

**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- $\pi$ -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.