

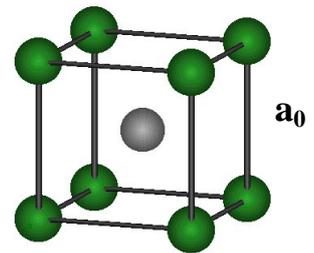
9. Übungsblatt (zu bearbeiten bis 25.06.2007)

33. Madelungkonstante

- Welche anschauliche Bedeutung hat die Madelungkonstante?
- Berechnen Sie die Madelungkonstante eines (hypothetischen) eindimensional-linearen Ionenkristalls!
- Geben Sie die ersten drei Summenglieder der Madelungkonstante der CsCl-Struktur an!

34. Ionenkristalle

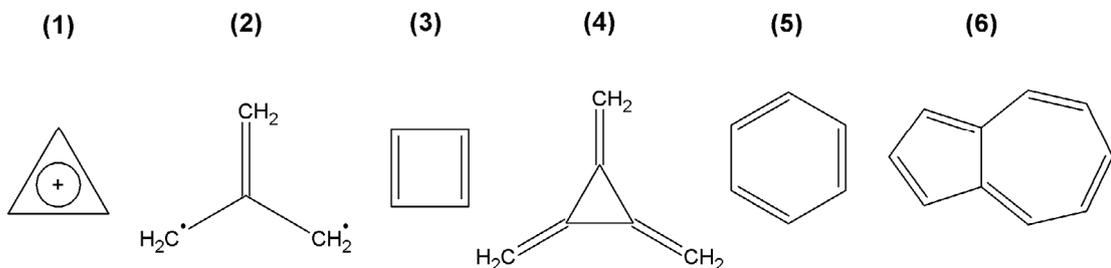
- Berechnen Sie die molare Gitterenergie von CsCl mit Hilfe eines Born-Haber-Kreisprozesses. Entnehmen Sie die dazu benötigten Daten aus dem *Chemistry WebBook* des National Institute of Standards and Technology (NIST), siehe <http://webbook.nist.gov/chemistry/>.
- Berechnen Sie den Coulomb-Anteil der Gitterenergie von CsCl. Vergleichen Sie diesen Wert mit der thermodynamischen Gitterenergie aus Teil (a) und berechnen Sie damit den Anteil der Pauli-Repulsion. Die Gitterkonstante a_0 von CsCl beträgt 4.115 Å, die Madelungkonstante 1.76268.



CsCl-Struktur

35. HMO-Modell

- Geben Sie für die folgenden konjugierten π -Systeme die topologischen Matrizen an:



- Bei welchen dieser Moleküle handelt es sich um alternierende, bei welchen um nicht-alternierende π -Systeme?
- Geben Sie an und begründen Sie, bei welchem dieser Moleküle Sie ein permanentes Dipolmoment erwarten würden. Sagen Sie mit Hilfe der $(4n+2)$ -Hückelregel für Aromaten die Richtung des Dipolmoments voraus!
- Berechnen Sie mit Hilfe der HMO-Methode die Hückel-Energieeigenwerte ϵ_i sowie die Gesamt- π -Elektronenenergie E_π von Cyclobutadien (3). Zeichnen Sie ein π -MO-Schema und überprüfen Sie die berechneten Eigenwerte mit Hilfe eines *Frost-Diagramms*. Berechnen Sie außerdem die Delokalisationsenergie E_{del} und vergleichen Sie mit dem Wert für Butadien aus der Vorlesung. Diskutieren Sie das Ergebnis unter dem Gesichtspunkt der Aromatizität! Berechnen und skizzieren Sie schließlich die π -Molekülorbitale ψ_i und unterscheiden Sie zwischen bindenden, nichtbindenden und antibindenden Orbitalen!