7476$ besitzt. Berechnen Sie (in eV) für die genannten Verbindungen die auf ein Ionenpaar bezogene Coulombenergie.
- Die gesamte potenzielle Energie von Ionen im Kristall setzt sich zusammen aus der bindenden Coulombenergie V_C und einem abstoßenden Anteil. Im Gegensatz zum Lennard-Jones-Potenzial vom letzten Blatt wird hier für das abstoßende Potenzial der exponentielle Ansatz von Born und Mayer verwendet.

$$V_{BM}(r_{ij}) = A \cdot \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\rho}\right)$$

r_{ij} ist dabei der Abstand zwischen zwei Ionen i und j , A und die charakteristische Länge ρ hängen von der jeweiligen Substanz ab. Für die oben genannten Ionenkristalle betragen die experimentell ermittelten Bindungsenergien pro Ionenpaar $E_B(\text{LiCl}) = 8.93\text{eV}$, $E_B(\text{NaCl}) = 8.23\text{eV}$ und $E_B(\text{RbF}) = 8.17\text{eV}$. Schätzen Sie mit Hilfe dieser Werte und der oben berechneten Coulombenergien die Größenordnung des Parameters ρ ab.

Anmerkung: Auf Grund der kurzen Reichweite der abstoßenden Kräfte sind nur Beiträge der nächsten Nachbarionen zu berücksichtigen.

- Ein alternativer Ansatz von Pauling sowie von Born und Landé benutzt für das abstoßende Potenzial zwischen den Ionen eine Potenzabhängigkeit der Form:

$$V_{BL}(r_{ij}) = \frac{A}{r_{ij}^n}$$

Welcher ganzzahlige Exponent n führt in diesem Fall zur Übereinstimmung mit den oben angegebenen experimentellen Bindungsenergien? Vergleichen Sie ihr Ergebnis mit dem bekannten Lennard-Jones-Potenzial.