

Übungen zur Vorlesung Physikalische Chemie II

Übungsleiter: Tanja Asthalter · Zimmer 9-356 · Tel. 4464 · e-mail t.asthalter@ipc.uni-stuttgart.de

Übungsblatt 23

22. 1. 2003

Aufgabe 23.1

- Skizzieren Sie das MO-Schema mitsamt der Elektronenbesetzung für das C_2 -Molekül (existiert in der Gasphase!) und für das CO-Molekül.
- Skizzieren Sie die Molekülorbitale des C_2 und geben Sie die Symmetrie der einzelnen Orbitale an.

Aufgabe 23.2

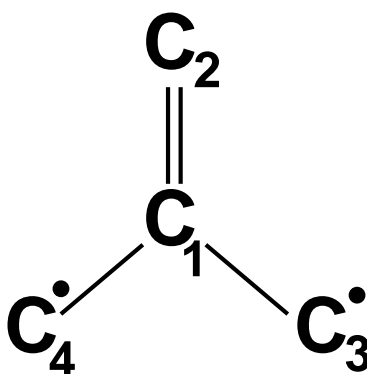
Einer der höheren Zustände des C_2 -Moleküls hat die Elektronenkonfiguration

$$(1s\sigma_g)^2 (1s\sigma_u^*)^2 (2s\sigma_g)^2 (2s\sigma_u^*)^2 (2p\pi_u)^3 (2p\sigma_g)^1$$

Welche Multiplizität und welche Parität (gerade oder ungerade) hat dieser Zustand?

Aufgabe 23.3

Gegeben sei das Methylenpropenyl-Diradikal:



- Stellen Sie die Hückelmatrix für das System auf.
- Bestimmen Sie die Energieeigenwerte.
- Bestimmen Sie die zugehörigen Eigenvektoren und skizzieren Sie qualitativ die Molekülorbitale.
- Berechnen Sie die Ladungs- und Bindungsordnungen.

Aufgabe 23.4

Eine Cycloaddition ist „symmetrieerlaubt“, wenn die sog. Grenzorbitale (HOMO und LUMO der Reaktanden) so überlappen, daß jeweils gleiche Vorzeichen aufeinandertreffen. Dabei reicht es aus, Molekülorbitale des π -Systems aus der Hückel-Näherung zu betrachten.

Untersuchen Sie mit diesem Kriterium, ob die Cycloaddition von 2 Ethenmolekülen sowie von Ethen mit Butadien

- thermisch,
 - photochemisch
- erlaubt sind!

Die Übungen sind im PDF-Format erhältlich unter <http://www.ipc.uni-stuttgart.de/~tanja/pcuebungen.html>.