

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)

21) Diskutiere Cyclobutadien im Hückel-Modell (siehe auch Skript):

- (a) Stelle die Hückel-Matrix auf
- (b) Berechne die Orbitalenergie-Eigenwerte
- (c) Zeichne ein Besetzungsschema für das neutrale Molekül
- (d) Bestimme Gesamtenergie, Bindungsenergie, Ionisierungsenergie, Mesomerieenergie, Anregungsenergie und kommentiere die Ergebnisse.
- (e) Bestimme die Eigenvektoren für $X = -2$ und $X = 0$
- (g) Berechne die Überschussladung am C_1 , sowie die Bindungsordnung für C_1-C_2 .

Formeln:

Gesamt- π -Energie: $E_\pi = \sum_{i=1}^N \epsilon_i n_i$; n_i : Besetzungszahl des Orbitals i

totale Ladung q_j auf dem Atom C_j : $q_j = 1. - \sum_{i=1}^N n_i c_{ij}^2$

Bindungsordnung p_{jk} zwischen den Atomen C_j und C_k : $p_{jk} = \sum_{i=1}^N n_i c_{ij} c_{ik}$.

- (h) Versuche, lokalisierte MOs aus den beiden Eigenvektoren $(1/2, 1/2, 1/2, 1/2)$ und $(1/2, 1/2, -1/2, -1/2)$ zu konstruieren und skizziere sie.