

## 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  $\pi$ -Elektronensystem von 3-Methylencyclopropen. Gesucht sind die Hückel-Energieeigenwerte  $\epsilon_i$ , die Gesamt- $\pi$ -Elektronenenergie  $E_\pi$ , die Delokalisationsenergie  $E_{del}$  sowie die Wellenfunktionen  $\psi_1$  und  $\psi_2$  der besetzten Energieniveaus  $\epsilon_1$  und  $\epsilon_2$ . Zeichnen Sie schließlich ein Moleküldiagramm mit  $\pi$ -Bindungsordnung,  $\pi$ -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  $\pi$ -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  $\mu = 1.9$  Debye ( $6.34 \cdot 10^{-30}$  C·m).

Hilfestellung: Die Lösungen der Hückel-Determinante lauten:  $x_1 = -2.1701$ ,  $x_2 = -0.3111$ ,  $x_3 = +1$  und  $x_4 = +1.4812$ .