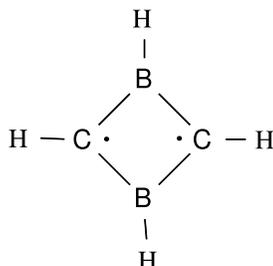


## Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I

1. Betrachten Sie die cyclische Verbindung 1,3-Diboret.



In dieser Aufgabe sollen die  $\pi$ -Elektronen dieses Systems in Hückel-Näherung betrachtet werden, wobei die  $2p_z$ -Funktionen an den vier Gerüstatomen die Basis bilden.

- (a) Stellen Sie die Hamilton-Matrix auf. Verwenden Sie folgende Matrixelemente:

$$\alpha = \langle \psi_C | \hat{H} | \psi_C \rangle \quad \tilde{\alpha} = \langle \psi_B | \hat{H} | \psi_B \rangle \quad \beta = \langle \psi_C | \hat{H} | \psi_B \rangle$$

- (b) Bestimmen Sie die Eigenwerte dieser Matrix.  
(c) Betrachten Sie den Fall  $|\alpha - \tilde{\alpha}| \gg |\beta|$ . Berechnen Sie die Bindungsenergie und diskutieren Sie deren Abhängigkeit von der Bindungsstärke  $\beta$  und der Energiedifferenz  $|\alpha - \tilde{\alpha}|$  der beteiligten Atomorbitale.  
(d) Diskutieren Sie analog den Fall des 1,3-Diazets.

