

Molekülorbitale und andere Bindungstheorien

In dieser Übung lernen Sie anhand von mehreren Simulationen und Animationen, wie sich Molekülorbitale bilden, wie diese Bindungen dargestellt werden können und, wie die Art einer Bindung einige physikalische Eigenschaften von Molekülen beeinflussen kann.

Link zu den Simulationen für diese Aktivität: <https://tcel-hu-berlin.github.io/silc/mo+bindungen/>

💡 = Hinweis auf der Website verfügbar

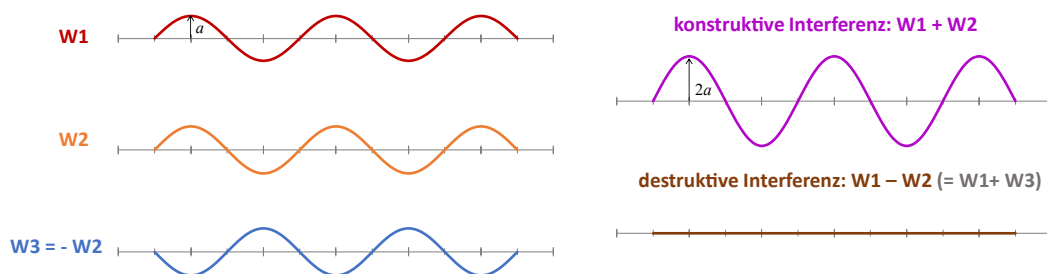
💬 = Diskussionspunkt

BONUS = optionale Frage

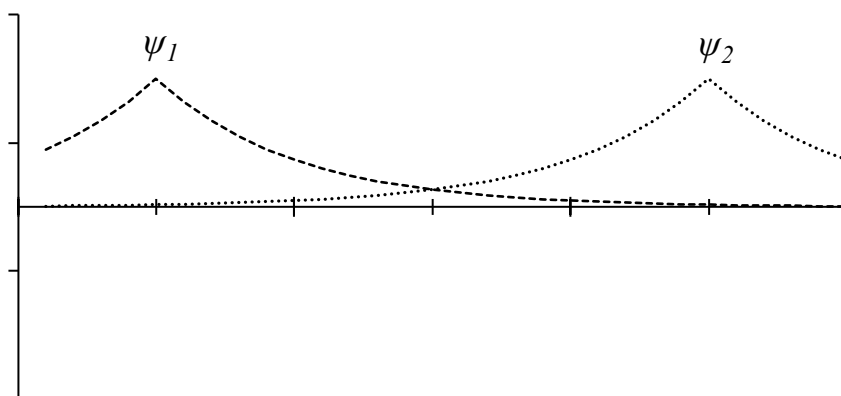
Vorbereitungsaufgaben

(vor der Übung zu bearbeiten)

1. Beginnen wir mit einer kurzen Physik-Übung. Überlappende Wellen können je nach dem Verhältnis ihrer Phasen konstruktiv oder destruktiv interferieren (siehe Abbildung unten).



Zwei Wellenfunktionen (bezeichnet mit den griechischen Buchstaben ψ_1 und ψ_2), die zwei Atomorbitale darstellen, sind im folgenden Diagramm dargestellt. Skizzieren Sie in demselben Diagramm grob die entstehenden Wellenfunktionen ($\psi_1 + \psi_2$) und ($\psi_1 - \psi_2$), wenn ψ_1 und ψ_2 konstruktiv oder destruktiv interferieren würden!



2. Öffnen Sie Simulation A und lesen Sie den Überblick durch.
 - a) Unterscheiden Sie zwischen den Begriffen „Atomorbital“ (AO) und „Molekülorbital“ (MO)!
 - b) Beschreiben Sie, was mit den Energien der MO geschieht, wenn sich der Abstand zwischen den Atomkernen verringert! Was lässt sich über die energetische Stabilität der zwei MO sagen?
 - c) Wie könnte man die Bindungslänge des Wasserstoffmolekül-Ions (H_2^+) mit Hilfe der Informationen aus dem obigen Diagramm bestimmen? Beschreiben Sie Ihre Strategie und geben Sie die Bindungslänge von H_2^+ an.
3. Vergewissern Sie sich, dass Sie gut mit der Konstruktion von Lewis-Formeln umgehen können! Stellen Sie die Lewis-Formel des ClO_3^- - Ions als Beispiel auf. Ein vorgeschlagener schrittweiser Ansatz zur Konstruktion von Lewis-Formeln steht im *Hilfe*-Menü zur Verfügung.
4. Ordnen sie die drei Typen von van-der-Waals-Wechselwirkungen den Molekültypen zu, zwischen denen Sie im Allgemeinen auftreten.

BONUS

diese Art von Anziehung:	... tritt i. Allg. zwischen diesen Molekülen auf:
permanenter Dipol - permanenter Dipol (<i>Keesom</i>)	zwei unpolare Moleküle
temporärer Dipol – temporärer Dipol (<i>London</i>)	zwei polare Moleküle
permanenter Dipol – induzierter Dipol (<i>Debye</i>)	ein polares und ein unpolares Molekül

Vorsicht: Moleküle können oft mehrere Typen von van-der-Waals-Kräften aufweisen; hier wird es aber nach den am häufigsten vorherrschenden Arten von Kräften gefragt!

Hauptaufgaben

(während der Übung zu bearbeiten)

Die am häufigsten verwendeten Abbildungen von Orbitalen sind eigentlich Darstellungen der quantenmechanischen (mathematischen) "Wellenfunktionen", die die Bewegung der Elektronen beschreiben. Wenn ein Orbital mit zwei Farben dargestellt wird, steht eine Farbe (hier rot) für positive (+) Teile der Wellenfunktion, während die andere Farbe (hier türkis) für negative (-) Teile der Wellenfunktion steht.

1. Öffnen Sie Simulation A und setzen Sie den Abstand zwischen den Wasserstoff-Atomen auf ca. 1,0-1,2 Å. Beobachten Sie die Wellenfunktionen der σ - und σ^* -Molekülorbitale, die sich aus den beiden 1s-Atomorbitalen ergeben.
 - a) Lesen Sie die Werte der Wellenfunktion $\psi(\sigma)$ (zweite Panel von oben) an verschiedenen Positionen sorgfältig ab und vergleichen Sie sie mit der ursprünglichen 1s-Wellenfunktion (untere Panel). Wie haben die Wellenfunktionen der zwei 1s-Atomorbitale mathematisch interagiert, um das σ -Molekülorbital zu bilden?
 - b) Beantworten Sie die gleiche Frage für die Wellenfunktion $\psi(\sigma^*)$ (erste Panel von oben).



- c) Fassen Sie Ihre Antworten bei a und b zusammen in folgender Form zusammen:
 „Zwei überlappende 1s-Atomorbitale bilden

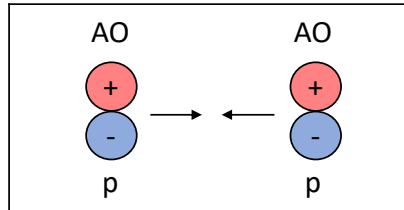
(i) ein σ -Molekülorbital, wobei ihre Wellenfunktionen

_____.

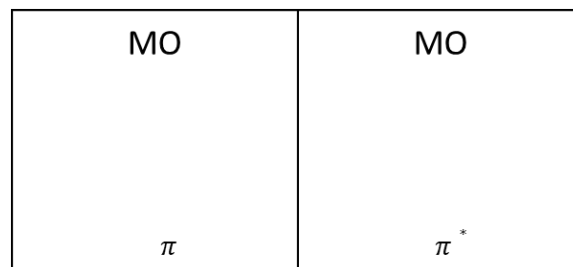
(ii) und ein σ^* -Molekülorbital, wobei ihre Wellenfunktionen

_____.“

2. Unten sind Bilder von zwei p-Orbitalen zu sehen. Wenn die p-Orbitale von zwei benachbarten Atomen in der durch die Pfeile angezeigten Richtung zusammengebracht werden, bilden sie ein π - und π^* -Molekülorbital, ähnlich wie oben.



- a) Skizzieren Sie die Formen der π - und π^* -Orbitale, die sich Ihrer Meinung nach aus der Wechselwirkung der beiden p-Orbitale ergeben werden.



- b) Überprüfen Sie Ihre Antwort, indem Sie sich die Animation B ansehen, die die Wechselwirkung der 1s, 2s und 2p Orbitale von zwei Sauerstoffatomen zeigt. Kommentieren Sie die Richtigkeit Ihrer Vorhersage in Teil (a).
3. Die Molekülorbitale in Animation B sind mit σ , σ^* , π oder π^* bezeichnet.
- a) Was bedeuten die Bezeichnungen σ und σ^* für Molekülorbitale i. Allg.? Wählen Sie die richtige Aussage unter A-D.
- A. σ -Orbitale sind immer unbesetzt, während σ^* -Orbitale mit Elektronen besetzt sind.
 - B. σ -Orbitale enthalten immer Elektronen mit entgegengesetztem Spin, während σ^* -Orbitale Elektronen mit demselben Spin enthalten.
 - C. σ -Orbitale haben immer bindenden Charakter, während σ^* -Orbitale antibindenden Charakter haben.
 - D. Elektronen in σ -Orbitalen sind immer auf einem Atom lokalisiert, während σ^* -Orbitale zwischen beiden Atomen delokalisiert sind.
- b) Was bedeutet die Bezeichnung σ (sigma) oder π (pi) i. Allg.? Wählen Sie die richtige Aussage unter A-D.

- A. σ -Molekülorbitale entstehen durch die Wechselwirkung von s-Atomorbitalen, während π -Molekülorbitale durch die Wechselwirkung von p-Atomorbitalen entstehen
 - B. σ -Molekülorbitale entstehen durch direkte Wechselwirkung zwischen Atomorbitalen, während π -Molekülorbitale durch seitliche Wechselwirkung zwischen Atomorbitalen entstehen
 - C. σ -Molekülorbitale haben bindenden Charakter, π -Orbitale haben antibindenden Charakter
 - D. σ -Orbitale enthalten Elektronen, während π -Orbitale im Grundzustand leer sind.
- a) Diskutieren Sie mit Ihren Kommilitonen, ob und warum die obigen richtige Antworten sinnvoll sind. Gehen Sie in Ihrer Antwort sowohl auf die Energie als auch auf die Form der jeweiligen Orbitale.
4. Welches Adjektiv wird zur Beschreibung von Orbitalen mit gleicher Energie verwendet? Welche Orbitalpaare in Animation B haben die gleiche Energie?
5. Erstellen Sie Molekülorbitaldiagramme für ein H_2 -Molekül und ein He_2 -Molekül und füllen Sie sie mit der entsprechenden Anzahl von Elektronen (\uparrow oder \downarrow).
- a) Wie viele Elektronen sollten jedem MO-Diagramm hinzugefügt werden? Woher wissen Sie das?
 - b) Wie lautet die Bindungsordnung von zweiatomigem Wasserstoff?
 - c) Wie lautet die Bindungsordnung von zweiatomigem Helium?
 - d) Was sagen die Bindungsordnungen über die „Lebensfähigkeit“ der beiden Moleküle aus?
6. Die Schreibweise \uparrow oder \downarrow auf Elektronen bezeichnet ihren *Spin*, der ein Indikator dafür ist, wie die Flugbahn eines Elektrons durch ein Magnetfeld beeinflusst wird. Wenn alle Elektronen eines Moleküls in Paaren vorliegen ($\uparrow\downarrow$), haben zwei Elektronen eines Paares gemäß dem Pauli-Ausschlussprinzip entgegengesetzte Spins. Folglich wirkt ein Magnetfeld auf die Elektronen in entgegengesetzter Richtung und hat keine tatsächliche Wirkung auf das Molekül (Diamagnetismus). Enthält ein Molekül dagegen ungepaarte Elektronen (z. B. \uparrow), gibt es keine Gegenkraft für die Wechselwirkung eines Magnetfeldes mit den ungepaarten Elektronen, was dazu führt, dass das Molekül als Ganzes magnetische Eigenschaften aufweist (Paramagnetismus). Begründen Sie Ihre Wahl mit Hilfe von MO-Diagrammen und Worten und geben Sie ein Beispiel für:
- a) ein *diamagnetisches* zweiatomiges Molekül in der 2. Reihe des Periodensystems.
 - b) ein *paramagnetisches* zweiatomiges Molekül in der 2. Reihe des Periodensystems.



BONUS

Wir werden nun aus den MO-Diagrammen "herauszoomen" und uns einer einfacheren Darstellung der Bindung zuwenden: Lewis-Formeln. Lewis-Formeln liefern zwar nicht so viele Informationen über die Art der Bindung, aber sie sind ein praktischer Weg, um die Anzahl der Elektronen um ein Atom in einem Molekül (und damit auch die Geometrie des Moleküls) zu bestimmen. Wenn Sie mit der Aufstellung von Lewis-Strukturen noch nicht vertraut sind, können Sie sich das *Hilfe*-Menü ansehen.

7. Erläutern Sie anhand der Lewis-Strukturen und unter Angabe der zu erfüllenden Prinzipien, warum F_2 eine Einfachbindung, O_2 aber eine Doppelbindung enthält.
8. Elemente der 3. Periode oder darunter (wie Schwefel und Phosphor) können manchmal mehr als 8 Elektronen um sich herum haben und verstoßen damit gegen die Oktettregel. Die Elemente der 1. und 2. Periode können jedoch nicht mehr als 8 Valenzelektronen haben. Wie gelingt es den Elementen mit höherer Ordnungszahl, die zusätzlichen Elektronen aufzunehmen?

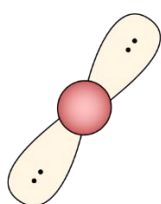


BONUS

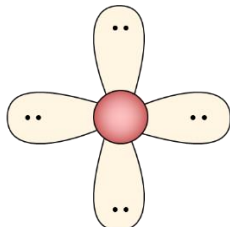
9. Lewis-Formeln werden zusammen mit den Regeln der VSEPR-Theorie verwendet, um die Elektronengeometrie und die "echte" Geometrie von Molekülen zu bestimmen. Betrachten Sie die Lewis-Formel für H_2O :



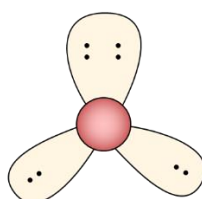
- a) Welches Bild beschreibt die Elektronengeometrie (Pseudogeometrie) eines Sauerstoffmoleküls am besten? Wie hilft Ihnen die Lewis-Struktur bei Ihrer Antwort?



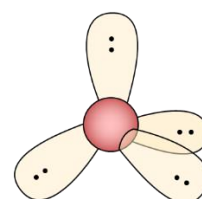
A



B

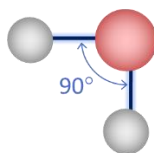


C

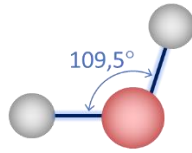


D

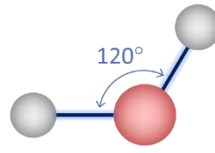
- b) Welches der folgenden Bilder beschreibt am besten die molekulare ("echte") Geometrie eines Wassermoleküls? Wie hilft Ihnen die Lewis-Struktur bei Ihrer Antwort?



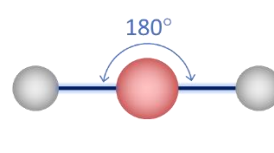
A



B



C



D

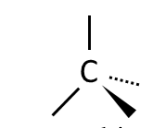
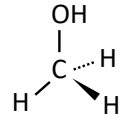
- c) Elektronengeometrien können auch als AX_xE_e dargestellt werden, wobei A für das Zentralatom, X für die x umgebenden Atome und E für die e Elektronenpaare um das Zentralatom steht. Drücken Sie die Geometrie von H_2O mit der AXE-Schreibweise aus.

BONUS

10. Öffnen Sie die Simulation C (*PhET-Molekülgeometrien*) und lesen Sie den Überblick durch. Verwenden Sie die Simulation zur Visualisierung von 3D-Formen und geben Sie die Elektronengeometrien und realen Geometrien (zusammen mit dem Namen jeder Geometrie) für die folgenden Moleküle an. Geben Sie auch für jedes Molekül an, ob es polar oder unpolar es. Verwenden Sie die Notation mit Keil (\blacktriangleleft) und Strich (---), um Bindungen darzustellen, die aus der Papierebene heraus- oder in sie hineinführen. Vergleichen Sie Ihre Antworten mit denen Ihrer Kommilitonen.



Molekül	Lewis-Formel	Pseudogeometrie & Name	Echte Geometrie & Name	Polarität
CF_4		 tetraedrisch	 tetraedrisch	unpolar

CH ₃ OH	$ \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} : \text{C} : \ddot{\text{O}} : \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array} $	 tetraedrisch (um Kohlenstoff)	 tetraedrisch (um Kohlenstoff)	polar
NH ₃				
H ₂ CO				
ICl ₄ ⁻ BONUS				
SF ₆ ⁻ BONUS				
XeF ₂ BONUS				

11. Wenn Sie in der *PhET*-Simulation die Option „Bindungswinkel anzeigen“ wählen, wird ein ziemlich offensichtliches Versäumnis der Simulation deutlich gemacht. Was ist es?

BONUS

Schauen Sie sich für ein paar Minuten die drei kurzen Animationen in der Animationsgruppe D an, die die vorherrschenden zwischenmolekularen Kräfte darstellen, wenn verschiedene Arten von Molekülen in Wasser eingebracht werden.

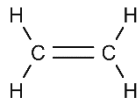
12. Für die Moleküle Tetrafluormethan (CF₄), Methanol (CH₃OH), und Ammoniak (NH₃), besprechen Sie mit Ihren Kommilitonen, welche Arten von zwischenmolekularen Kräften vorhanden sind. Erläutern Sie anhand dieser Konzepte die Tendenz der (im *Hilfe*-Menü angegebenen) Löslichkeiten der vier Moleküle in Wasser.
13. Die Valenzschale von Kohlenstoff enthält ein s-Orbital (2s) und drei p-Orbitale. Die drei p-Orbitale (2p_x, 2p_y, 2p_z) haben eine höhere Energie als das s-Orbital und sind in 90° Winkeln zueinander ausgerichtet. Dennoch weist CH₄ (genau wie CF₄) eine tetraedrische Geometrie auf, bei der alle Bindungen energetisch gleichwertig sind und in einem Winkel von 109,5° zueinander stehen.
- a) Welches Phänomen lässt die tetraedrische Geometrie aus den ursprünglichen Orbitalen des Kohlenstoffs entstehen?



BONUS

- b) Mit welcher Schreibweise werden die vier Orbitale bezeichnet, die die 2s und 2p Orbitale im CH_4 "ersetzen"?
- c) Nennen Sie mit der gleichen Argumentation die Kohlenstofforbitale, die die C-H- und C-C-Bindungen in den folgenden Molekülen bilden.

(i) Ethan



(ii) Ethin

