

1)

a) src: modules/eigen.f90

b) output1.txt: Die 4 Eigenwerte sind durch x_i =

$$1: 0.5(5^{(0.5)}+1)$$

$$2: 0.5(5^{(0.5)}-1)$$

$$3: 0.5(-5^{(0.5)}+1)$$

$$4: 0.5(-5^{(0.5)}-1)$$

gegeben.

Die möglichen Orbitalenergien betragen: $E=a+x*b$ (mit $a<0$ und $b<0$)

Die Wellenfunktion ergibt sich direkt als Linearkombination der normierten Eigenvektoren mit dem zugehörigen Orbitalen.

Die 4 Elektronen befinden sich in den Orbitalen zu den Zuständen 1 und 2, da diese ein maximales x haben, also mit minimale Energie.

Diagramm: diagramm1.png oder

https://personalpages.manchester.ac.uk/staff/t.wallace/30412tw1/images/30412_lect1/image060.gif

Die Wellenfunktionen lassen sich ebenfalls der Graphik entnehmen.

Positive Vorzeichen der Eigenvektorkomponenten bedeuten, dass die negative Hälfte (rot) des jeweiligen p-Orbitals nach oben zeigt.

Die Größe des Orbitals gibt jeweils an, ob es in den Gesamtzustand mit einem (relativen) Faktor von 0.60 oder 0.37 eingeht.

$$\text{Delokalisierungsenergie } E = E_{\text{Butadien}} - 2 \cdot E_{\text{Ethen}} = (4 \cdot a + (5^{(0.5)} \cdot 2) \cdot b) - 2 \cdot (2 \cdot a + 2 \cdot b) = 0.472 \cdot b$$

c) output2.txt: x_i =

$$1: 2$$

$$2: 0$$

$$3: 0$$

$$4: -2$$

Diagramm: diagramm2.png oder

<http://www.chemtube3d.com/images/aleximages/Cyclobutadiene.png>

Es ist zu beachten, dass die Orbitale bei $E=a$, also die einfach besetzten Zustände, nicht gleich stark ausgeprägt sind, da die zugehörigen Eigenvektoren Werte von ± 0.7 und ± 0.09 haben.

Die ausgefüllten Orbitale sind negativ.

$$\text{Delokalisierungsenergie } E = E_{\text{Cyclo}} - 2 \cdot E_{\text{Ethen}} = (4 \cdot a + 2 \cdot b) - (4 \cdot a + 4 \cdot b) = -2 \cdot b$$

Cyclobutadien ist nicht stabil, da die Delokalisierungsenergie geringer als die von Butadien ist (in Einheiten von b).

Es zerfällt also in Butadien.

d) output3.txt x_i =

$$1: 2$$

$$2: 1$$

$$3: 1$$

$$4: -1$$

$$5: -1$$

$$6: -2$$

Diagramm: diagramm3.jpg oder

<https://slideplayer.org/slide/2912845/10/images/3/Molek%C3%BClorbitale+in+Benzol.jpg>

$$\text{Delokalisierungsenergie } E = E_{\text{Benzol}} - 3 \cdot E_{\text{Ethen}} = (6 \cdot a + (4+4) \cdot b) - (6 \cdot a + 6 \cdot b) = 2 \cdot b$$

Benzol ist folglich stabil.