

**Übungsblatt 10** (zu bearbeiten bis 11.01.2012)**Aufgabe 37: HMO-Methode**

(a) Geben Sie für die folgenden konjugierten  $\pi$ -Systeme die topologischen Matrizen an: Ethen, 1,3-Butadien, Cyclopentadienyl.

(b) Berechnen Sie mit Hilfe der HMO-Methode die Hückel-Energieeigenwerte  $\varepsilon_i$  von Ethen und zeichnen Sie ein  $\pi$ -MO-Schema. Berechnen und skizzieren Sie außerdem die beiden normierten  $\pi$ -Molekülorbitale  $\psi_1$  und  $\psi_2$ !

**Aufgabe 38: Vorhersage von Moleküleigenschaften auf Basis der HMO-Methode**

(a) Betrachten Sie das  $\pi$ -Elektronensystem von 3-Methylen-cyclopropen. Gesucht sind die Hückel-Energieeigenwerte  $\varepsilon_i$ , die Gesamt- $\pi$ -Elektronenenergie  $E_\pi$ , die Delokalisationsenergie  $E_{del}$  sowie die Wellenfunktionen  $\psi_1$  und  $\psi_2$  der besetzten Energieniveaus  $\varepsilon_1$  und  $\varepsilon_2$ . Zeichnen Sie schließlich ein Moleküldiagramm mit  $\pi$ -Bindungsordnung,  $\pi$ -Elektronendichte und freien Valenzen!



3-Methylen-cyclopropen

(b) 3-Methylen-cyclopropen 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  $x_4 = +1.4812$ .