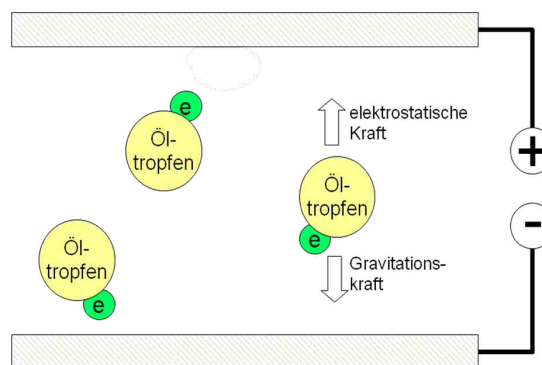


Übungsblatt 1

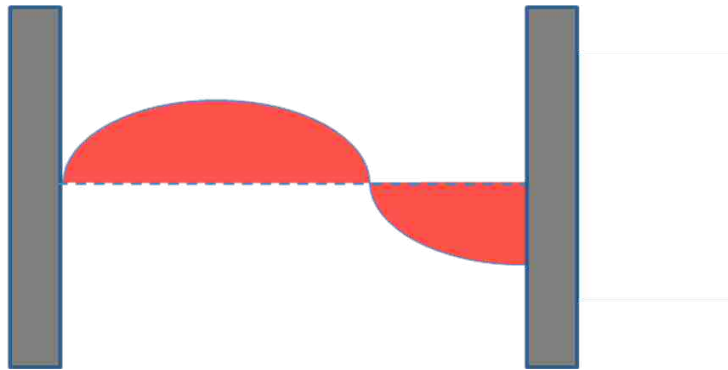
1. Warum ist das Elektron das wichtigste Elementarteilchen für die Betrachtung einer chemischen Reaktion? Welche Bedeutung haben andere Elementarteilchen (Protonen, Neutronen, Photonen).
2. Beschreiben Sie eine typische Beobachtung, die man während eines Versuchs zur Messung der Ladung des Elektrons nach Millikan machen könnte. Was würde man feststellen, wenn ein Tropfen zwei, drei oder mehr Ladungen trägt? Wie kann man vermeiden, dass die Elektronenladung durch dieses Phänomen fälschlicherweise auf den doppelten oder dreifachen Wert von $e = -1,6 \cdot 10^{-19}$ Coulomb geschätzt wird?



3. Warum benötigt man zur genauen Bestimmung der Elektronenmasse die Ladung des Elektrons?
4. Welche Hinweise auf die Doppelnatur des Elektrons als Welle und Teilchen kennen Sie? Warum ist dieses Phänomen mit der klassischen Physik nicht vereinbar?
5. Warum ist es unter der Voraussetzung der Doppelnatur des Elektrons nicht möglich, dass ein Elektron regungslos an einem genau bestimmten Ort verharrt? Mit welcher der beiden Betrachtungsweisen (Welle oder Teilchen) würde diese Forderung kollidieren?
6. Warum kann ein Elektron nur bestimmte, abgestufte Gesamtenergiezustände einnehmen?

Übungsblatt 2

1. Begründen Sie, warum die in folgender Abbildung dargestellte Funktion keine gültige Lösung für eine Wellenfunktion eines eindimensional beweglichen Elektrons zwischen zwei Wänden sein kann.



2. Welchen Bezug besitzen die Lösungen für das eindimensional bewegliche Elektron zu dem Molekül 1,3,5,7-Octatetraen $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$? Versuchen Sie, etwas zum Besetzungszustand der beteiligten Elektronenfunktionen auszusagen.
3. Warum ist die Lösung der Schrödingergleichung für das Elektron im Wasserstoffatom

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi + V(r) = i\hbar \dot{\Psi}$$

deutlich komplizierter als die für das eindimensional bewegliche Elektron

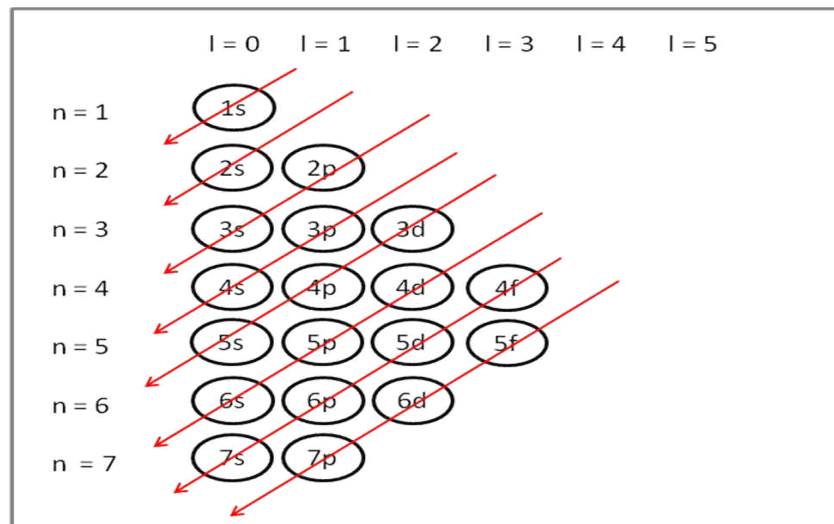
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi = i\hbar \dot{\Psi} \quad ?$$

Erklären Sie die wesentlichen Unterschiede zwischen den beiden Ansätzen.

4. Wie würde sich die Schrödingergleichung des Wasserstoffatoms verändern, wenn die Welt nur zweidimensional wäre?

Übungsblatt 3

1. Warum ist es bei schwereren Elementen ungleich schwieriger, die Schrödinger-Gleichung zu lösen als beim Wasserstoff? Welche Näherung wird im Allgemeinen angewandt, um das Problem zu lösen?
2. Unter welcher Bedingung könnten sich gemäß dem Pauliprinzip zwei Wasserstoffatome durchdringen? Spekulieren Sie.
3. Das folgende Schema gilt für die Reihenfolge der Besetzung von Zuständen mit verschiedenen Quantenzahlen n und ℓ in Mehrelektronensystemen und wird als Folge von Wechselwirkungen zwischen den Elektronen verstanden.



Wie würde das Schema aussehen, wenn es keine Wechselwirkungen zwischen den Elektronen gäbe?

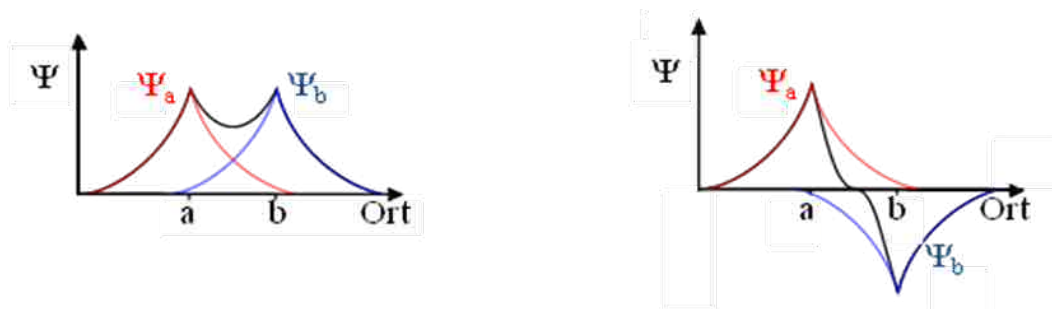
4. Beschreiben Sie, unter Beachtung aller Ihnen bekannten Regeln, die Elektronenkonfigurationen der Elemente Fluor (9 Elektronen) und Eisen (26 Elektronen).

Übungsblatt 4

1. Welche Gemeinsamkeiten und welche Unterschiede bestehen zwischen Elektronenfunktionen in mehrelektronigen Atomen und solchen in mehrelektronigen Molekülen, wenn beide Problemstellungen ausgehend vom Wasserstoffatom gelöst werden sollen? Welche Näherungen verwendet man dabei?
2. Beschreiben Sie die drei grundsätzlichen Bindungstypen in der Chemie. Nennen Sie zu jedem Bindungstyp drei Ihnen bekannte Beispiele.
3. Begründen Sie ausführlich, warum ein bindendes σ -Orbital (links) zwei Atome zusammenzuhalten vermag, während ein antibindendes σ^* -Orbital (rechts) das Gegenteil bewirkt.



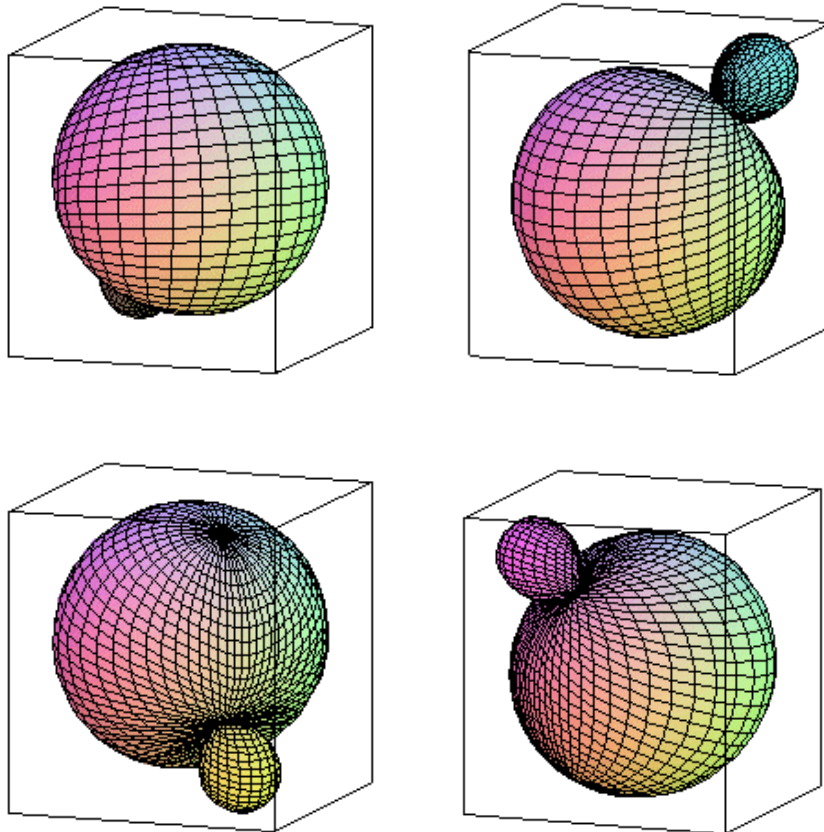
4. Wie können Sie anhand der Diagramme der Wellenfunktionen für das bindende σ -Orbital (links) und das antibindende σ^* -Orbital (rechts) auf die Elektronendichte zwischen den Kernen schließen?



Anmerkung: sehr schöne Darstellungen zu den Molekülorbitalen finden Sie unter:
<http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/>

Übungsblatt 5

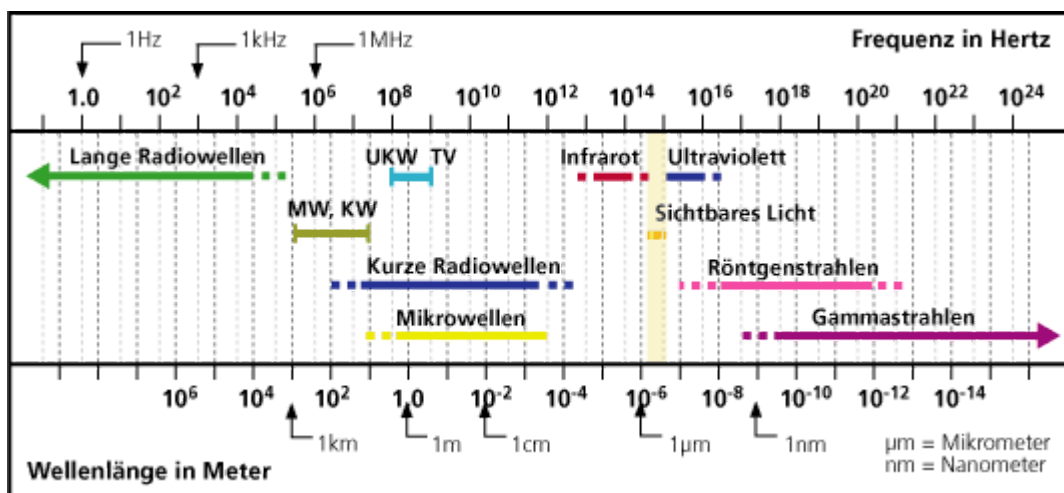
1. Versuchen Sie, ein MO-Bindungsschema für ein hypothetisches Molekül H_2^- (also ein negativ geladenes Wasserstoffmolekül mit insgesamt drei Elektronen) aufzustellen. Vergleichen Sie die zu erwartende Bindungsstärke mit der des ungeladenen Wasserstoffmoleküls H_2 .
2. Versuchen Sie, das Molekül NH_3 (Ammoniak) mit Hilfe der VB-Theorie zu beschreiben. Berücksichtigen Sie dabei, dass das Ammoniakmolekül einen Bindungswinkel von fast 109° aufweist (genauere Messungen ergeben 107° , gehen Sie aber der Einfachheit halber von 109° aus).
3. Warum ist zur Bildung des Methanmoleküls nach der VB-Theorie der Schritt der Promotion notwendig? Warum erfordert dieser (hypothetische) Schritt Energie? Wodurch wird dieser (hypothetische) Energieaufwand teilweise wieder wettgemacht?
4. Begründen Sie unter Berücksichtigung des umschreibenden Würfels, warum die vier sp^3 -Hybridorbitale zusammen eine tetraedrische Gestalt aufweisen?



Übungsblatt 6

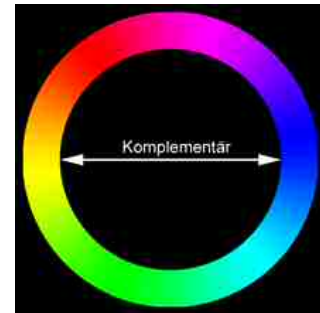
- Welche möglichen Bindungswinkel erwarten Sie für ein Molekül XH_2 , wenn das Atom X die Hybridisierung

 - sp^3
 - sp^2
 - sp^3d^2 aufweist?
- Warum kann man bei einem spektroskopischen Experiment im Allgemeinen nicht einfach ein Photon mit der Energie $5 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ (violetteres Licht) durch zwei Photonen mit der Energie $2,5 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ (rotes Licht) ersetzen? Erklären Sie unter Verwendung einer Analogie mit Schallwellen.
- Im Allgemeinen verwendet man in der Spektroskopie immer entweder den Ansatz der Absorptions- oder der Emissionsmessung. Könnten Sie sich eine Messanordnung denken, bei der beide Phänomene gleichzeitig beobachtet werden könnten? Welches Problem müssten Sie dafür lösen?
- Angenommen, Sie hätten ein elektronisches System, bei dem die Wellenfunktionen $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ Energien aufweisen, die jeweils proportional zur Quantenzahl n sind. Wie würde das Spektrum (d.h. die Auftragung aller Absorptionslinien gegen die Frequenzachse) dieses Systems aussehen?

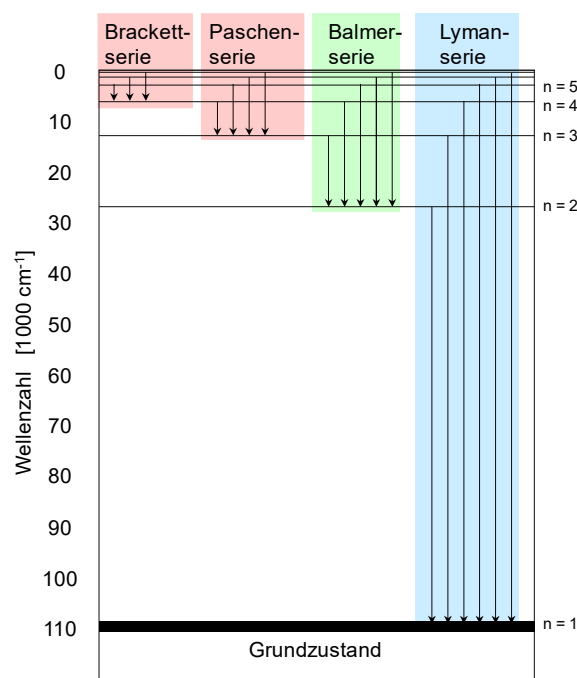


Übungsblatt 7

1. Von dem biologisch relevanten Farbstoff Carotin (Abb. unten links) existieren im menschlichen Körper in geringen Mengen Isomere, bei denen an einer einzelnen Doppelbindung statt einer trans- eine cis-Form vorliegt (so genannte cis-Carotine). Diese cis-Carotine besitzen eine deutlich andere Farbe als gewöhnliches oranges Carotin. Erklären Sie dieses Phänomen unter Verwendung des eindimensionalen Potentialtopfmodells. Geben Sie eine Vermutung darüber ab, ob das cis-Carotin wohl länger oder kürzerwellig absorbiert. Welche Farbe würden Sie damit erwarten?

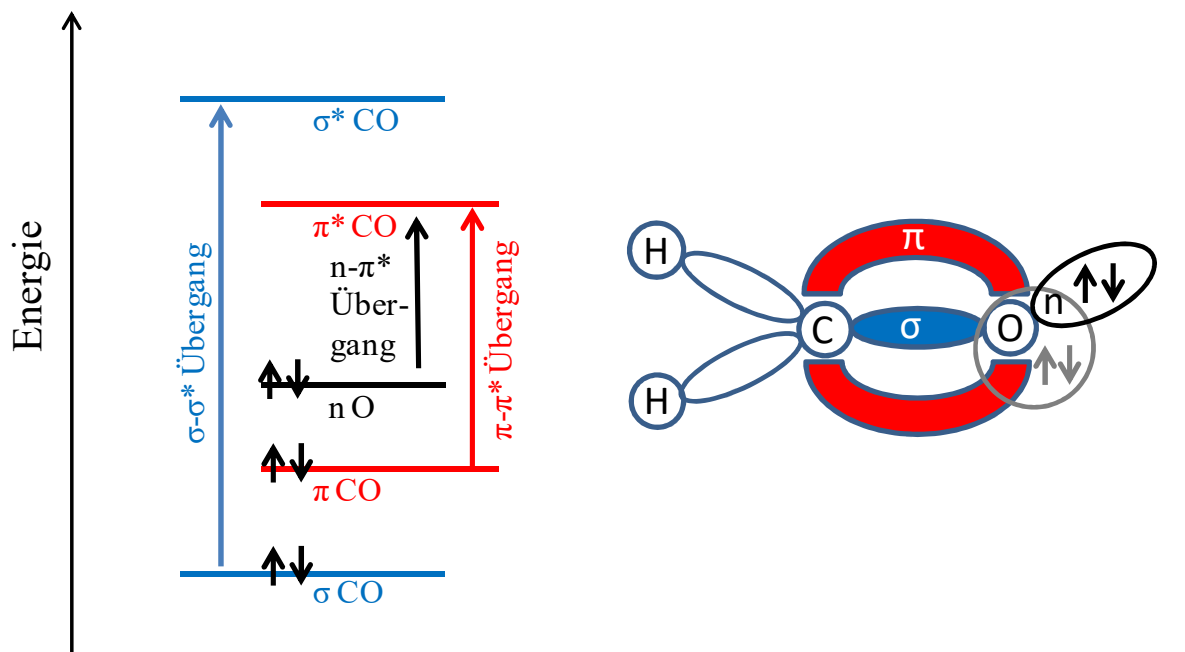


2. Werden zucker- oder stärkehaltige Nahrungsmittel im Backofen erhitzt, so beginnen sie Wasser abzuspalten. Gleichzeitig färben sie sich allmählich gelb bis braun. Welchen Zusammenhang sehen Sie zwischen diesen beiden Beobachtungen? Legen Sie zur Erklärung als vereinfachte Struktur für ein Zucker- oder Stärkemolekül die Kette $(\text{-HCOH-})_n$ zugrunde.
3. Warum weist das Elektronenspektrum des Wasserstoffs zwischen der Lyman-Serie und der Balmer-Serie eine auffällige Lücke auf? Begründen Sie dieses Phänomen anschaulich anhand des Energieniveauschemas des Wasserstoffs:



Übungsblatt 8

1. Wie könnten Sie anhand des Sonnenlichtspektrums abschätzen, welcher Anteil der Wasserstoffatome sich innerhalb der Sonnenatmosphäre im elektronischen Grundzustand befindet?
2. Begründen Sie, warum die Flammenfärbungen der Alkalimetalle (Lithium, Natrium, Kalium, etc.) deutlich unterschiedlich sind, obwohl die Orbitale und deren Besetzung mit Elektronen bei oberflächlicher Betrachtung doch ähnlich sein sollten.
3. Warum kann sehr intensives UV-Licht eine chemische Bindung zerstören? Welche Frequenz oder Frequenzen müsste das UV-Licht aufweisen, um eine CO-Bindung mit maximaler Effizienz zu spalten? Benennen sie die Frequenzen anhand der in folgender Abbildung bezeichneten Übergänge.



4. Warum kann man im Elektronenspektrum von einem Molekül wie Kohlenmonoxid keine scharfen Absorptionslinien erwarten? Warum sehen Sie stattdessen komplexe Überlagerungen von Liniengruppen? Spekulieren Sie über einen möglichen experimentellen Ansatz, mit dem das Spektrum wenigstens etwas deutlicher und übersichtlicher gestaltet werden könnte.

Übungsblatt 9

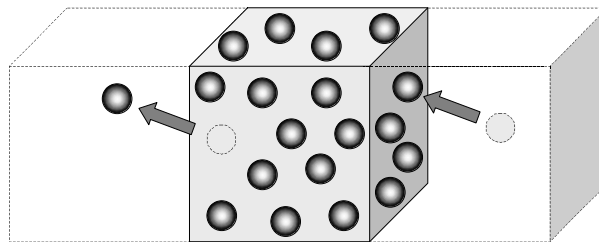
1. Sie haben ein Quecksilberthermometer erworben, bei dem die Skala zwischen 0°C und 100°C in 100 Teilstücke von genau gleicher Länge unterteilt ist, die von 0 bis 100 beschriftet sind. Warum dürfen Sie mit Recht an der Genauigkeit des Thermometers zweifeln?
2. Warum eignet sich der Tripelpunkt von Wasser besser als Temperaturfixpunkt als der Siedepunkt von Wasser bei einem Druck von 10^5 Pa ?
3. Warum sind bei einem idealen Gas keine Stöße zwischen den Gasteilchen möglich? Begründen Sie Ihre Antwort, indem Sie das Verhalten des Drucks bei stetig kleiner werdendem Volumen (bei konstanter Teilchenzahl und Temperatur) betrachten.
4. Warum ist das kinetische Gasmodell auf Stöße zwischen den Teilchen angewiesen?
5. Die Teilchen in gasförmigem Helium sind siebenmal leichter als die in gasförmigem Stickstoff. Welche Konsequenzen hat dies für die Schallgeschwindigkeit in Helium?
6. Warum erhitzt sich ein Meteorit beim Eintritt in die Erdatmosphäre? Betrachten Sie den Kontakt zwischen der Oberfläche des Meteoriten und der Gasteilchen in der Erdatmosphäre aus der Sicht des kinetischen Gasmodells.



Abbildung aus www.caringheartsofpeedee.com/.../01/meteorit.jpg

Übungsblatt 10

- Helium erfüllt in guter Näherung die Beziehung $P(V-nb) = nRT$. Skizzieren Sie das zu dieser Gleichung gehörende P-V-Diagramm. Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem üblichen P-V-Diagramm nach van der Waals.
- Nach der van der Waals'schen Gleichung ist es denkbar, dass bei einem realen Gas unter bestimmten Bedingungen der Druck Null auftritt. Ist diese Vorhersage realistisch? Welche Kräfteverhältnisse müssten zwischen den Molekülen herrschen, damit dieser Fall eintritt?
- Entwerfen Sie für einen Science Fiction Plot ein (fiktives) Messgerät, das in der Lage wäre, den Binnendruck eines Gases zu messen. Wie müssten Ihre Protagonisten damit bei der Messung vorgehen? (Hinweis: Sie dürfen bei Ihrem Entwurf auch völlig unrealistische Ideen einbauen).
- Üblicherweise verwendet man bei der Simulation von Flüssigkeiten in einem gedachten Volumen die so genannte Kontinuitätsbedingung: Jedes Teilchen, das im Rahmen der Bewegungsprozesse den Würfel an einer gegebenen Stelle verlässt, tritt automatisch an der genau gegenüberliegenden Position des Würfels wieder ein.



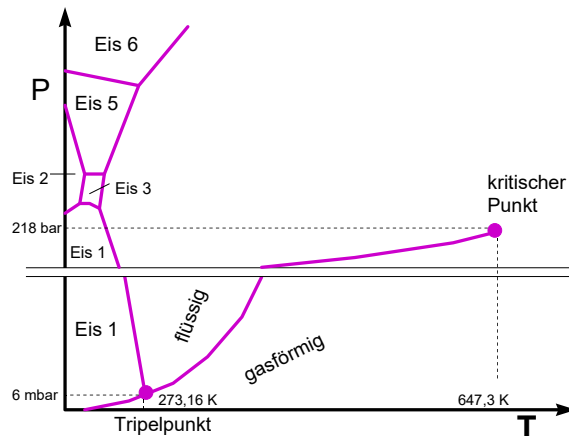
Angenommen, Sie würden versuchsweise auf die Kontinuitätsbedingung verzichten und stattdessen fordern, dass das gegebene würfelförmige Volumen von festen, undurchlässigen Wänden umgeben sein soll. Welche Probleme würden sich bei der folgenden Simulation daraus ergeben?

- Bei der Computersimulation einer Flüssigkeit beachtet man nach jeder gemäß der Monte-Carlo-Methode ermittelten Molekülverschiebung folgende Entscheidungsgrundlage:
 - Hat sich die gesamte potentielle Energie des Systems durch die Verschiebung verringert oder blieb sie konstant, so wird die Verschiebung akzeptiert und der nächste Schritt berechnet.
 - Hat sich die gesamte potentielle Energie durch die Verschiebung um den positiven Wert ΔE erhöht, so wird die Verschiebung mit einer Wahrscheinlichkeit, die von ΔE abhängt, akzeptiert und ansonsten verworfen.

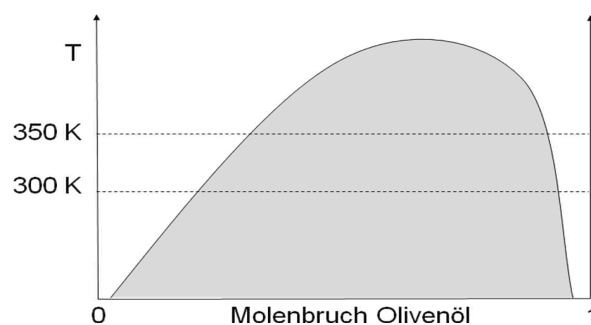
Wie stellt sich bei diesem Rechenprozess die Entwicklung der potentiellen Energie gegen die Zeit dar? Postulieren Sie ein Diagramm von $E(\text{pot})$ gegen die Zeit t . Begründen Sie die von Ihnen vorgeschlagene Kurvenform.

Übungsblatt 11

1. Würden Sie erwarten, dass ein Schlittschuh auf einer Oberfläche aus Eis 5 gleitet? Begründen Sie Ihre Antwort unter Bezug auf das unten gezeigte Phasendiagramm von Wasser.



3. Warum gibt es im interplanetaren Raum unseres Sonnensystems kein flüssiges Wasser?
4. Wie können Sie Eis zum Schmelzen bringen? Machen Sie drei verschiedene Vorschläge auf der Grundlage Ihres bisherigen Kenntnisstands.
5. Sie mischen bei Raumtemperatur ein Mol Olivenöl mit einem Mol Wasser. Nun erwärmen Sie die zweiphasige Mischung anschließend unter ständigem Rühren von 300 K auf 350 K. Beschreiben Sie den Vorgang qualitativ unter Berücksichtigung des in folgender Abbildung gegebenen Phasendiagramms.



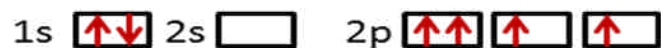
- 6) Um die Mischbarkeit der drei Stoffe A, B und C zu untersuchen, werden in zahlreichen Experimenten verschiedene Mischungsverhältnisse eingestellt. Man stellt dabei fest, dass alle binären Mischungen (A mit B, B mit C und C mit A) einphasig sind, also homogene Systeme darstellen. Sobald jedoch mehr als 20% einer dritten Komponente hinzugefügt wird, bildet sich eine zweite Phase. Zeichnen Sie das Dreiecksdiagramm und definieren Sie das Zweiphasengebiet wenigstens an drei Stellen genau.

Klausur zur Vorlesung „Einführung in die Physikalische Chemie“ 2012

- 1) Welche Bedeutung hat die Wellenfunktion $\Psi(x)$ im eindimensionalen Potentialtopfmodell? Wie ermittelt man diese Wellenfunktion? Was bedeutet es, wenn diese Wellenfunktion an einer gegebenen Stelle a) gleich Null ist, b) einen negativen Wert hat?

15 Punkte

- 2) In den Aufschrieben eines Kommilitonen finden Sie folgende (fehlerhafte) Elektronenkonfiguration:



Gegen welche Regeln würde diese Konfiguration verstoßen? Nennen Sie diese Regeln und führen Sie schrittweise eine entsprechende Korrektur durch. Bei welchem Element würden Sie die dann erhaltene Konfiguration erwarten?

15 Punkte

- 3) Was ist der Unterschied zwischen einem bindenden und einem antibindenden Orbital? Wie unterscheiden sie sich a) in Bezug auf die Wellenfunktion Ψ , b) die Verteilung der Elektronendichte im Raum, c) ihre Position in einem Energiediagramm?

15 Punkte

- 4) In einem gegebenen Behälter mit einem konstanten Volumen befinde sich ein Mol Helium. Angenommen, man könnte durch einen externen Einfluss bewirken, dass sich jedes einzelne Teilchen plötzlich genau doppelt so schnell bewegt wie zuvor, wobei seine ursprüngliche Bewegungsrichtung und seine Masse erhalten bleiben sollen. Wie verändern sich dadurch die Temperatur und der Druck des Gases? Erklären Sie beide Veränderungen zum einen anschaulich, zum anderen durch mathematische Betrachtungen.

15 Punkte

Maximal erreichbare Punktzahl:

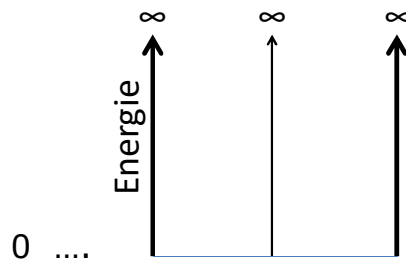
60 Punkte

Maximale Wertung in der Gesamtklausur:

50 Punkte

2. Klausur zur Vorlesung „Einführung in die Physikalische Chemie“ 2012

- 1) Gegeben sei ein eindimensionaler Potentialtopf, bei dem ein Elektron nicht nur (wie üblich) an den Potentialwänden, sondern auch genau in der Mitte zwischen den beiden Potentialwänden eine unendlich hohe potentielle Energie besitzen soll (s. Skizze). Im übrigen Bereich zwischen den Wänden ist die potentielle Energie jeweils null, das Elektron soll sich nur zwischen den beiden Wänden befinden.



Diskutieren Sie die möglichen Konsequenzen dieser Besonderheit im Vergleich zum „normalen“ Potentialtopf. Welche Elektronenfunktionen sind in diesem System denkbar, welche nicht? Wie würde sich wohl das Energieschema verändern? 20 Punkte

- 2) Wann spricht man bei der Betrachtung von Atomorbitalen von *entarteten* Wellenfunktionen? Nennen Sie ein Beispiel.

10 Punkte

- 3) Bei einer Strukturanalyse an einem Molekül mit der Zusammensetzung XY_6 finden Sie, dass das zentrale Atom X oktaedrisch von sechs Atomen Y umgeben ist. Alle Bindungslängen und Bindungsenergien sind exakt gleich. Wie können Sie diese Struktur auf der Grundlage der Valence-Bond-Theorie erklären? Beschreiben Sie dabei genau das Zustandekommen der sechs Bindungen.

15 Punkte

- 4) In einem Behälter befinde sich eine Mischung aus einem Mol Wasserstoffgas (H_2) und einem Mol Helium (He) im thermischen Gleichgewicht. Diskutieren Sie folgende drei Thesen nacheinander auf ihre sachliche Richtigkeit:

a) „Die Wasserstoffmoleküle besitzen unter diesen Voraussetzungen für sich gesehen eine höhere Temperatur als die Heliumatome.“

b) „Die Wasserstoffmoleküle besitzen unter diesen Voraussetzungen im Mittel eine höhere kinetische Energie als die Heliumatome.“

c) „Die Wasserstoffmoleküle bewegen sich unter diesen Voraussetzungen im Mittel doppelt so schnell wie die Heliumatome.“

15 Punkte

Maximal erreichbare Punktzahl:

60 Punkte

Maximale Wertung in der Gesamtklausur:

50 Punkte

Klausur zur Vorlesung „Einführung in die Physikalische Chemie“ 2013

- 1) Welche Bedeutung hat die Wellenfunktion $\Psi_n(x)$ für den Zustand eines Elektrons in einem eindimensionalen Potentialtopf? Was bedeutet der Index „n“? Was können Sie aus dem Quadrat der Wellenfunktion an einem bestimmten Ort „x“ ableiten? Wie können Sie die Wellenfunktion $\Psi_n(x)$ für ein gegebenes „n“ ermitteln?

15 Punkte

- 2) Bei der Ermittlung der elektronischen Wellenfunktion für das Wasserstoffatom werden vier Quantenzahlen eingeführt. Nennen Sie zu jeder der vier Quantenzahlen ...

- a) den Namen,
- b) die möglichen Werte, die die Quantenzahl einnehmen kann,
- c) die Bedeutung der Quantenzahl für die Eigenschaften der Elektronenfunktion

Welche Angaben zu den Eigenschaften eines Elektrons benötigen Sie, um aus dem gegebenen elektronischen Zustand sicher alle vier Quantenzahlen ableiten zu können?

15 Punkte

- 3) Bei der Deutung von Bindungsverhältnissen in organischen Verbindungen ist häufig von einem „sp²-Hybrid“ die Rede. Welcher Bindungstheorie entstammt dieser Begriff? Was bedeutet er genau? Welche Näherung steckt darin verborgen? Nennen Sie ein Beispiel für eine organische Verbindung, in der diese Bindungssituation auftritt.

15 Punkte

- 4) Ein Überschallflugzeug bewegt sich mit einer Geschwindigkeit von 1000 m/s durch eine Stickstoffatmosphäre (Molmasse von N₂: 28 g/Mol). Warum erhitzt sich der Rumpf des Flugzeugs, wenn Sie die Situation aus der Sicht des kinetischen Gasmodells betrachten? Welche Temperatur erwarten Sie an der Oberfläche des Rumpfes?

15 Punkte

Maximal erreichbare Punktzahl: 60 Punkte

Maximale Wertung in der Gesamtklausur: 50 Punkte

2. Klausur zur Vorlesung „Einführung in die Physikalische Chemie“ 2013

- 1) Was bedeutet die „magnetische Quantenzahl“ für die Elektronen im Wasserstoffatom? Welche Werte kann sie annehmen? Welche Konsequenzen hat sie für das Erscheinungsbild eines Orbitals? Nennen Sie das leichteste Element, bei dem im Grundzustand die magnetische Quantenzahl des äußersten Elektrons den Wert „+1“ besitzt. Versuchen Sie, die Geometrie dieses Orbitals zeichnerisch wiederzugeben.

15 Punkte

- 2) Was ist ein Molekülorbital gemäß der MO-Theorie? Welche Voraussetzungen müssen gegeben sein, damit es auftritt? Wodurch unterscheidet es sich von einem Atomorbital? Unter welchen Voraussetzungen führt es dazu, dass ein Molekül zusammenhält und stabil ist? Nennen Sie ein Beispiel für ein Molekülorbital.

15 Punkte

- 3) Sie untersuchen die Struktur einer chemischen Verbindung der Summenformel AB_6 und stellen fest, dass ein zentrales Atom A in genau oktaedrischer Geometrie von sechs Atomen des Typs B umgeben ist. Alle Bindungslängen zwischen A und B sind dabei exakt gleich. Versuchen Sie, diese Struktur mit Hilfe der Valence-Bond-Theorie zu erklären. Beschreiben Sie dabei genau und schrittweise das Zustandekommen der Bindungsorbitale.

15 Punkte

- 4) Die Elektronenstrukturen der Atome Lithium und Beryllium unterscheiden sich im Grundzustand lediglich darin, dass das 2s-Orbital im Fall von Lithium einfach, im Fall von Beryllium doppelt besetzt ist. Trotzdem weichen die Elektronenspektren beider Elemente gravierend voneinander ab: es gibt keine einzige Linie im Elektronenspektrum, in dem beide Elemente übereinstimmen. Versuchen Sie, diese Beobachtung so genau und umfassend wie möglich zu erklären.

15 Punkte

Maximal erreichbare Punktzahl: 60 Punkte

Maximale Wertung in der Gesamtklausur: 50 Punkte

Klausur zur Vorlesung „Einführung in die Physikalische Chemie“ 2014

- 1) Was ist ein p-Orbital? Beschreiben Sie die Eigenschaften eines p-Orbitals hinsichtlich seiner Geometrie, seiner Orientierung, der dazugehörigen Wellenfunktion und der Verteilung der Elektronendichte im Raum. Welches ist das leichteste Element, in welchem ein p-Orbital im Grundzustand bereits doppelt besetzt ist? Welches ist das leichteste Element, in welchem ein p-Orbital in einem angeregten Zustand doppelt besetzt sein kann?

15 Punkte

- 2) Ein einzelnes Wasserstoffatom H soll mit einem H^+ -Ion in Wechselwirkung treten. Beschreiben Sie das entstehende geladene H_2^+ -Molekül mittels der MO-Theorie. Warum ist die Bindung in diesem geladenen Molekül überhaupt stabil? Vergleichen Sie seine Stabilität mit der des ungeladenen Wasserstoffmoleküls H_2 .

15 Punkte

- 3) Wie unterscheidet sich prinzipiell das Elektronenspektrum eines Atoms von dem eines Moleküls? Beschreiben Sie alle denkbaren Phänomene, die bei der Elektronenspektroskopie an Molekülen im Gegensatz zu der an Atomen beobachtet werden können.

15 Punkte

- 4) Für die Gase Argon und Kohlendioxid sind in der Literatur folgende van-der-Waals-Parameter angegeben:

Argon	$a = 0,1345 \text{ Pa m}^6/\text{Mol}^2$	$b = 3,22 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{Mol}$
Kohlendioxid	$a = 0,3592 \text{ Pa m}^6/\text{Mol}^2$	$b = 4,267 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{Mol}$

Erklären Sie, welche Bedeutungen die Größen a und b besitzen. Welche vergleichenden Informationen können Sie aus den gegebenen Werten für die Teilchen der beiden Gase ableiten?

15 Punkte

Maximal erreichbare Punktzahl: 60 Punkte

Maximale Wertung für die Gesamtklausur: 50 Punkte

Klausur zur Vorlesung „Einführung in die Physikalische Chemie“ 2015

- 1) Wie wird bei der Entwicklung der Wellenfunktionen des eindimensionalen Potentialtopfmodells vorgegangen? Genauer...
- Welche grundlegende Gleichung müssen alle elektronischen Wellenfunktionen erfüllen?
 - Welche weiteren, speziellen Randbedingungen müssen für die Wellenfunktion Ψ des eindimensionalen Potentialtopfs gelten?
 - Skizzieren Sie die ersten drei Lösungen grafisch und diskutieren Sie die Unterschiede zwischen den drei Wellenfunktionen.

15 Punkte

- 2) Vergleichen Sie das bindende und das antibindende Sigma-Orbital des Wasserstoffs so genau wie möglich nach folgenden Kriterien:
- Elektronendichte bzw. Elektronendichteverteilung
 - Energie
 - Symmetrie

15 Punkte

- 3) Angenommen, es gebe keinerlei Wechselwirkungen zwischen den Elektronen innerhalb eines Atoms. Welche Konsequenzen hätte dies a) für das Spektrum des Wasserstoffatoms, b) für das Spektrum des Lithiums? Wären unter diesen Umständen die Spektren für Lithium und für Natrium identisch? Begründen Sie Ihre Antworten so ausführlich wie möglich.

15 Punkte

- 4) Diskutieren Sie den Wahrheitsgehalt folgender Aussagen bezüglich der Temperatur nach dem kinetischen Gasmodell:
- Bei einem gegebenen Gas ist die Temperatur in etwa proportional zur mittleren Geschwindigkeit der Teilchen.
 - Bei 40°C bewegen sich die Gasteilchen doppelt so schnell wie bei 10°C.
 - In einer Mischung aus Helium und Argon ist jedes einzelne Heliumatom grundsätzlich schneller als jedes einzelne Argonatom.

15 Punkte

Maximal erreichbare Punktzahl: 60 Punkte

Maximale Wertung für die Gesamtklausur: 50 Punkte

**Klausur zur Vorlesung „Einführung in die Physikalische Chemie“
(Aufgabenteil Mayer)**

- 1) Betrachten Sie ein Elektron in einem eindimensionalen Potentialtopf, das sich in der Wellenfunktion Ψ_1 für $n = 1$ befindet.
- Was passiert mit der Wellenfunktion, wenn Sie die Länge a des Potentialtopfs gegen Null gehen lassen? ($a \rightarrow 0$)
 - Was passiert mit der Wellenfunktion, wenn die Länge a des Potentialtopfs gegen Unendlich strebt? ($a \rightarrow \infty$)
 - Welche von beiden Grenzwertbildungen führte in der Praxis zu einem Problem? Warum? 15 Punkte
- 2) a) Beschreiben Sie das bindende σ -Orbital in einem Wasserstoffmolekül H_2 mit einem MO-Schema und zeigen Sie zusätzlich in einer einfachen Abbildung die resultierende Elektronenverteilung.
- Wie ändert sich beides (MO-Schema und Elektronenverteilung) wenn eines der beiden Wasserstoffatome plötzlich wesentlich elektronegativer wäre als das andere?
 - Welcher Grenzfall würde sich für einen extremen Unterschied in der Elektronegativität schließlich ergeben? 15 Punkte
- 3) Wie können Sie die Bindung in einem H_2 -Molekül durch Einstrahlen von Licht gezielt zerstören? Welche Bedingungen muss das Licht dafür erfüllen? Wie können Sie spektroskopisch ermitteln, ob Licht mit einer gegebenen Wellenlänge diese Bedingung erfüllt? Welcher Vorgang spielt sich bei der Bindungsspaltung ab? Beschreiben Sie den Prozess in allen Schritten möglichst genau. 15 Punkte
- 4) Diskutieren Sie den Wahrheitsgehalt folgender Aussagen:
- Bei einem idealen Gas hängt die innere Energie nur von der Temperatur ab, nicht dagegen vom Volumen oder vom Druck.
 - Bei einem unbekanntem Gas kann man die Temperatur bestimmen, wenn man nur die Geschwindigkeit der Teilchen kennt.
 - Der Phasenzustand eines Stoffes (fest – flüssig – gasförmig) hängt vor allem von der Temperatur des Stoffes ab. 15 Punkte

Maximal erreichbare Punktzahl: 60 Punkte

Maximale Wertung für die Gesamtklausur: 50 Punkte