Computer practikum QCB III, Opdracht 7

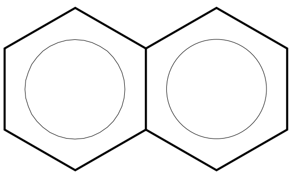
10 juni 2004

7 Geconjugeerde pi-systemen, Hückel model

Opgave 7.1 *Bereken met de Hückel benadering de delocalisatie-energie van 1,3-butadieen en 1,3,5-hexatrieen, ten opzichte van het etheen molecuul. Schrijf hiervoor een MATLAB programma dat de* $\boldsymbol{H}$*-matrix opstelt, waarbij je de Hückel parameter* α *gelijk aan 0 stelt en de parameter* β *gelijk aan 1. De orbital-energieën kun je dan krijgen door de eigenwaarden van het seculaire probleem met deze* $\boldsymbol{H}$*-matrix te berekenen met MATLAB, deze te vermenigvuldigen met* β *en er* α *bij op te tellen. Schrijf deze energieën dan uit in termen van* α *en de resonantie-integraal* $\beta(< 0)$*, maak MO-diagrammen en bereken de delocalisatie-energie. Bekijk ook de eigenvectoren uit MATLAB en schets (kwalitatief) de MO's.*

Opgave 7.2 *Doe hetzelfde voor 1,3-cyclobutadieen en benzeen. Laat zien dat benzeen aromatisch is, d.w.z. gestabiliseerd wordt door delocalisatie van de* π*-elektronen, terwijl in cyclobutadieen een delocalisatie van de* π*-elektronen geen energiewinst oplevert. We noemen dit laatste molecuul anti-aromatisch. In het algemeen geldt dat geconjugeerde ring-moleculen met* $4n + 2$ π*-elektronen aromatisch zijn, moleculen met* $4n$ π*-elektronen anti-aromatisch.*

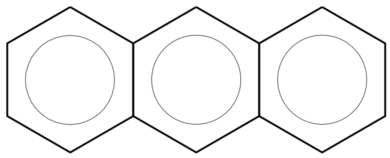
Opgave 7.3 *Doe nu hetzelfde voor naftaleen (twee benzeenringen die een C-C binding gemeenschappelijk hebben, zie tekening). Is de delocalisatie-energie groter dan tweemaal die van benzeen?*



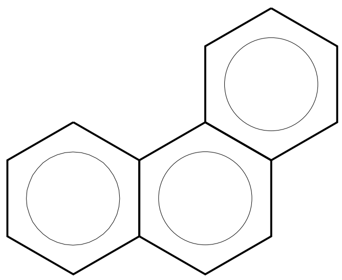
Bekijk de symmetrie van de π*-MO's ten opzichte van de drie onderling loodrechte spiegelvlakken in het naftaleen molecuul. Hoe zou het 10-dimensionale seculair probleem uitgeblokt zijn als je eerst SALC's geconstrueerd had?*

Opgave 7.4 *Doe tenslotte hetzelfde voor*

anthraceen



en fenanthreen



die beide zijn opgebouwd uit drie benzeenringen, zie tekening. Wat levert de grootste delocalisatie-energie?