



**Übungsblatt 7** Abgabe bis 19.06.2023 vor der Übung

**Vorname, Name:**

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

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

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

Berechnen Sie die Wellenlänge  $\lambda$  (in Meter) für den Übergang gemäß  $\Delta E = \frac{hc}{\lambda}$   
mit  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$   
(25 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. Wieviel Rumpf- und Valenzelektronen haben die folgenden Molekülsysteme? (Sie benötigen ein Periodensystem) Rumpfelektronen sind die der aufgefüllten Schalen; Zusätzliche Elektronen zählen zu den Valenzelektronen.

Rumpfelektronen                      Valenzelektronen

H<sub>2</sub>

CH<sub>4</sub>

HCl

Rb<sup>+</sup>

PO<sub>4</sub><sup>3-</sup>

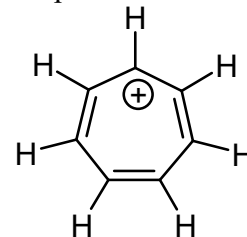
O<sub>2</sub><sup>2-</sup>

(24 Punkte)

4. a) Berechnen Sie die Energien  $\varepsilon_i$  der 7  $\pi$ -Orbitale des Cycloheptatrienkations (C<sub>7</sub>H<sub>7</sub><sup>+</sup>) in Abhängigkeit von  $\alpha$  und  $\beta$  gemäß der Formel

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

mit  $N =$  Anzahl der Kohlenstoffatome



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

Hinweis: Das System hat 6  $\pi$ -Elektronen und ist aromatisch.  $\alpha < 0$  und  $\beta < 0$ , wodurch die Energien nicht dieselbe Reihenfolge haben wie der Index  $i$ .

Benutzen für die Winkelfunktion das Bogenmaß (RAD)

(26 Punkte)