

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I

WS 2018/19 – Übungsblatt 12

Ausgabe: Freitag 25. Januar, Besprechung: Freitag 8. Februar

1. Das Hückelmodell

Beim Hückelmodell handelt es sich um ein Näherungsverfahren zur Beschreibung des π -Systems linearer oder zyklischer Polyene. Im Rahmen der Hückeltheorie werden für den Hamiltonoperator in der Basis der p_z -Atomorbitale $|i\rangle$ die folgenden Annahmen getroffen:

$$H_{ij} = \langle i | \hat{H} | j \rangle = \begin{cases} \alpha & i = j \\ \beta & |i\rangle \text{ und } |j\rangle \text{ im Polyen benachbart} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Ferner soll gelten:

$$S_{ij} = \langle i | j \rangle = \delta_{ij}$$

- Konstruieren Sie die Schrödingergleichung des Cyclobutadiens (C_4H_4) in Matrixdarstellung im Rahmen des Hückelmodells.
- Berechnen Sie die Eigenwerte (d.h., Eigenenergien) der Schrödingergleichung in Matrixdarstellung. (Es mag dabei hilfreich sein, an geeigneter Stelle wie folgt zu substituieren: $x = \frac{\alpha - E}{\beta}$)
- Stellen Sie die Eigenenergien aus Aufgabe b) graphisch in Form eines Frost-Musulin-Kreises dar.
- Welche der Energieniveaus sind im Cyclobutadien besetzt? Ist Cyclobutadien aromatisch? Falls nein, existiert ein aromatisches Cyclobutadienion?
- Berechnen Sie die Delokalisationsenergie im Cyclobutadien.
- Zusatzaufgabe:* Berechnen Sie die Eigenvektoren (d.h., Eigenfunktionen) der Schrödingergleichung in Matrixdarstellung. Stellen Sie die Eigenfunktionen graphisch in der Basis der p_z -Atomorbitale dar. Erinnert Sie Ihr Ergebnis an die OCI-Vorlesung?