

Computer practikum QCB III, Opdracht 7

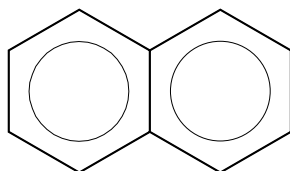
10 juni 2004

7 Geconjugeerde pi-systemen, Hückel model

Opgave 7.1 Bereken met de Hückel benadering de delocalisatie-energie van 1,3-butadien en 1,3,5-hexatrien, ten opzichte van het etheen molecuul. Schrijf hiervoor een MATLAB programma dat de \mathbf{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 \mathbf{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-cyclobutadien en benzeen. Laat zien dat benzeen aromatisch is, d.w.z. gestabiliseerd wordt door delocalisatie van de π -elektronen, terwijl in cyclobutadien 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.

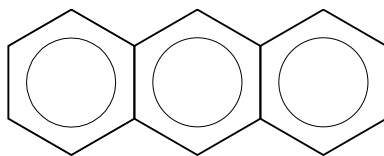
Opgave 7.3 Doe nu hetzelfde voor naftaleen (twee benzeenringen die een C-C binding gemeenschappelijk hebben, zie tekening). Is de delocalisatie-energie groter dan tweemaal die van benzeen?



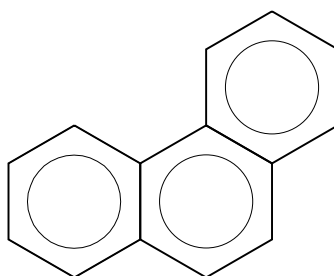
Bekijk de symmetrie van de π -MO's ten opzichte van de drie onderling loodrechte spiegelvlakken in het naftaleen molecuul. Hoe zou het 10-dimensionale seculair probleem uitgeblokt zijn als je eerst SALC's geconstrueerd had?

Opgave 7.4 Doe tenslotte hetzelfde voor

anthraceen



en fenantheen



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