



Übungsblatt 9 (zu bearbeiten bis 17.12.2007)

Aufgabe 1: MO-Modell von Stickstoffmonoxid

Stickstoffmonoxid (NO) ist die einfachste thermisch stabile Verbindung mit ungerader Elektronenzahl. Konstruieren Sie ein qualitatives MO-Schema von NO, bezeichnen Sie darin die Atom- und Molekülorbitale und besetzen Sie die Orbitale mit Elektronen! Nehmen Sie an, dass die Energiezustände des O-Atoms etwas niedriger liegen als die des N-Atoms. (Warum ist diese Annahme sinnvoll?)

Erklären Sie mit Hilfe des MO-Schemas die folgenden experimentellen Befunde:

- (a) Die Ionisierungsenergie von NO ist mit 9.3 eV deutlich niedriger als die Ionisierungsenergien von N₂ (15.6 eV) oder CO (14.0 eV).
- (b) Das Nitrosylkation NO⁺ als Ionisierungsprodukt von NO ist vergleichsweise stabil.
- (c) Die Bindungslänge von NO⁺ ist mit 106 pm kürzer als die von neutralem NO (115 pm).

Aufgabe 2: HMO-Methode

- (a) Geben Sie für die folgenden konjugierten π -Systeme die topologischen Matrizen an: Ethen, 1,3-Butadien, Cyclopentadienyl.
- (b) Berechnen Sie mit Hilfe der HMO-Methode die Hückel-Energieeigenwerte ε_i von Ethen und zeichnen Sie ein π -MO-Schema. Berechnen und skizzieren Sie außerdem die beiden normierten π -Molekülorbitale ψ_1 und ψ_2 !

Bearbeiten Sie bitte außerdem die Aufgaben 4 und 5 von Übungsblatt 8.