

**26)** (a) Schreibe die Hückelmatrizen für die beiden  $\pi$ -Systeme "Cyclohexatrien" und "Bicyclo-[2.2.0]-hexadien" hin.

(b) Welche Bedeutung hat der  $\alpha$ -Parameter, welche der  $\beta$ -Parameter?

(c) Wie lauten die Eigenwerte für beide Moleküle?

d) Zeichne MO-Niveau-Linien und besetze mit Elektronen. Wie groß sind die  $\pi$ -Elektronen-Gesamtenergien und  $\pi$ -Bindungsenergien? Welches Molekül ist stabiler? Warum?

**27)** Erläutern Sie anhand des MO-Schemas, wieso  $O_2$  im Grundzustand paramagnetisch ist. Ordnen Sie die Moleküle  $O_2^+$ ,  $O_2$  und  $O_2^-$  nach der Stärke der O-O-Bindung.

**28)** Konstruiere ein MO-Schema für lineares  $CH_2$  (Carben):

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