

8. Übungsblatt (zu bearbeiten bis 18.06.2007)

30. Physikalische Ursachen der chemischen Bindung: Erklären Sie mit Hilfe einer Energiebetrachtung, wie die Bindung zwischen H und H<sup>+</sup> im Wasserstoff-Molekülion H<sub>2</sub><sup>+</sup> zustande kommt. Diskutieren Sie dazu die Rollen von kinetischer und potentieller Energie im Verlauf der Bindungsbildung und erinnern Sie sich insbesondere an die Heisenbergsche Unschärferelation und das Potentialkasten-Modell (vgl. Aufg. 14)! Verwenden Sie gegebenenfalls folgende Literatur: W. Kutzelnigg, *Was ist Chemische Bindung?*, Angew. Chem. 85 (1973) 551 und J. Reinhold, *Quantentheorie der Moleküle*, Teubner 1994, Kap. 5.

31. Chemische Bindung in zweiatomigen Molekülen

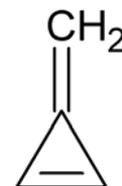
a) Ordnen Sie die Moleküle bzw. Molekülionen O<sub>2</sub>, O<sub>2</sub><sup>+</sup>, O<sub>2</sub><sup>-</sup> (i) nach der Stärke der kovalenten Bindung und (ii) nach der Stärke der paramagnetischen Suszeptibilität. Begründen Sie Ihre Antwort mit Hilfe eines MO-Diagramms.

b) Geben Sie an, ob die Ionisierungsenergien der Moleküle H<sub>2</sub>, HCl, Cl<sub>2</sub> größer, kleiner oder etwa gleich groß sind als die Ionisierungsenergien der Atome, aus denen sie aufgebaut sind.

Begründen Sie Ihre Antwort mit Hilfe von MO-Diagrammen unter Berücksichtigung der relevanten bindenden, nicht-bindenden und anti-bindenden Orbitale!

32. Hückelsche MO-Methode

a) Betrachten Sie das π-Elektronensystem von 3-Methylencyclopropen. Gesucht sind die Hückel-Energieeigenwerte ε<sub>i</sub>, die Gesamt-π-Elektronenenergie E<sub>π</sub>, die Delokalisationsenergie E<sub>del</sub> sowie die Wellenfunktionen ψ<sub>1</sub> und ψ<sub>2</sub> der besetzten Energieniveaus ε<sub>1</sub> und ε<sub>2</sub>. Zeichnen Sie schließlich ein Moleküldiagramm mit π-Bindungsordnung, π-Elektronendichte und freien Valenzen!



3-Methylencyclopropen

b) 3-Methylencyclopropen hat ein beträchtliches Dipolmoment. Erklären Sie diesen Befund mit Hilfe der (4n+2)-Hückelregel für aromatische π-Systeme. Schätzen Sie aus der berechneten Ladungsordnung für den Methylen-Kohlenstoff und mittleren Bindungslängen das Dipolmoment ab und vergleichen Sie mit dem experimentellen Wert von μ = 1.9 Debye (6.34·10<sup>-30</sup> C·m).

Hilfestellung: Die Lösungen der Hückel-Determinante lauten: x<sub>1</sub> = -2.1701, x<sub>2</sub> = -0.3111, x<sub>3</sub> = +1 und x<sub>4</sub> = +1.4812.