



Übungsblatt 7

Vorname, Name:

1. Zur Berechnung des elektronischen Überganges von $n=1$ nach $n=2$ in einem Molekül mit konjugierten Doppelbindungen kann man die Schrödingergleichung für den eindimensionalen Fall anwenden:

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8 m_e a^2} \quad \text{wobei } h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}; \quad m_e = 9.1095 \cdot 10^{-31} \text{ kg}; \quad (1 \text{ J} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2})$$

$a = \text{Kastenlänge} = \text{Moleküllänge} = 2.94 \cdot 10^{-9} \text{ m}$

Berechnen Sie die Wellenlänge λ (in Meter) für den Übergang aus dem Energieunterschied zwischen den beiden Zuständen $\Delta E = \frac{hc}{\lambda}$ mit $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$ (20 Punkte)

2. Geben Sie fünf Strukturisomere mit der Summenformel $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$ an, die der Oktettregel gehorchen. (25 Punkte, jeweils 2 Bonuspunkte für jedes weitere, maximal 10 Bonuspunkte, maximal 100 Punkte für das Übungsblatt erreichbar)

3. Mit welcher der Ihnen bekannten Rechenmethoden (aus Vorlesung 1-7, also Kraftfelder, Moleküldynamik, quantenmechanische Methoden) können Sie herausfinden, welches der Strukturisomere aus Aufgabe 2 das energetisch stabilste ist ? Kurze Begründung warum andere Verfahren das nicht können. (10 Punkte)

4. Wieviel Rumpf- und Valenzelektronen haben die folgenden Molekülsysteme ? (Sie benötigen ein Periodensystem. Rumpfelektronen sind die Elektronen aller aufgefüllten Schalen) (20 Punkte)

Rumpfelektronen Valenzelektronen

H₂

CH₄

HCl

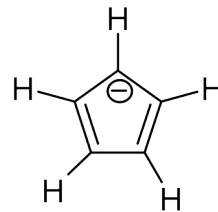
Na⁺

SO₄²⁻

5. a) Berechnen Sie die Energien ϵ_i der 5 π -Orbitale des Cyclopentadienylanions (C₅H₅⁻) in Abhängigkeit von α und β gemäß der Formel

$$\epsilon_i = \alpha + 2\beta \cos\left(\frac{2k\pi}{N}\right) ; \text{ mit } k=0,1,2,\dots,N-1$$

mit N = Anzahl der Kohlenstoffatome



b) Wie viele bindende und anti-bindende π -Orbitale gibt es, und welche (Nummer) sind dies ?

Hinweis: Das System hat 6 π -Elektronen und ist aromatisch. $\alpha > 0$ und $\beta < 0$, wodurch die Energien nicht dieselbe Reihenfolge wie die Orbitale haben.

Benutzen für die Winkelfunktion das Bogenmaß (RAD)

(25 Punkte)