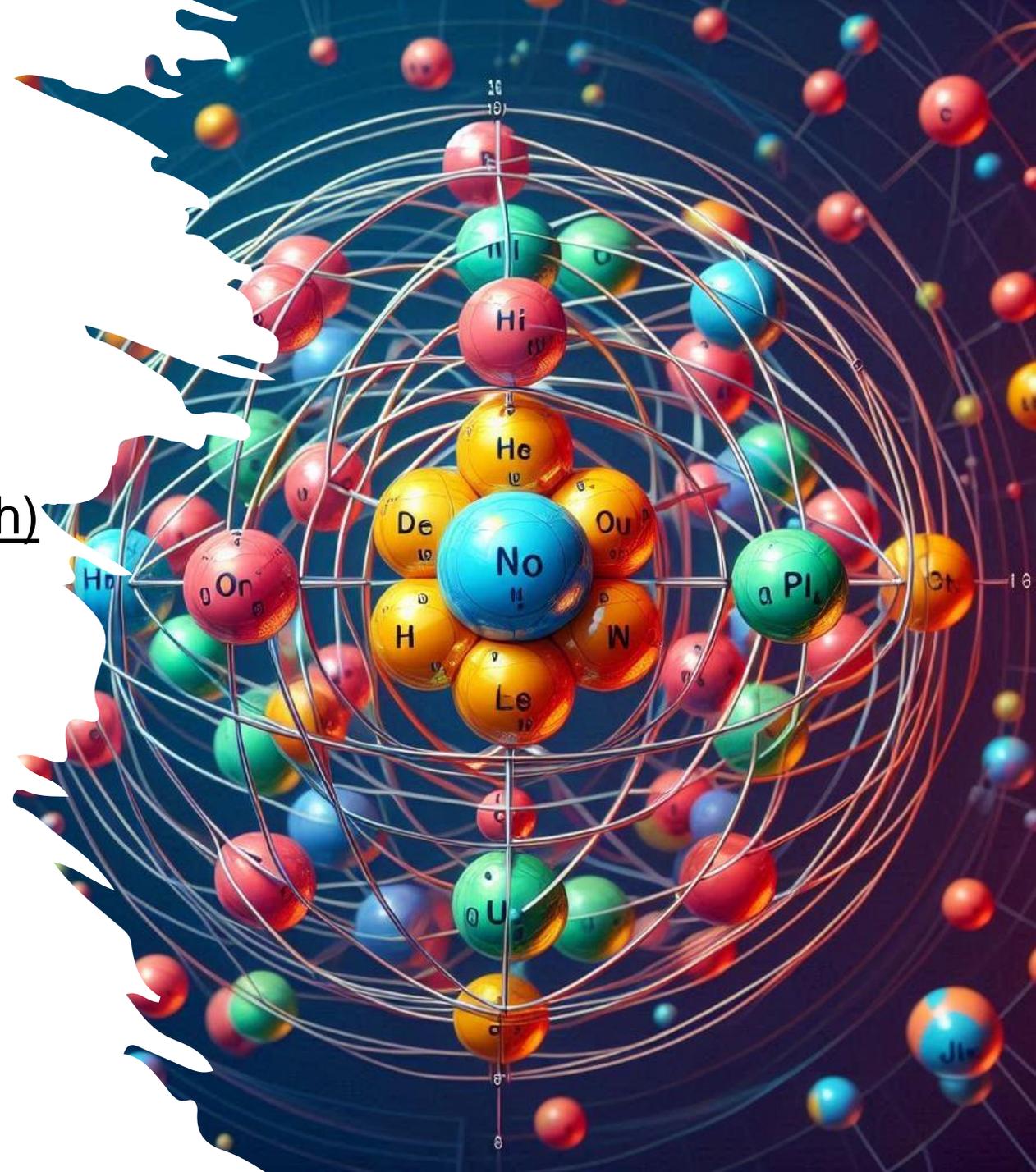


LehrplanPlus Chemie 12
grundlegendes und erhöhtes
Anforderungsniveau

Lernbereich 4: Chemische Bindung (13 h)

Titelbild mit Hilfe von ChatGPT 4.0 –Public Domain Mark; Prompt: Erstelle ein Titelbild für eine Präsentation im Comicstil für Schüler zum Thema Orbitaltheorie



Sequenzplanung (ca. 14 Stunden)

1	Bindungstypen, Stoffklassen (Wiederholung von Grundlagen)	
2 3	Kurze Geschichte der Quantenmechanik	Welle-Teilchen-Dualismus, Doppelspaltexperiment mit Elektronen, Unschärferelation
4	Orbitale als Wellenfunktion, Betragsquadrat der Wellenfunktion als Aufenthaltswahrscheinlichkeit	1s-Orbital: mathematische Modellierung, Aufenthaltswahrscheinlichkeit
5	Orbitale als Aufenthaltsraum, Dreidimensionale Darstellung von Orbitalen	1s-Orbital (ohne Berechnungen)

Vorwissen der Schülerinnen und Schüler aus der 11. Jahrgangsstufe Physik

Die Schülerinnen und Schüler...

- **erkennen Beugung und Interferenz als typische Wellenphänomene.** Sie argumentieren zur Erklärung von Alltagsphänomenen und experimentellen Beobachtungen zur Interferenz mechanischer Wellen mit dem Superpositionsprinzip. **Insbesondere begründen sie das Zustandekommen von konstruktiver und destruktiver Interferenz bei zwei Wellenzentren mit dem Gangunterschied.**
- **untersuchen monochromatisches Licht am Doppelspalt, interpretieren das Schirmbild qualitativ mithilfe des Wellenmodells und formulieren einen Zusammenhang zwischen Farbe und Wellenlänge des Lichts.**
- **vergleichen das Photonen- und das Wellenmodell des Lichts,** insbesondere unter dem Aspekt ihrer jeweiligen Anwendbarkeit.

Welle-Teilchen-Dualismus
bei Licht
HALLWACHS-Versuch

Photoelektrischer Effekt

Photoelektrischer Effekt

Wechselwirkung von
Photonen mit Elektronen

Entladung der Zinkplatte
wird sichtbar am Elektroskop

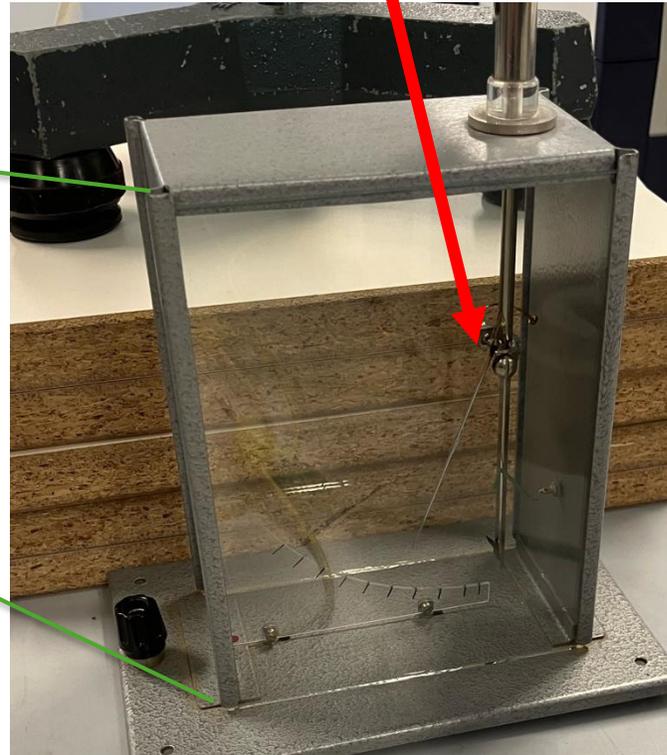
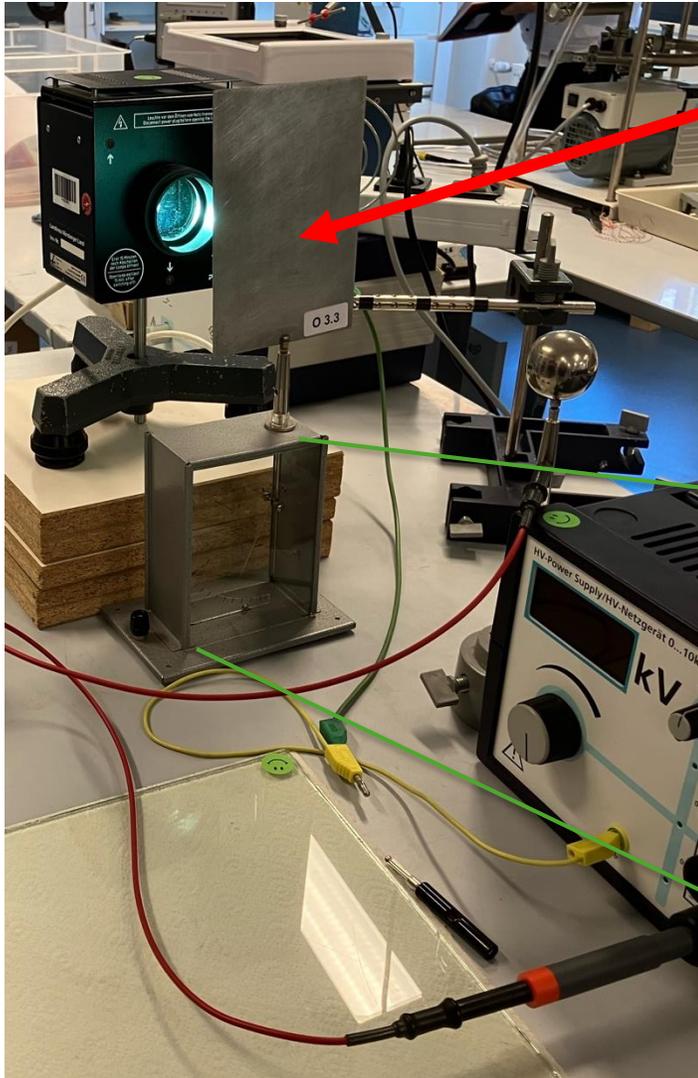
Energiequantelung
der Photonen

$$E = h \cdot f = h \frac{c}{\lambda}$$

kinetische Energie
freigesetzter Elektronen

$$E_{kin} = h \cdot f - W_A$$

- Freisetzung von Elektronen nur, wenn Ablösearbeit W_A verrichtet werden kann.
- Ablösearbeit kann ab ganz bestimmter Grenzfrequenz f_G geleistet werden.



Animation zum Photoelektrischen Effekt

<https://phet.colorado.edu/de/simulations/photoelectric>

Quantelung wird vor allem mithilfe einer Animation deutlich

Abbildung
aus urheberrechtlichen Gründen
entfernt!

Abbildung
aus urheberrechtlichen Gründen
entfernt!

Neue Inhalte

Kompetenzerwartungen: Die Schülerinnen und Schüler...

- erläutern das Ergebnis des Doppelspaltexperiments mit Hilfe des Welle-Teilchen-Dualismus der Elektronen vor dem Hintergrund des historischen Erkenntniswegs.
- begründen die Antreffwahrscheinlichkeit für Elektronen mit der Heisenbergschen Unschärferelation.

Inhalte zu den Kompetenzen:

- Doppelspaltexperiment mit Elektronen:
Interferenzmuster, Welle-Teilchen-Dualismus
- Heisenbergsche Unschärferelation



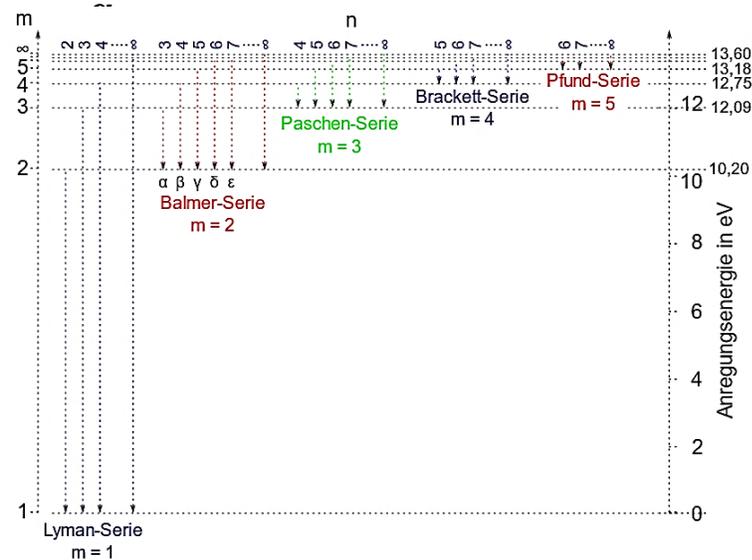
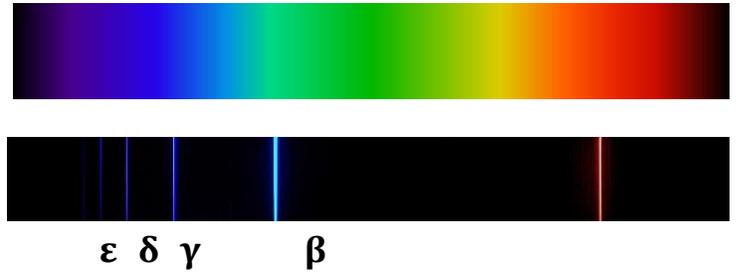
Niels Bohr (1885 – 1962)

The American Institute of Physics credits the photo [1] to AB Lagrelius & Westphal, which is the Swedish company used by the Nobel Foundation for most photos of its book series Les Prix Nobel.

(https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Niels_Bohr.jpg), „Niels Bohr“, als gemeinfrei gekennzeichnet, Details auf Wikimedia Commons:

<https://commons.wikimedia.org/wiki/Template:PD-old>

Linienpektrum des Wasserstoffatoms



PNG: [w:de:user:Kiko2000](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Wasserstoff-Termschema.svg); SVG: Cepheiden (<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Wasserstoff-Termschema.svg>), „Wasserstoff-Termschema“, <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/legalcode>

Jan Homann (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Visible_spectrum_of_hydrogen.jpg), „Visible spectrum of hydrogen“, <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/legalcode>

Bohrsches Atommodell (1913)

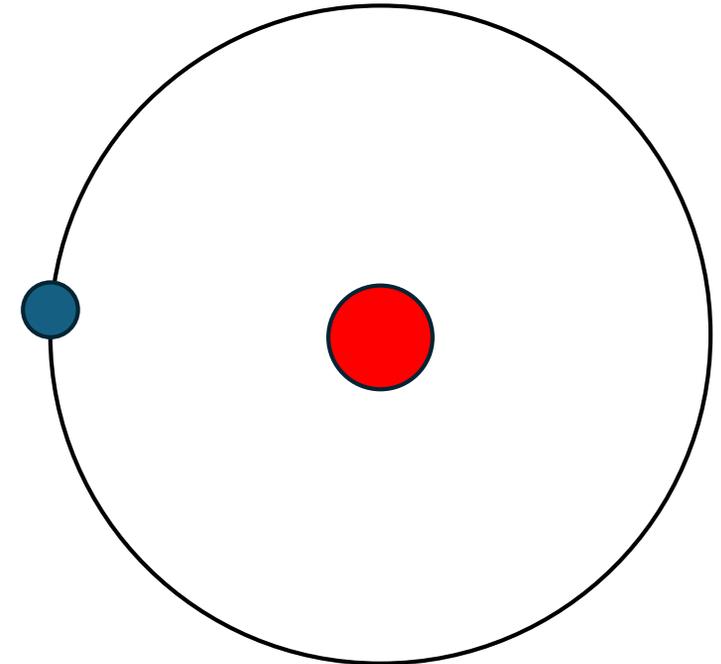


Abbildung ISB

Stkl (<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Spectral-lines-continuous.svg>), „Spectral-lines-continuous“, als gemeinfrei gekennzeichnet, Details auf Wikimedia Commons:

<https://commons.wikimedia.org/wiki/Template:PD-user>

Hypothese von Louis de Broglie [də 'brœj] (1924):

„Nicht nur Licht weist Teilchen- und Wellenaspekte auf, sondern auch Elektronen und andere Objekte mit einer von Null verschiedenen Ruhemasse.“

→1927 Nachweis der Elektronenbeugung an einem Ni-Kristall („Davisson-Germer-Experiment“)

→1959 Beugung von Elektronen am Doppelspalt durch Clauss Jönsson



1892-1987

Unknown authorUnknown author
(https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Broglie_Big.jpg),
„Broglie Big“, als gemeinfrei gekennzeichnet, Details auf
Wikimedia Commons:
<https://commons.wikimedia.org/wiki/Template:PD-old>

Didaktisch-methodische Überlegung

1) Vom Greifbaren - Eigenschaften von Wellen
am Beispiel von Wassertropfen

optional

2) Übers bekannt Abstrakte - Doppelspaltexperiment
mit Photonen

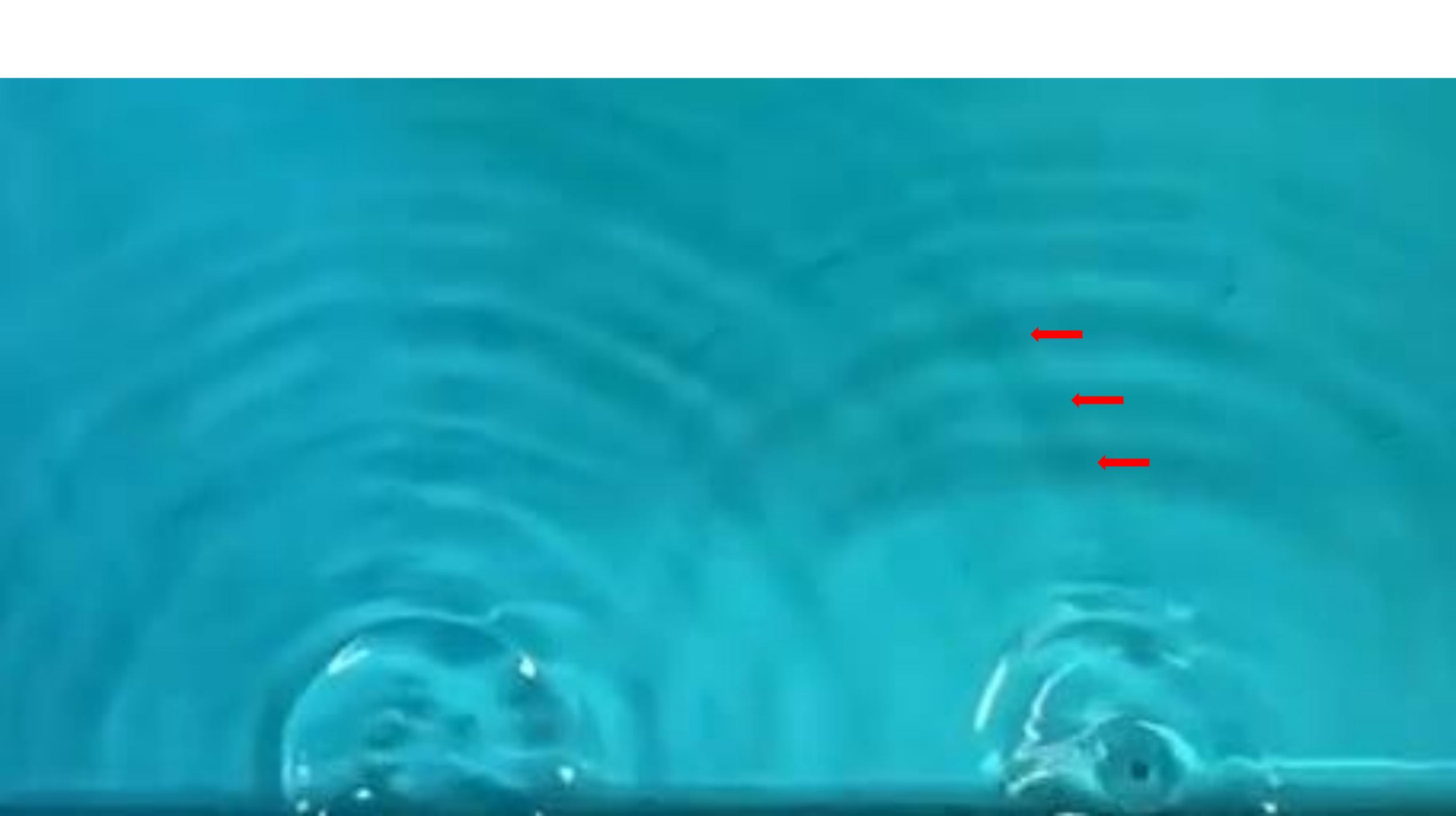
(aus Physik 11 bekannt)

3) Zum unbekannt Abstrakten - Doppelspaltexperiment
mit Elektronen

→ Bestätigung des Postulats von de Broglie

Medium:
Simulation
von Muthsam
(Webseite LMU
München)





Elektronen – Verhalten als Welle

[Doppelspalt - Lehrstuhl für Didaktik der Physik - LMU München \(uni-muenchen.de\)](http://uni-muenchen.de)



Abbildung
aus urheberrechtlichen Gründen
entfernt!

Heisenberg'sche Unschärferelation

Heisenbergsche Unschärferelation (1927)

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx h$$

tatsächlich: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4 \pi} \approx 5 \cdot 10^{-35} \text{ Js}$

mit

- Δx Streuung der Ortskoordinate
- Δp Streuung des Impulses
- Plancksches Wirkungsquantum h

Es ist grundsätzlich unmöglich, von einem Objekt gleichzeitig den genauen Aufenthaltsort und den Impuls zu bestimmen.



Werner Heisenberg
1901-1976

Bundesarchiv, Bild 183-R57262 / Unknown author/Unknown author / CC-BY-SA 3.0 (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Bundesarchiv_Bild183-R57262,_Werner_Heisenberg.jpg), „Bundesarchiv Bild183-R57262, Werner Heisenberg“, <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/de/legalcode>

Heisenbergsche Unschärferelation: Photonen am Einfachspalt

<https://www.physik.uni-konstanz.de/vs/themen/optik/interferenz-beugung/fraunhofersche-beugung/beugung-am-spalt/>

Abbildung
aus urheberrechtlichen Gründen
entfernt!

Orbitale

Kompetenzerwartungen:

Die Schülerinnen und Schüler ...

- **beschreiben Orbitale als** aus der Anziehung zu den Kernen und den übrigen Elektronen **mathematisch gewonnene Wellenfunktionen der Elektronen.**
- deuten die **Betragsquadrate der Wellenfunktionen ($|\psi|^2$) als Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Elektronen.**

Inhalte zu den Kompetenzen:

- Die Wellenfunktion ψ und ihr Betragsquadrat $|\psi|^2$ **am Beispiel des 1s-Orbitals des H-Atoms.**
- **Dreidimensional bildhafte Darstellungen von Atomorbitalen.**

Grundlage der Berechnung von Wellenfunktionen/Orbitalen ist die Schrödingergleichung (1926)

$$i\hbar \frac{d\psi(\vec{r}, t)}{dt} = H\psi(\vec{r}, t)$$

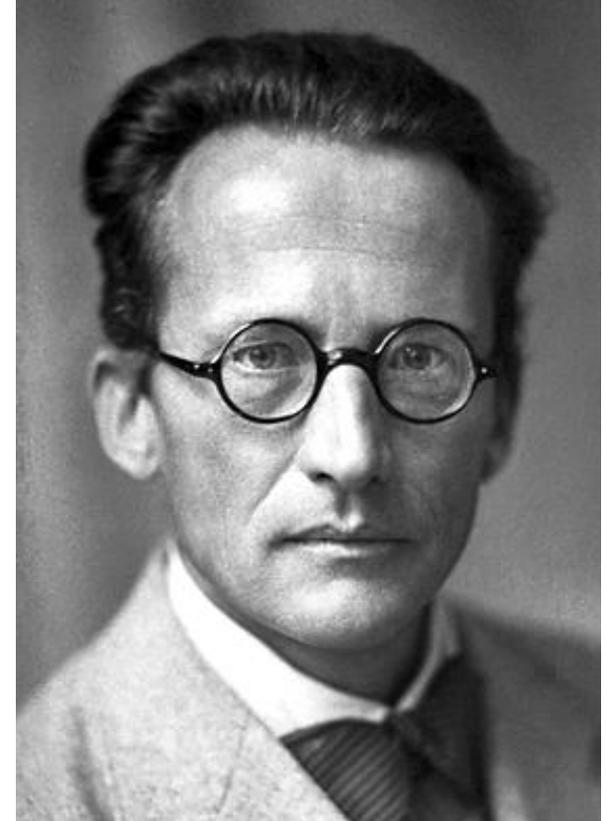
In der QM ersetzt man den Impuls durch einen Operator, den man auf die Wellenfunktion anwendet.

$$H = \underbrace{\frac{-\hbar^2 \Delta}{2m}}_{E_{\text{kin}}} + \underbrace{U(\vec{r})}_{E_{\text{pot}}}$$

Wenn gilt, dass $H\psi(\vec{r}, t) = E * \psi(\vec{r}, t)$, dann ist die Lösung der SG gegeben durch

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi(\vec{r}, 0)$$

$\psi(\vec{r}, t)$ ist dann eine stationäre Lösung (stehende Welle, Eigenfunktion des Hamiltonoperators).



Erwin Schrödinger (1887-1961)

Nobel foundation
([https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Erwin_Schrödinger_\(1933\).jpg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Erwin_Schrödinger_(1933).jpg)), „Erwin Schrödinger (1933)“, als gemeinfrei gekennzeichnet, Details auf Wikimedia Commons:
<https://commons.wikimedia.org/wiki/Template:PD-old>

Die einfachste Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoff-Atom ist die (vereinfachte) Wellenfunktion ψ :

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}$$

mit r = Abstand des Elektrons vom Atomkern in Einheiten des Bohrradius

$$\left[\frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} + U(\vec{r}) \right] \psi_{1s} = E_{1s} \cdot \psi_{1s} \quad \text{oder}$$

$$\text{für } \psi_{2p}: \quad \left[\frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} + U(\vec{r}) \right] \psi_{2p} = E_{2p} \cdot \psi_{2p}$$



Erwin Schrödinger (1887-1961)

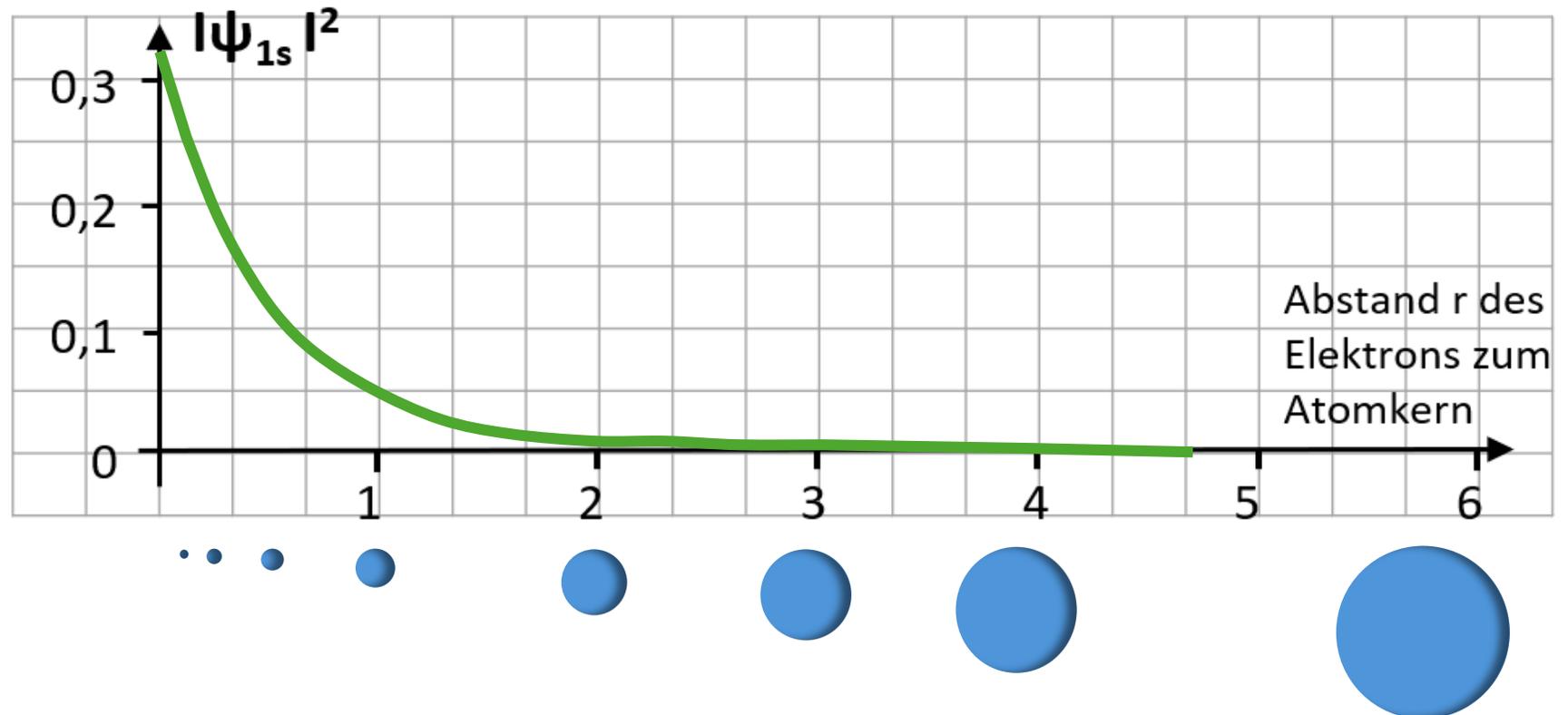
Nobel foundation
([https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Erwin_Schrödinger_\(1933\).jpg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Erwin_Schrödinger_(1933).jpg)), „Erwin Schrödinger (1933)“, als gemeinfrei gekennzeichnet, Details auf Wikimedia Commons:
<https://commons.wikimedia.org/wiki/Template:PD-old>

Aufgaben:

1. Quadriert man den Betrag der Wellenfunktion ψ_{1s} , erhält man die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons. Berechnen Sie $|\psi_{1s}|^2$ für die gegebenen Werte r (Tabelle) und zeichnen Sie den Graphen.

$$|\psi_{1s}|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \right|^2 \quad \text{mit } r \text{ in Einheiten von } r_0 \\ r_0 = \text{Bohrscher Atomradius}$$

r	$ \psi_{1s} ^2$
0,1	0,260
0,5	0,116
1	0,0428
2	0,0057
3	0,000
6	0,000

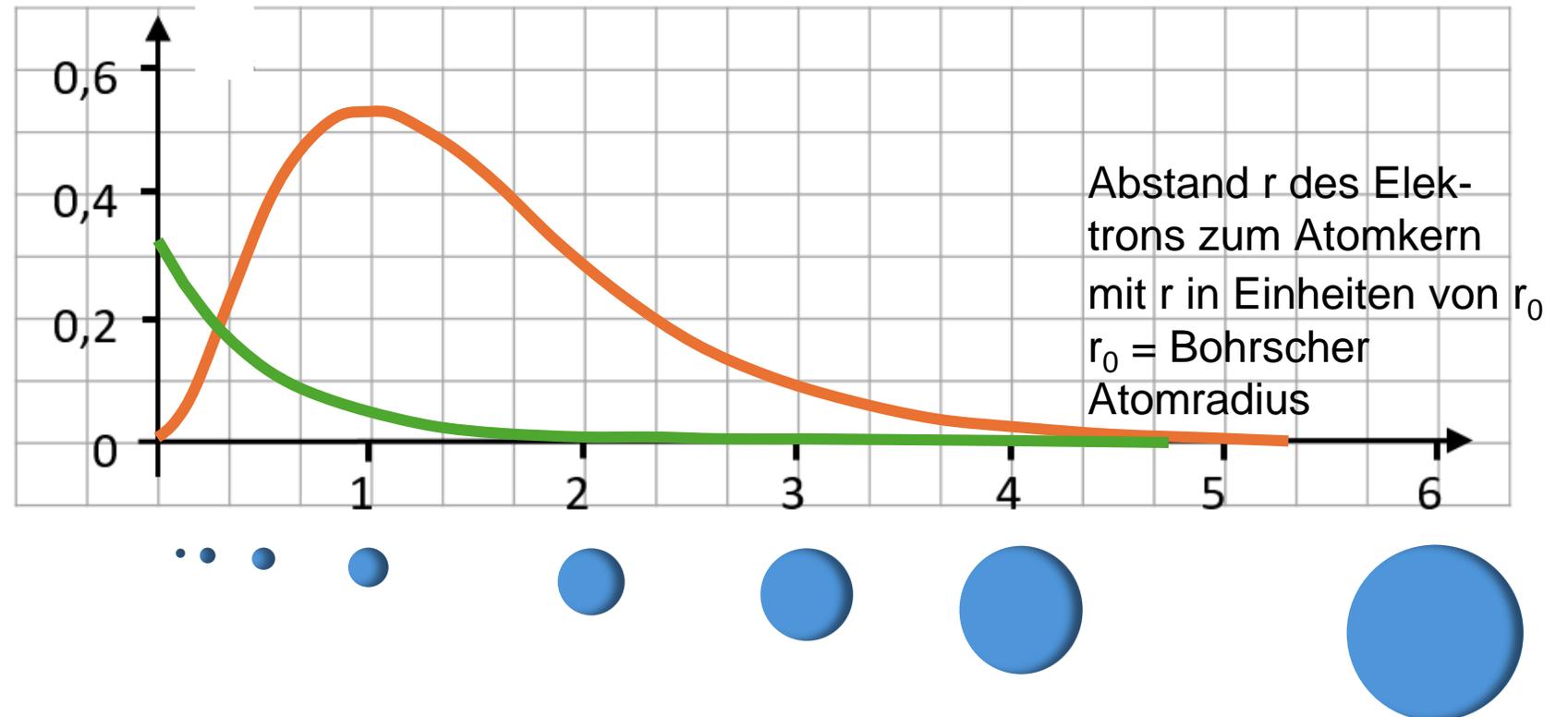


Aufgaben:

Die beschriebenen „Aufenthaltsbereiche“ sind in Abhängigkeit des Radius unterschiedlich groß. Multipliziert man die Funktion mit der radiusbezogenen Oberfläche (Kugeloberfläche: $4 \pi r^2$), erhält man als Resultat die **radiale Wahrscheinlichkeitsdichte** für das Elektron:

$$P_{1s} = \left| \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \right|^2 \cdot 4 \pi r^2$$

r	P_{1s}
0,1	0,103
0,5	0,368
1	0,541
2	0,293
3	0,089
6	0,0009



Aufgabe zur Lernkontrolle

- Zeichnen Sie die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte nach der Vorstellung des Bohr'schen Atommodells in das obenstehende Diagramm Abb. 2 ein.
- Erläutern Sie, wie die Ergebnisse aus der Abbildung das Bohr'sche Atommodell widerlegen.

$$P_{1s} = \left| \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \right|^2 \cdot 4 \pi r^2$$



$|\psi_{1s}|^2$

→ Aufenthaltswahrscheinlichkeit e^-

→ Berechnung der Oberfläche eines Raums

= **Orbital**, in dem sich das Elektron mit 90%iger Wahrscheinlichkeit „über den Raum verschmiert“ aufhält. Es können sich bis zu zwei Elektronen (Pauli-Prinzip) darin aufhalten.

Aufgabe

Die Wellenfunktion ψ_{1s} gilt für r vom Atomkern aus in alle Raumrichtungen.

Begründen Sie anhand des Kurvenverlaufs von $|\psi_{1s}|^2$, dass das 1s-Orbital kugelförmig ist.

→ Aufenthaltswahrscheinlichkeit nimmt in allen Raumrichtungen gleichmäßig mit zunehmendem Abstand vom Atomkern aus ab → „90%-Grenze“ auf Kugeloberfläche.



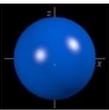
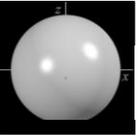
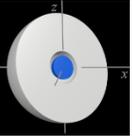
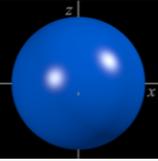
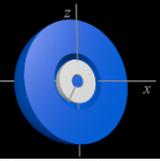
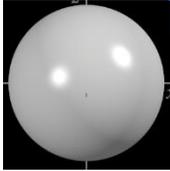
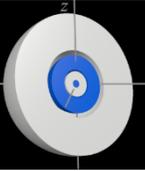
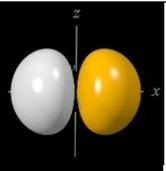
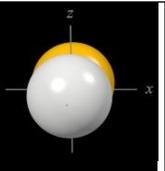
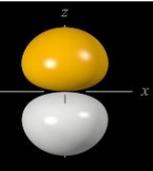
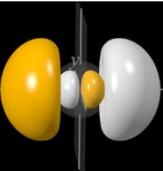
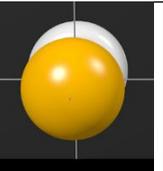
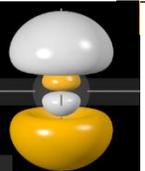
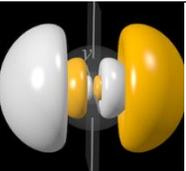
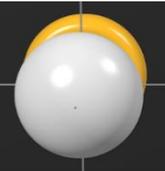
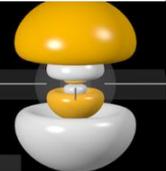
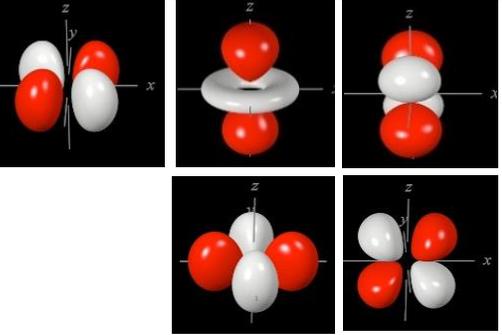
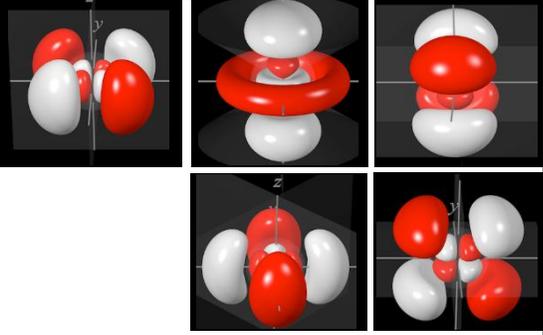
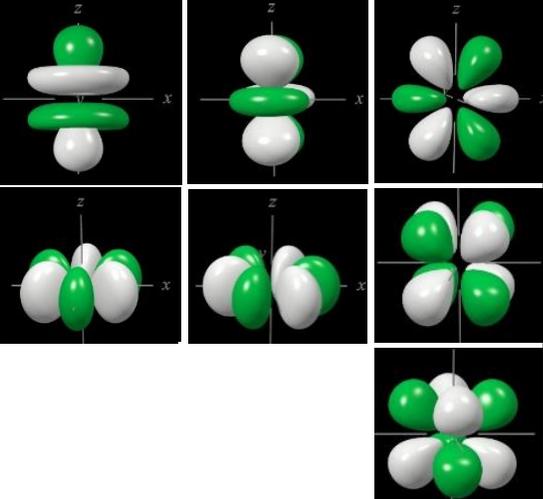
Abbildung: ISB über: Winter, M. (n.d.). The Orbitron: a gallery of atomic orbitals on the WWW, <https://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/index.html>, aufgerufen am 01.05.24

2-Dimensionale Stehende Wellen: CHLADNISCHE-Klangfiguren



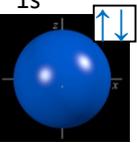
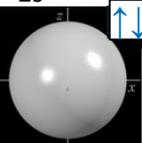
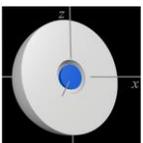
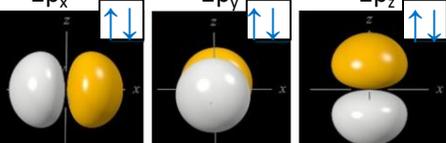
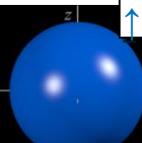
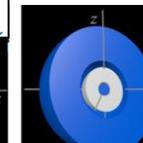
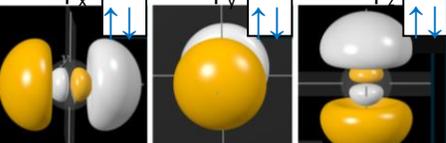
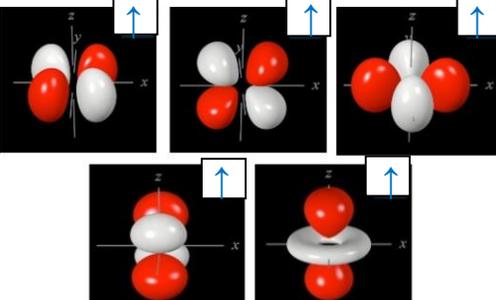
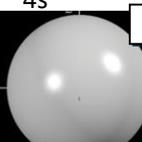
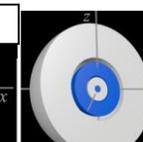
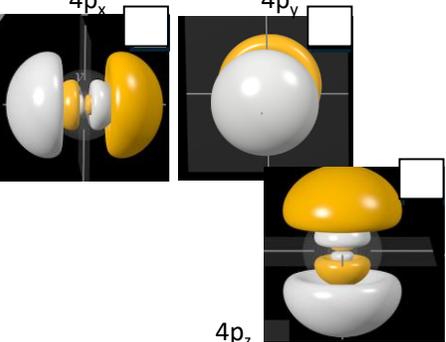
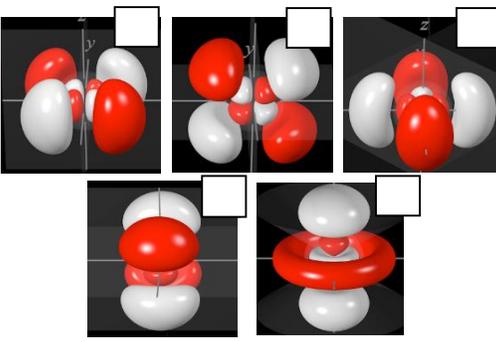
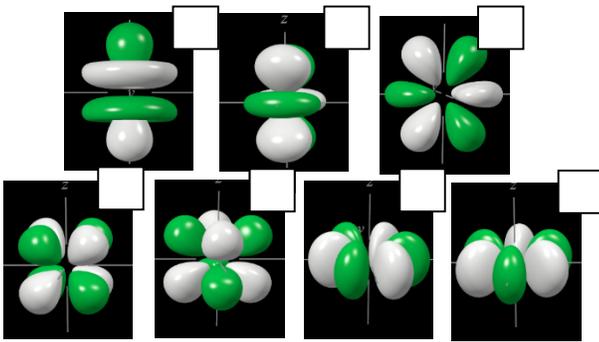
Foto von N. Huber

Wellennatur von Elektronen

	m_l	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$
s-Orbital $(l=0)$ kugelförmig	0	 1s	  2s Querschnitt	  3s Querschnitt	  4s Querschnitt
p-Orbitale $(l=1)$ keulenförmig	-1 0 +1		   2p _x 2p _y 2p _z	   3p _x 3p _y 3p _z	   4p _x 4p _y 4p _z
d-Orbitale $(l=2)$ gekreuzte Doppelhanteln	-2 -1 0 +1 +2		<p><u>Arbeitsauftrag</u></p> <ol style="list-style-type: none"> Ergänzen Sie in Spalte 2 alle jeweils gültigen Magnetquantenzahlen m_l (mit $m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, +l$). Finden Sie in Spalte 1 für die Formen der s, p, d und f-Orbitale jeweils ein treffendes Adjektiv. Beschreiben Sie, wie sich die einzelnen Orbitale mit zunehmender Hauptquantenzahl n verändern. 		
f-Orbitale $(l=3)$ rosettenförmig	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3		<p>3. Mit steigender Hauptquantenzahl nimmt die Größe der Orbitale und die Anzahl ihrer Knoten („Nullstellen“) zu. [„n-1“ entspricht jeweils der Anzahl an Knoten.] Die prinzipielle Form ändert sich nicht.</p>		

Arbeiten mit Orbitalen mithilfe verschiedener Aufgaben: z.B.

Erstellen Sie mithilfe des Merkschemas die Elektronenkonfiguration für das Fe^{3+} -Kation, indem Sie die Elektronen auf die Kästchen bei den entsprechenden Orbitalen nach der Kästchenschreibweise verteilen. Geben Sie begründet an, ob das Fe^{2+} -Kation oder das Fe^{3+} -Kation stabiler ist. (Tipp: Zur Bildung von Metall-Ionen leert sich zunächst das s-Orbital der höchsten Energiestufe.)

	s-Orbitale (l=0)	p-Orbitale (l=1)	d-Orbitale (l=2)	f-Orbitale (l=3)																												
	$m_l = 0$	$m_l = -1; m_l = 0; m_l = +1$	$m_l = -2; m_l = -1; m_l = 0; m_l = +1; m_l = +2$	$m_l = -3; m_l = -2; m_l = -1; m_l = 0; m_l = +1; m_l = +2; m_l = +3$																												
n = 1	1s 			<table border="1"> <tr><td>7s</td><td>7p</td><td>7d</td><td>7f</td></tr> <tr><td>6s</td><td>6p</td><td>6d</td><td>6f</td></tr> <tr><td>5s</td><td>5p</td><td>5d</td><td>5f</td></tr> <tr><td>4s</td><td>4p</td><td>4d</td><td>4f</td></tr> <tr><td>3s</td><td>3p</td><td>3d</td><td></td></tr> <tr><td>2s</td><td>2p</td><td></td><td></td></tr> <tr><td>1s</td><td></td><td></td><td></td></tr> </table>	7s	7p	7d	7f	6s	6p	6d	6f	5s	5p	5d	5f	4s	4p	4d	4f	3s	3p	3d		2s	2p			1s			
7s	7p	7d	7f																													
6s	6p	6d	6f																													
5s	5p	5d	5f																													
4s	4p	4d	4f																													
3s	3p	3d																														
2s	2p																															
1s																																
n = 2	2s  Querschnitt 	2p _x 2p _y 2p _z 																														
n = 3	3  Querschnitt 	3p _x 3p _y 3p _z 																														
n = 4	4s  Querschnitt 	4p _x 4p _y 4p _z 																														

Abbildungen: ISB über Winter, M. (n.d.). The Orbitron: a gallery of atomic orbitals on the WWW, <https://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/index.html>, aufgerufen am 01.05.24

Lernkontrolle mit Learning Apps

[LearningApps.org](https://learningapps.org) - interaktive und multimediale Lernbausteine



Atomorbitale -
Lückentext zur
Doppelnatur der
Elektronen



Meilensteine auf dem
Weg zur Orbitaltheorie
- Wissenschaftler und
ihre Aussagen

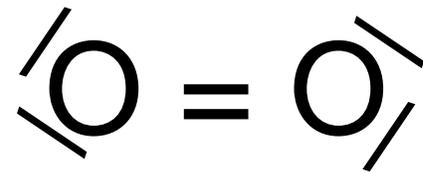
CC 4.0 BY SA *Habelitz Tkotz*

Sequenzplanung

6	Linearkombination von Atomorbitalen (LCAO), Orbitalerhalt, Molekülorbitale, Elektronenpaarbindung, Wiederholung Energieniveauschema	mathematische Modellierung der Molekülorbitale (bindend, antibindend) des Wasserstoffmoleküls, Energieniveauschema des Wasserstoffmoleküls (Wiederholung)
7 8	σ -Molekülorbitale, π -Molekülorbitale, Energieniveauschemata einfacher Moleküle	end-on- und side-on-Überlagerung von Atomorbitalen, Energieniveauschemata von H_2 , F_2 , N_2 , O_2
9	Molecular Modeling: Energieniveauschemata einfacher organischer Moleküle	Methan, Ethan, Ethen, Ethin
10 11	Hybridisierung, Vorhersage der Bindungsverhältnisse in einfachen organischen Molekülen	sp^3 , sp^2 , sp -Hybridorbitale: Methan, Ethan, Ethen, Ethin
12	Vergleich LCAO und Hybridisierung	Vor- und Nachteile
13 14	Abweichende Bindungslängen und Molekülgeometrien, Mesomerie	isolierte, kumulierte und konjugierte Doppelbindungen

Wofür brauchen wir die MO-Theorie?

Einstiegsproblem: Paramagnetismus bei Sauerstoff



Experimentiervorschlag:

Paramagnetismus von Sauerstoff vs. Diamagnetismus von Stickstoff

- Sauerstoffmolekül im Grundzustand als Diradikal
- **ungepaarte Elektronen** führen zu paramagnetischem Verhalten
- nicht mit anderen Modellen der chemischen Bindung erklärbar → MO-Theorie!

Ausblick:

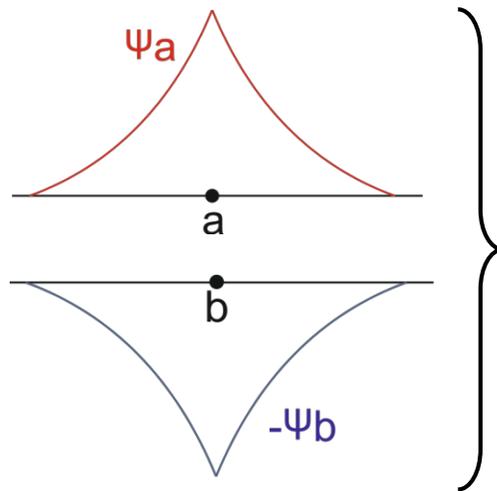
Vergleich der Energieniveauschemata von Sauerstoff- und Stickstoffmolekül



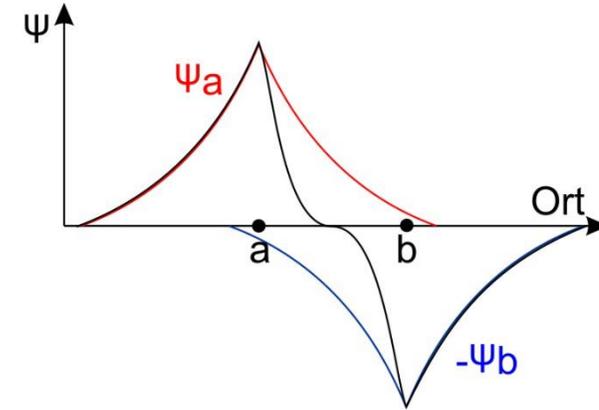
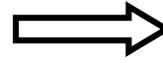
Foto von S. Reitzenstein

Was wissen wir schon / noch über das
Zustandekommen von
Elektronenpaarbindungen?

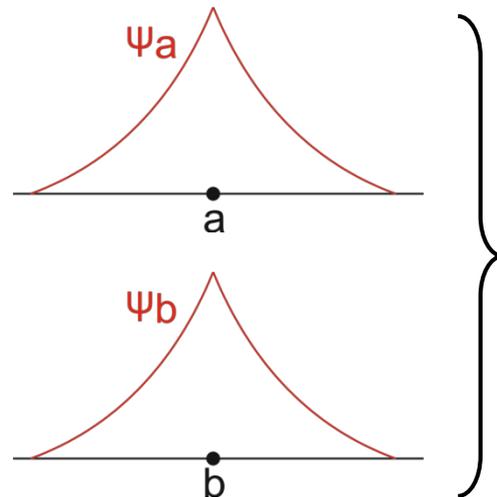
Molekülorbitale durch Überlagerung von Wellen



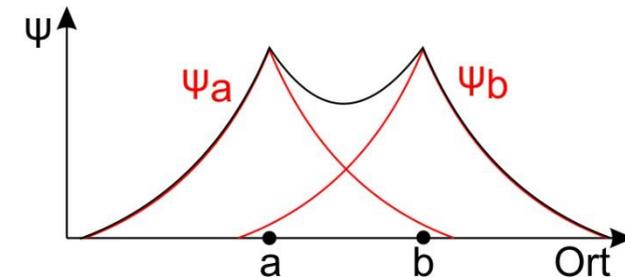
Außer-Phase-
Überlagerung



Destabilisierung
keine Bindung



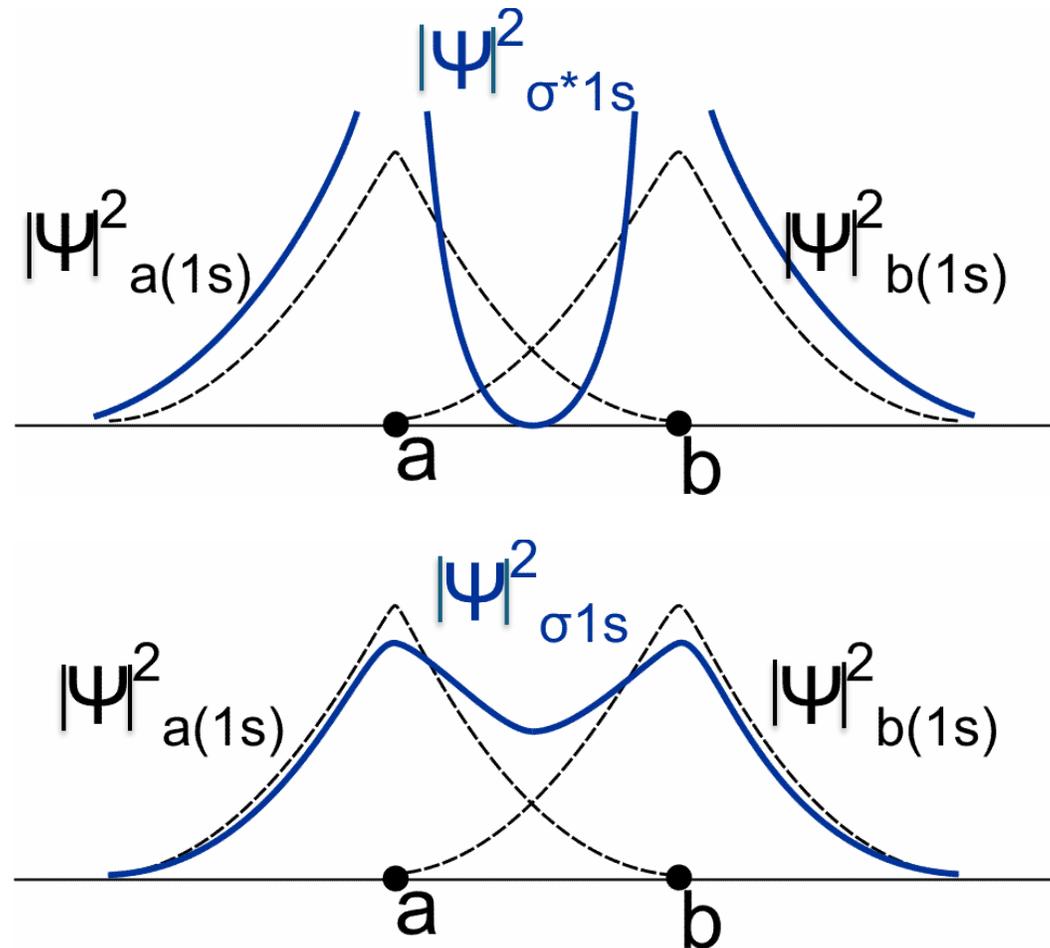
In-Phase-
Überlagerung



Verstärkung
Bindung

Molekülorbitale durch Überlagerung von Wellen

Wahrscheinlichkeitsdichte ist proportional zu $|\Psi|^2$



Übertragung auf die LCAO-Theorie

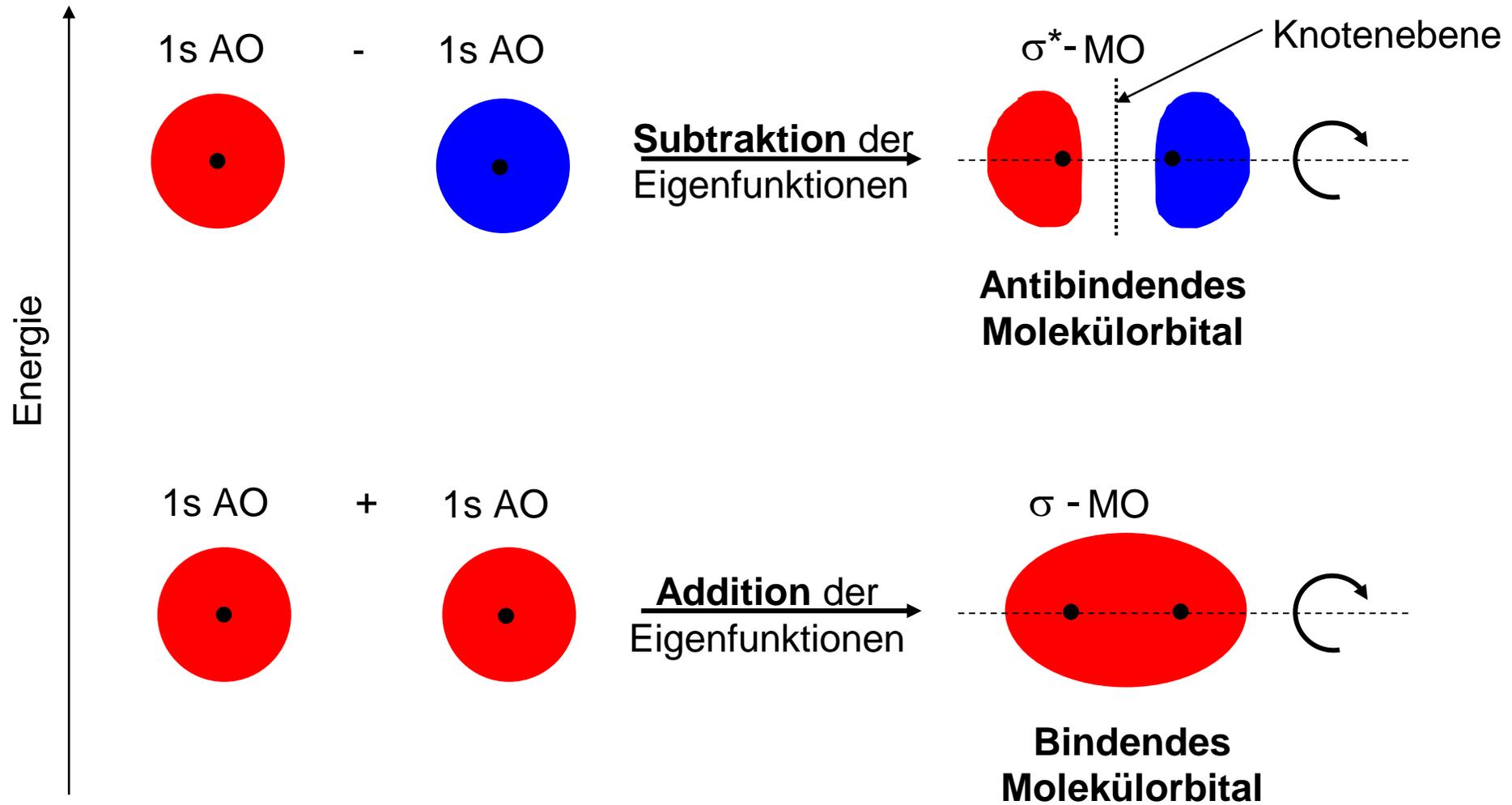
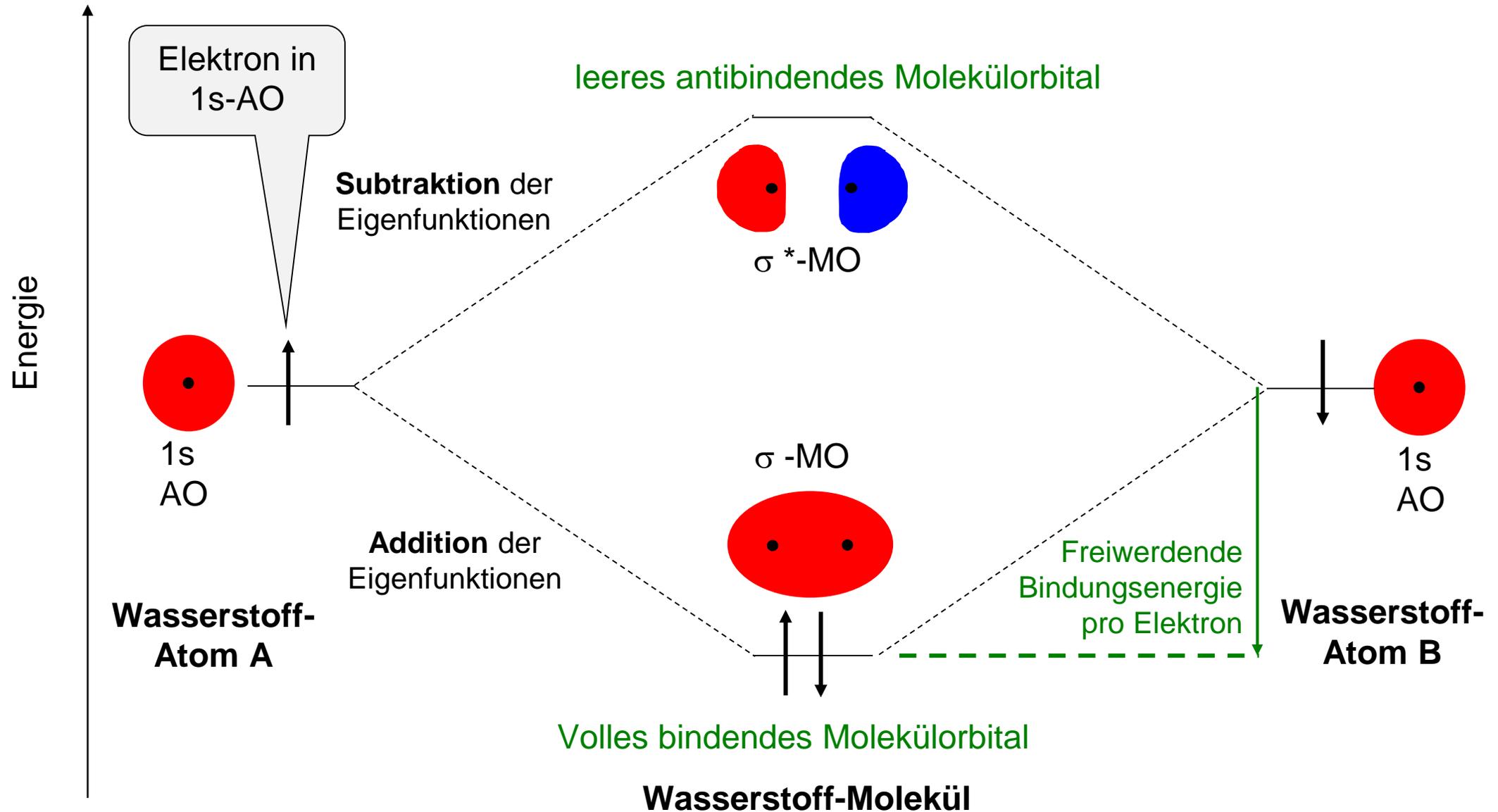


Abbildung von N. Huber

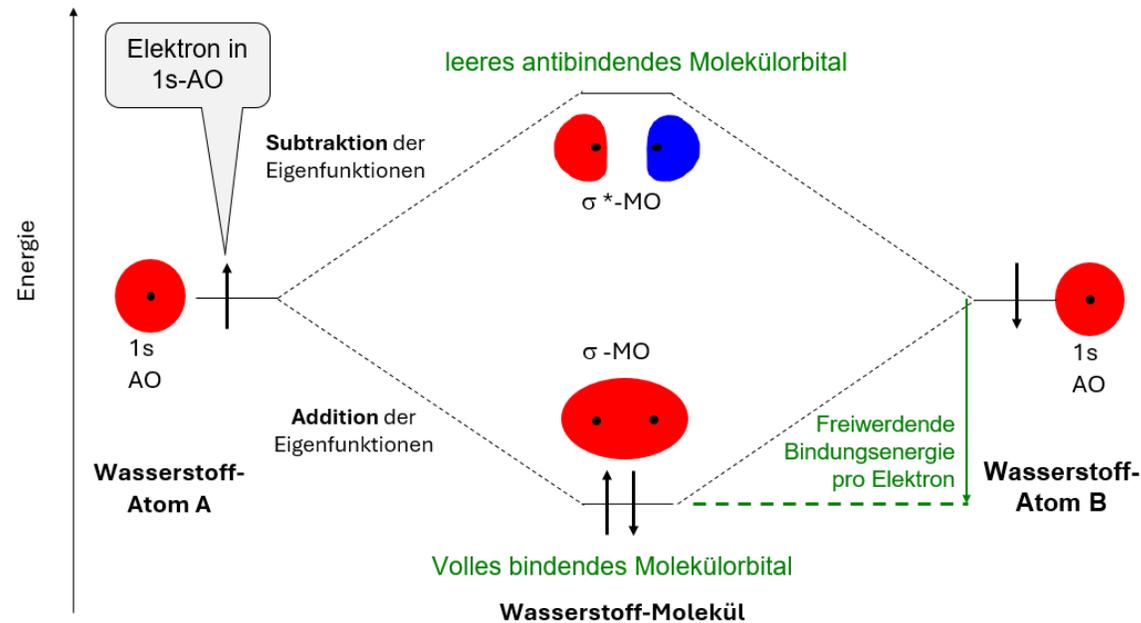
Merke:

σ -Molekülorbitale sind **rotationssymmetrisch** um Kern-Kern-Verbindungsachse.

Orbitale im Wasserstoff-Molekül und Bindungsenergie



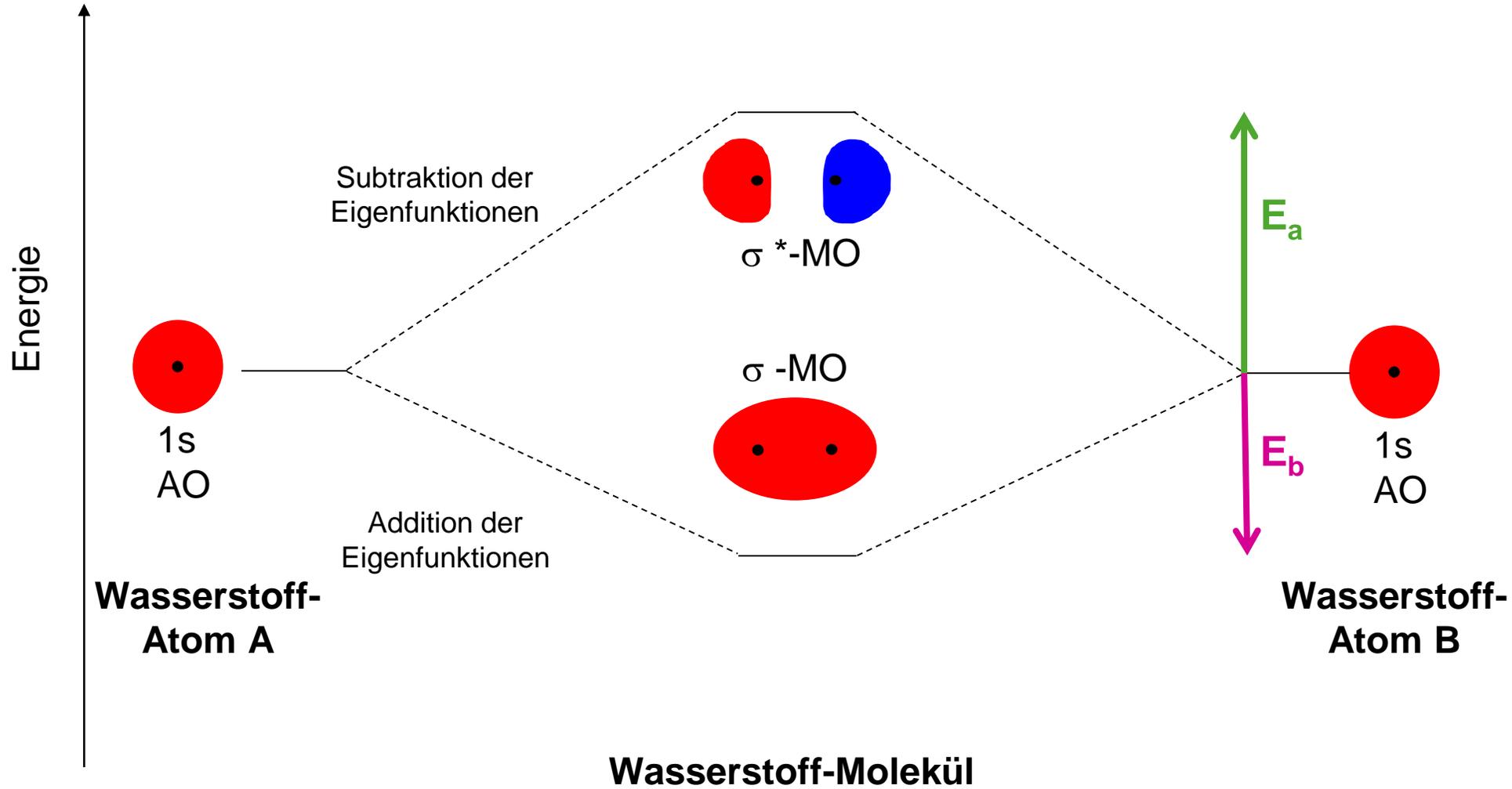
Orbitale im Wasserstoff-Molekül und Bindungsenergie



Es gilt:

- Es entstehen immer genauso viele MOs, wie es ursprünglich AO's gab
- Bindende MOs liegen energetisch tiefer als die AOs
- antibindende MOs liegen energetisch höher als AOs
- Besetzung nach Aufbau-Prinzip + Pauli-Prinzip

Didaktische Reduktion



Tatsächlich gilt:
 $E_a > E_b$

Exkurs: Berechnung der BO

$$\text{BO} = \frac{n_{\text{bindend}} - n_{\text{antibindend}}}{2}$$

- Maß für Anzahl der effektiven Bindungen
- Auch nicht ganzzahlige BOs möglich (Bsp.: $\text{H}_2^+ \rightarrow \text{BO} = 0,5$)
- Es gilt:
 - Je höher die BO, ...
 - ... desto größer ist auch die Bindungsenergie.
 - ... desto kürzer ist die Bindung.
 - ... desto stabiler ist das System.

Exkurs: Berechnung der BO

$$BO = \frac{n_{\text{bindend}} - n_{\text{antibindend}}}{2}$$

$$BO = \frac{2 - 0}{2} = 1$$

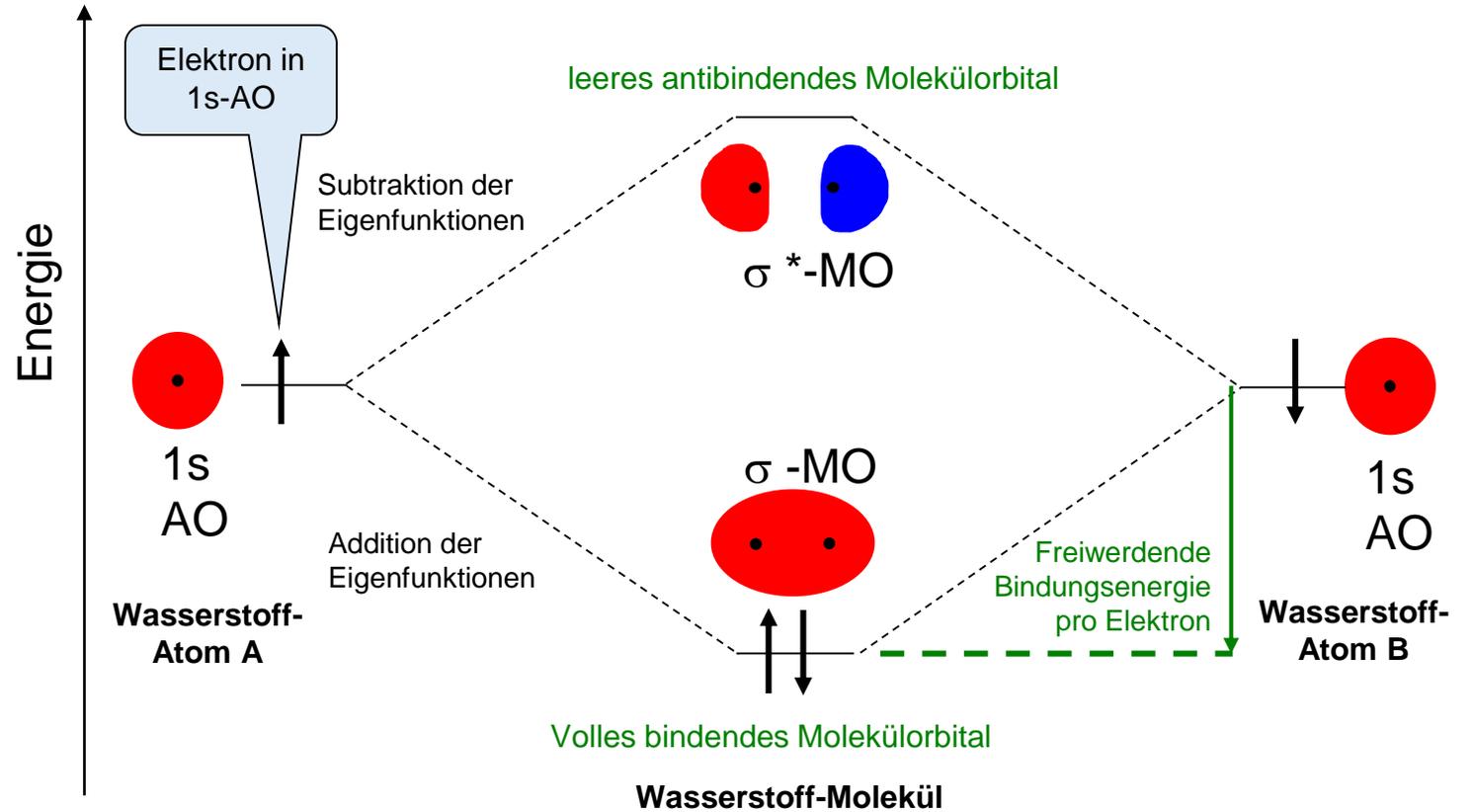
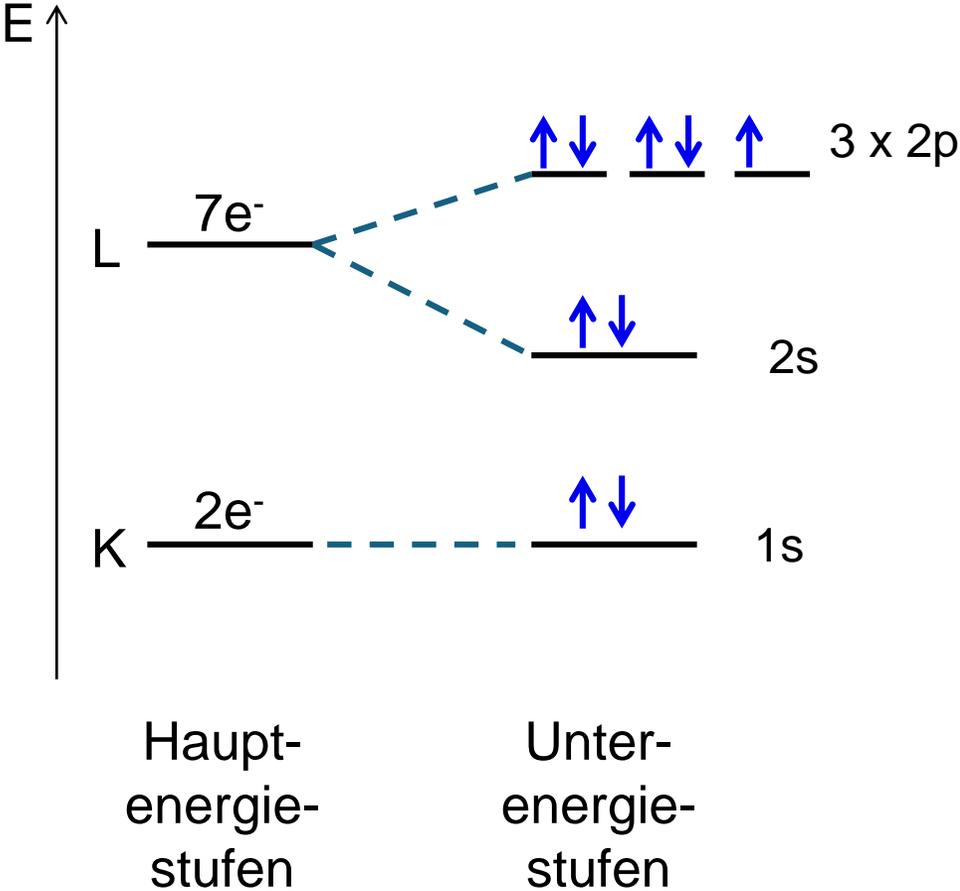


Abbildung von N. Huber

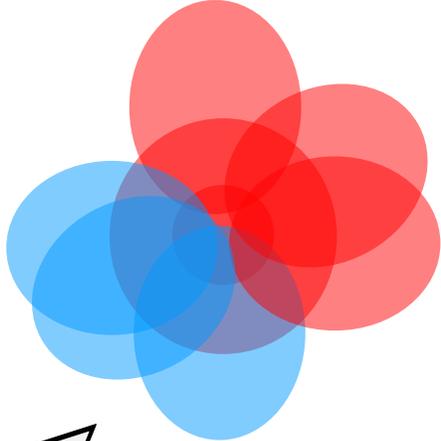
Bindungsverhältnisse in zweiatomigen homonuklearen Molekülen der 2. Periode

Beschreibung mit Hilfe der MO-Theorie

Elektronenkonfiguration im Fluor-Atom: $1s^2 2s^2$
 $2p^5$

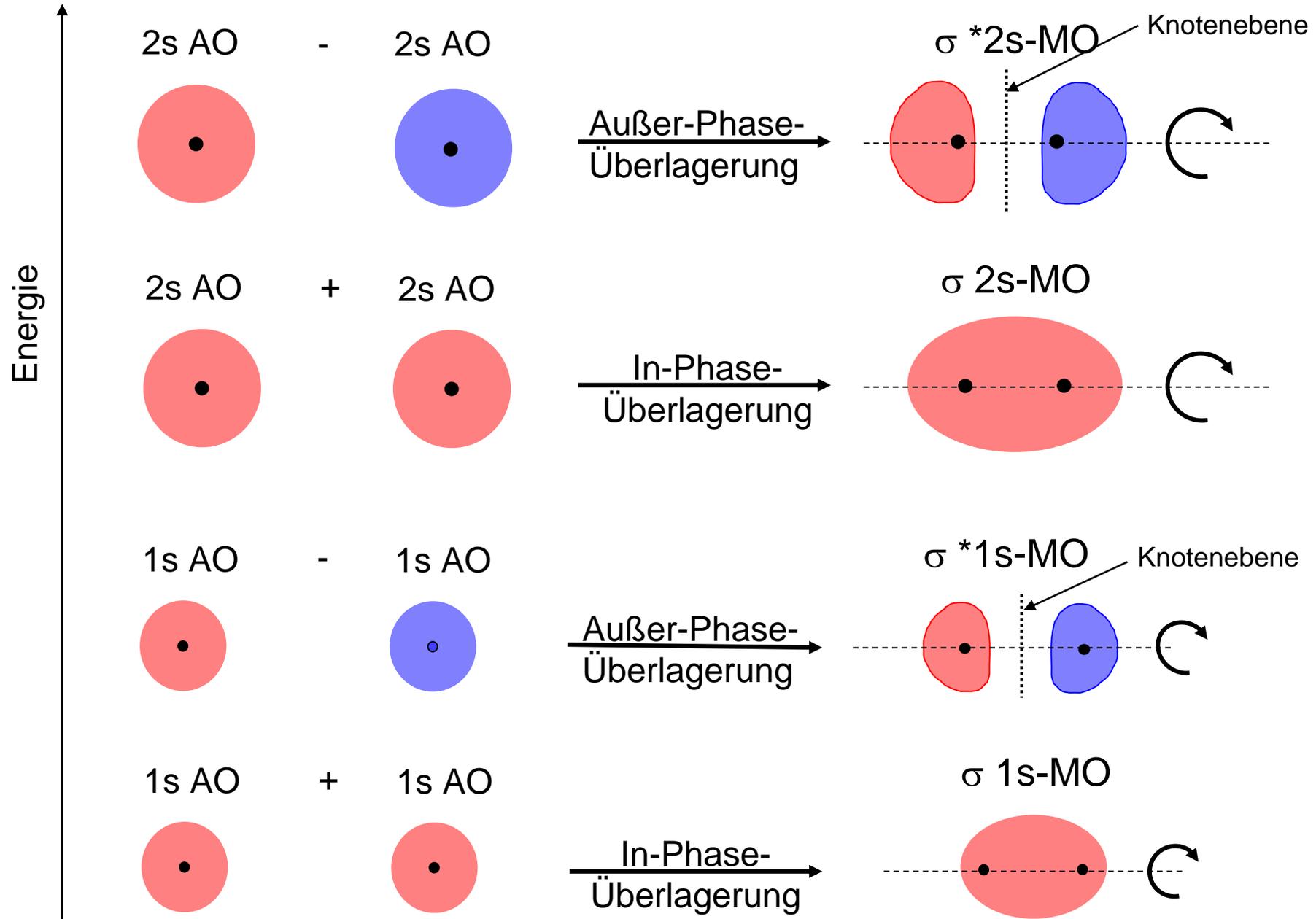


Atomorbitale im F-Atom



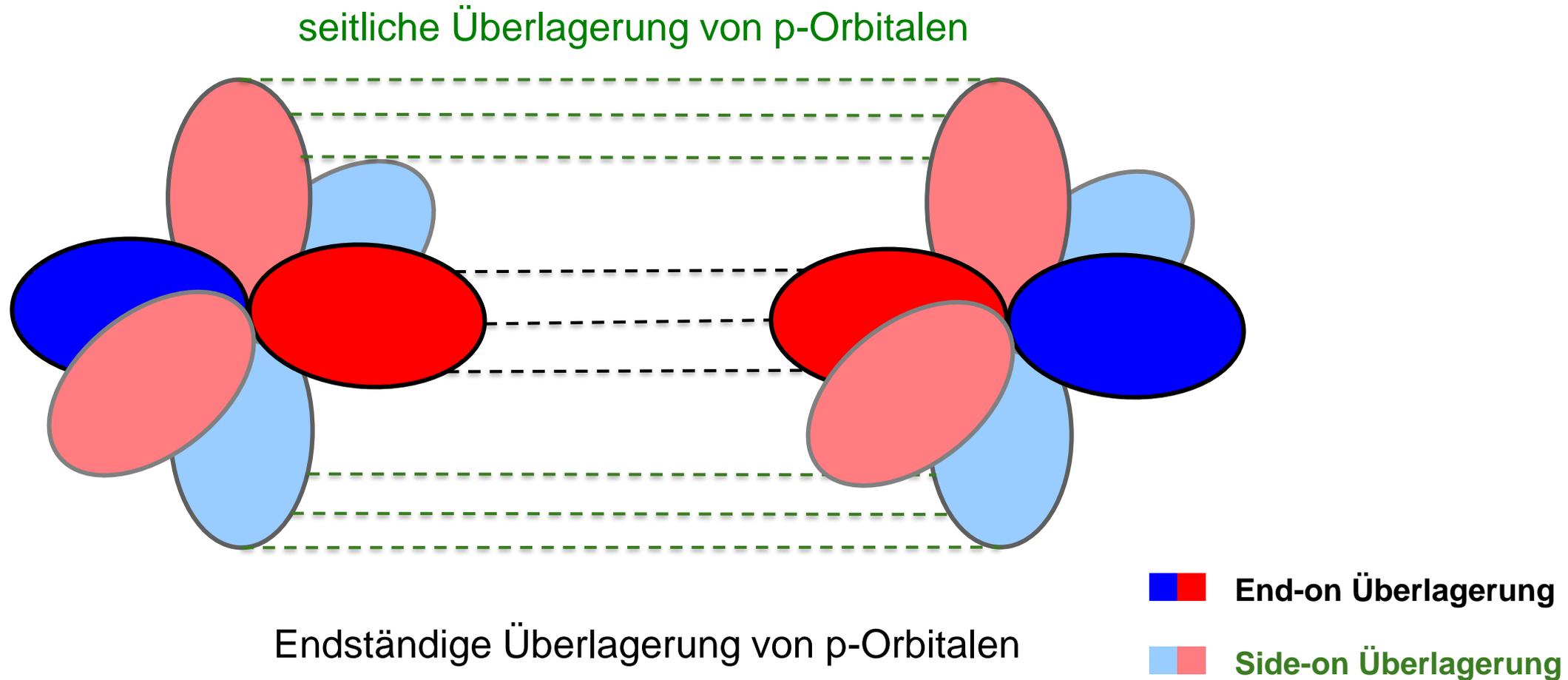
Wie kombinieren sich s- und p-Orbitale?

Überlagerung von 1s und 2s-Orbitalen

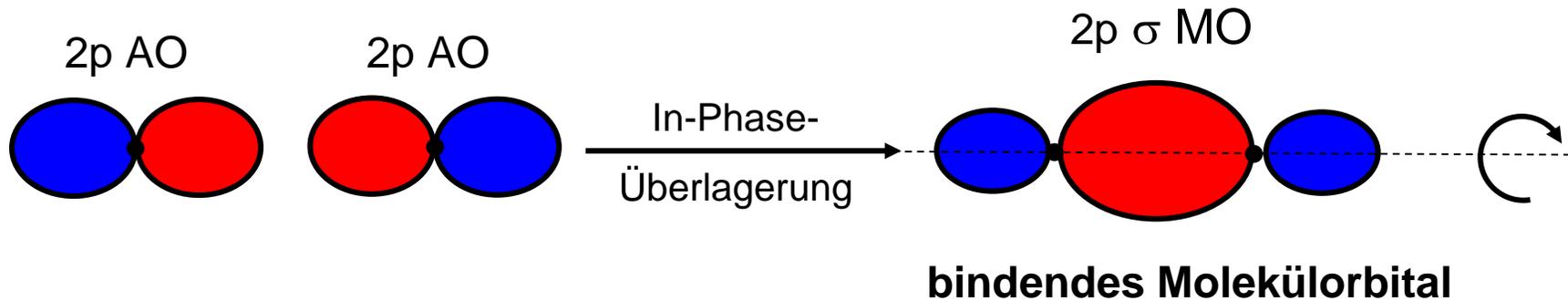
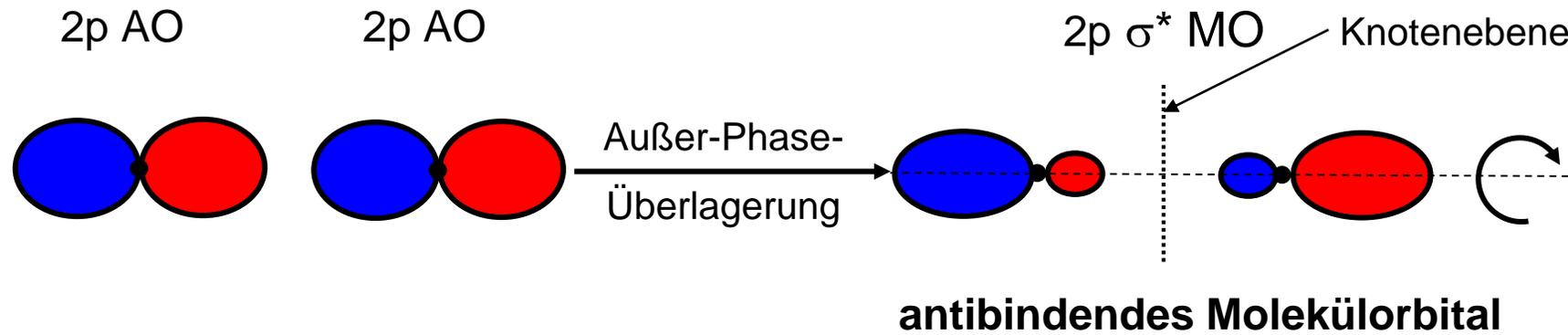


Welche Möglichkeiten der
Überlagerung gibt es bei
p-Orbitalen?

Zwei Möglichkeiten zur Überlagerung von p-Atomorbitalen



Endständige Überlagerung von p-Atomorbitalen

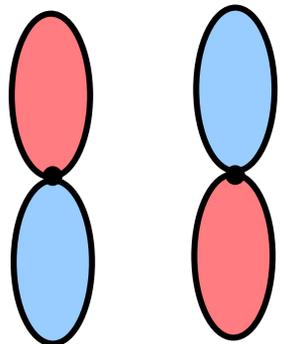


Abbildungen von N. Huber

Endständige Überlagerung von p-Orbitalen führt zu σ -Molekülorbitalen, da rotationssymmetrisch.

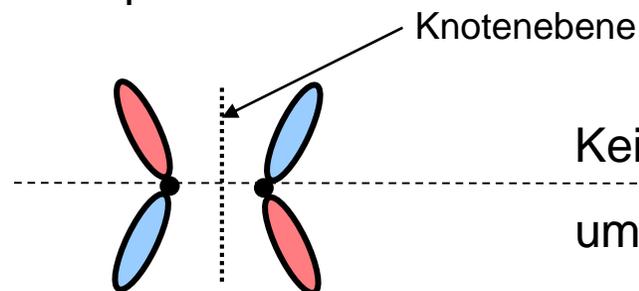
Seitliche Überlagerung von p-Atomorbitalen

2p AO 2p AO



Außer-Phase-
Überlagerung

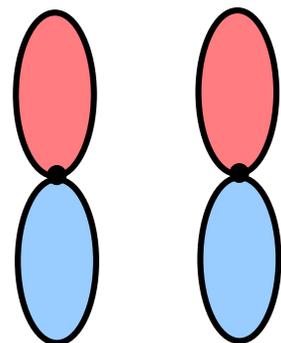
2p π^* MO



Keine Rotationssymmetrie
um Kern-Kern-
Verbindungsachse

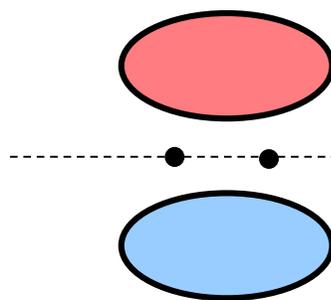
antibindendes π -Molekülorbital

2p AO 2p AO



In-Phase-
Überlagerung

2p π MO



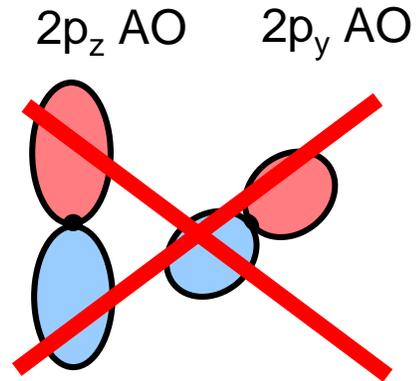
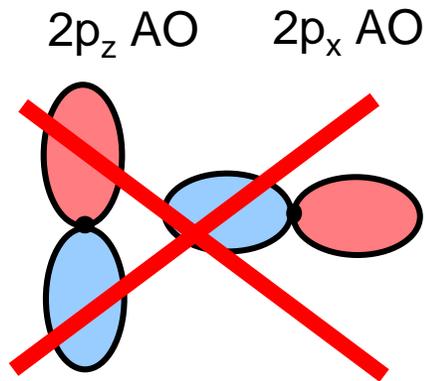
Keine Rotationssymmetrie um
Kern-Kern-Verbindungsachse

bindendes π -Molekülorbital

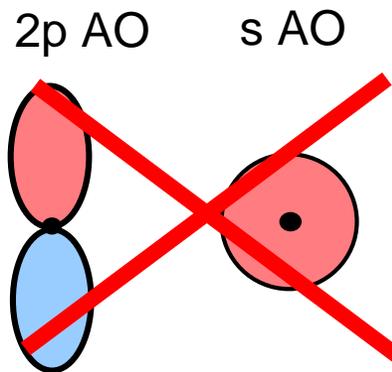
Abbildungen von N. Huber

Nicht rotationssymmetrische Molekülorbitale, bei denen Bereiche erhöhter Elektronendichte oberhalb und unterhalb der Kern-Kern-Verbindungsachse liegen werden π -Orbitale / -Bindungen genannt.

Weitere denkbare Überlagerungen von AOs

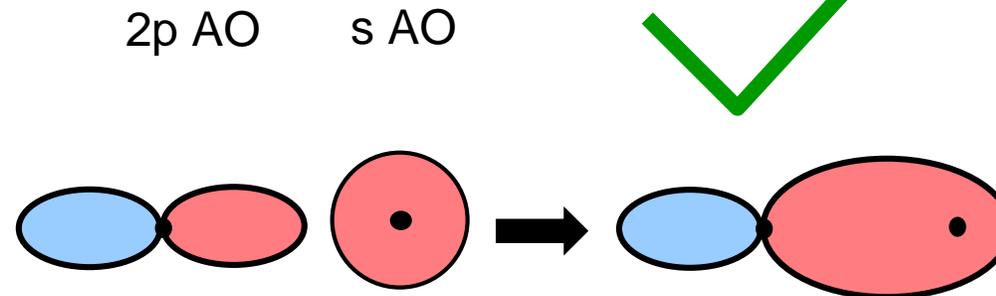


Zwischen aufeinander senkrecht stehenden p-AOs ist keine bindende Überlagerung möglich.



Abbildungen von N. Huber

Seitliche Überlagerung von s- und p-AO führt zu keiner Bindung.



Endständige In-Phase-Überlagerung von s- und p-AO führt zu einem bindenden σ -MO (und einem antibindenden σ -MO).

Überblick: Kombination der s- und p-Orbitale

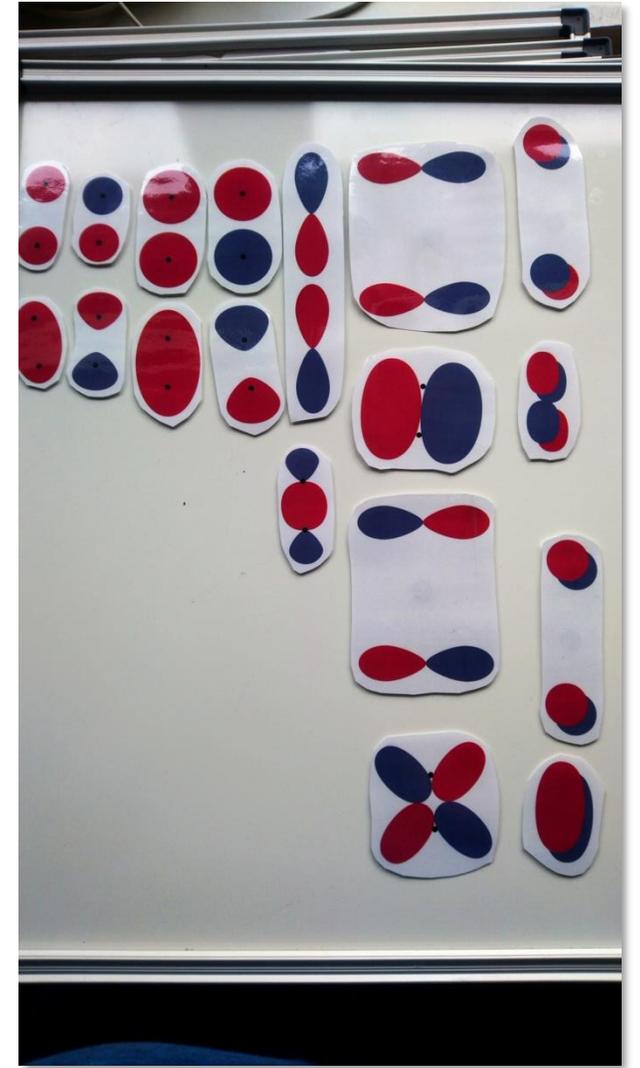
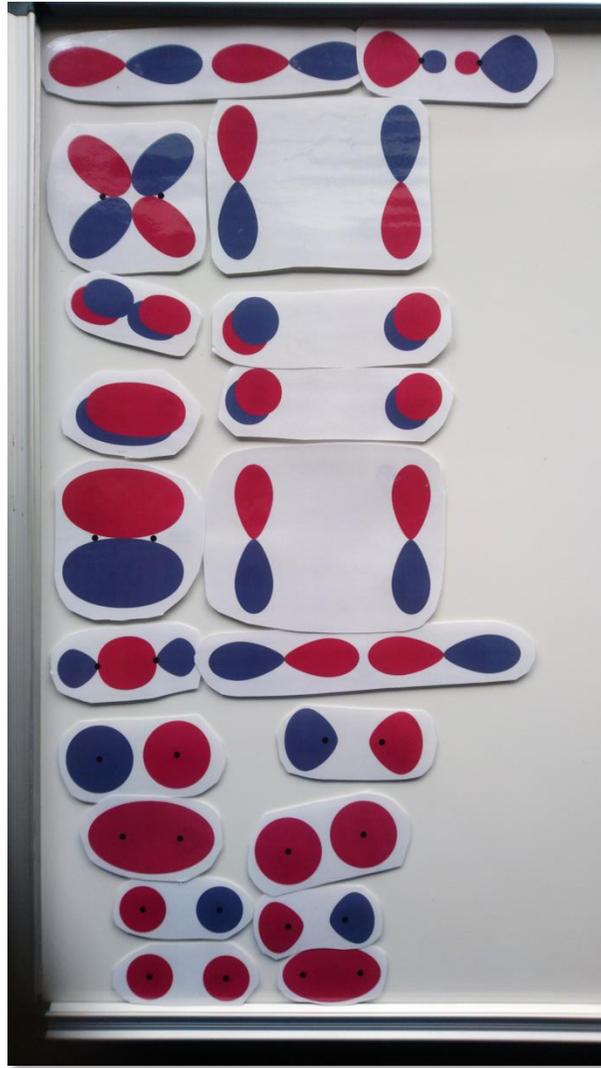
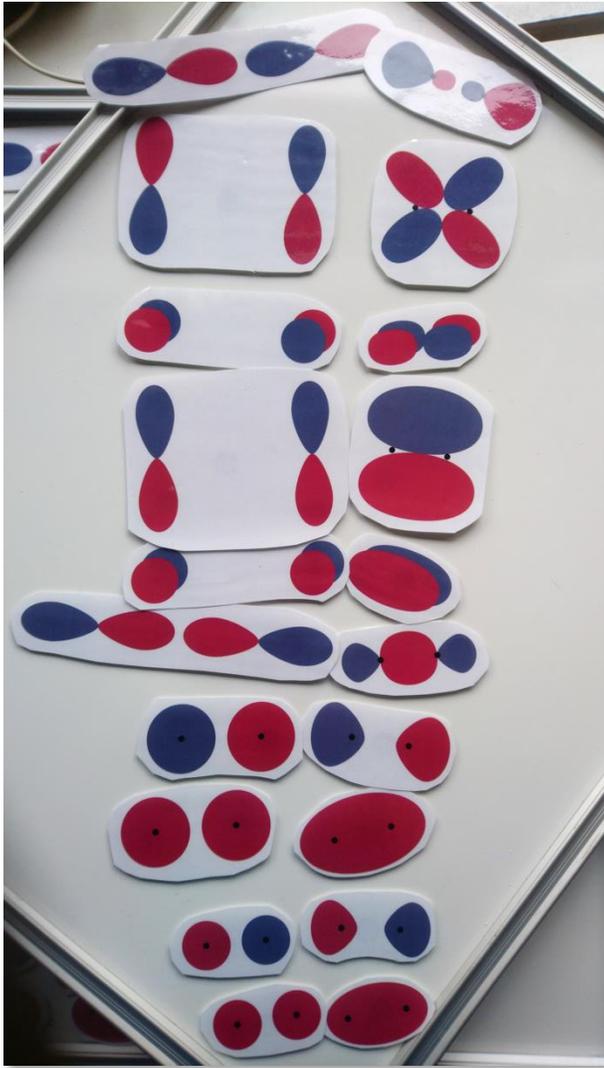
	s	p _x	p _y	p _z
s	σ/σ^*	σ/σ^*	nb	nb
p _x	σ/σ^*	σ/σ^*	nb	nb
p _y	nb	nb	π/π^*	nb
p _z	nb	nb	nb	π/π^*

Abgeändert nach D. Hauck

Voraussetzungen:

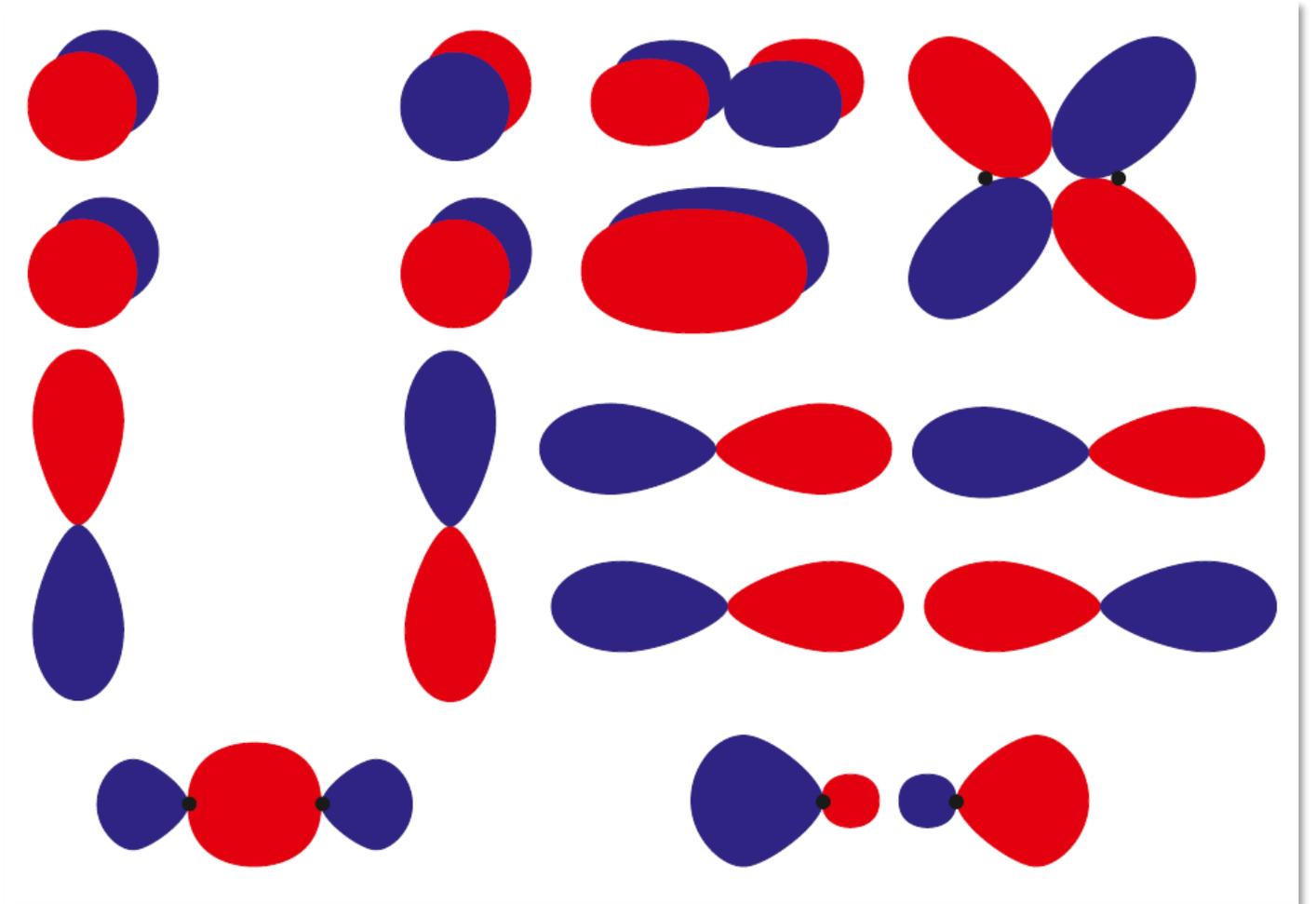
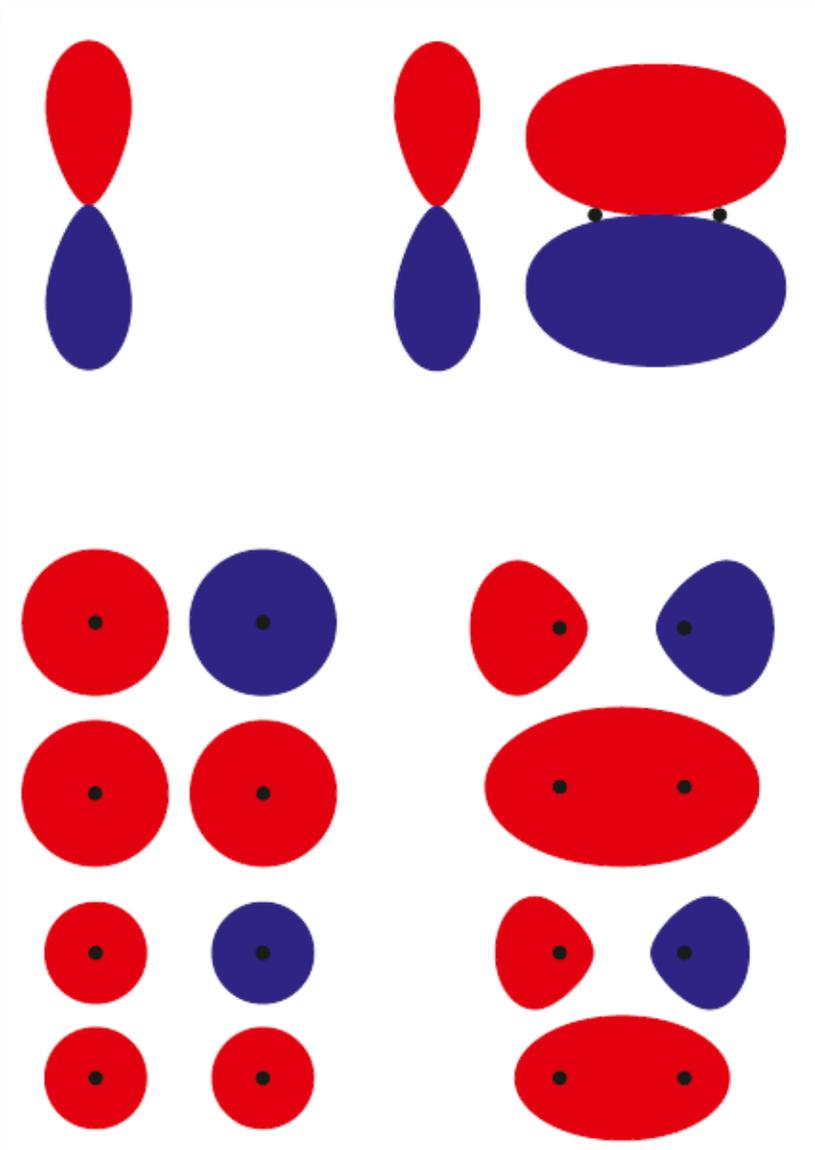
- Vergleichbares Energieniveau
- Passende Symmetrie

Anwendungsbeispiel: Applikationen

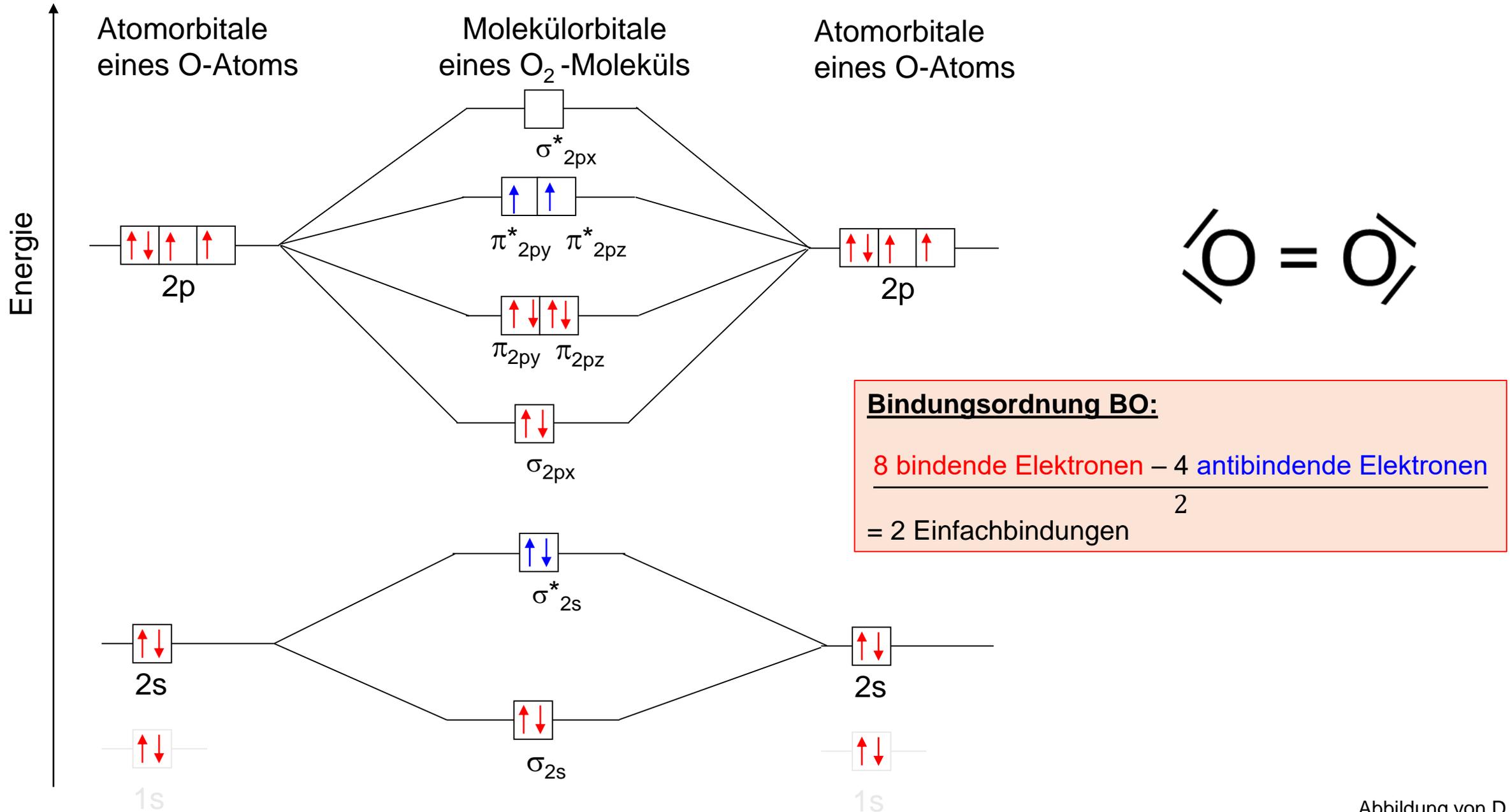


Fotos von N. Huber

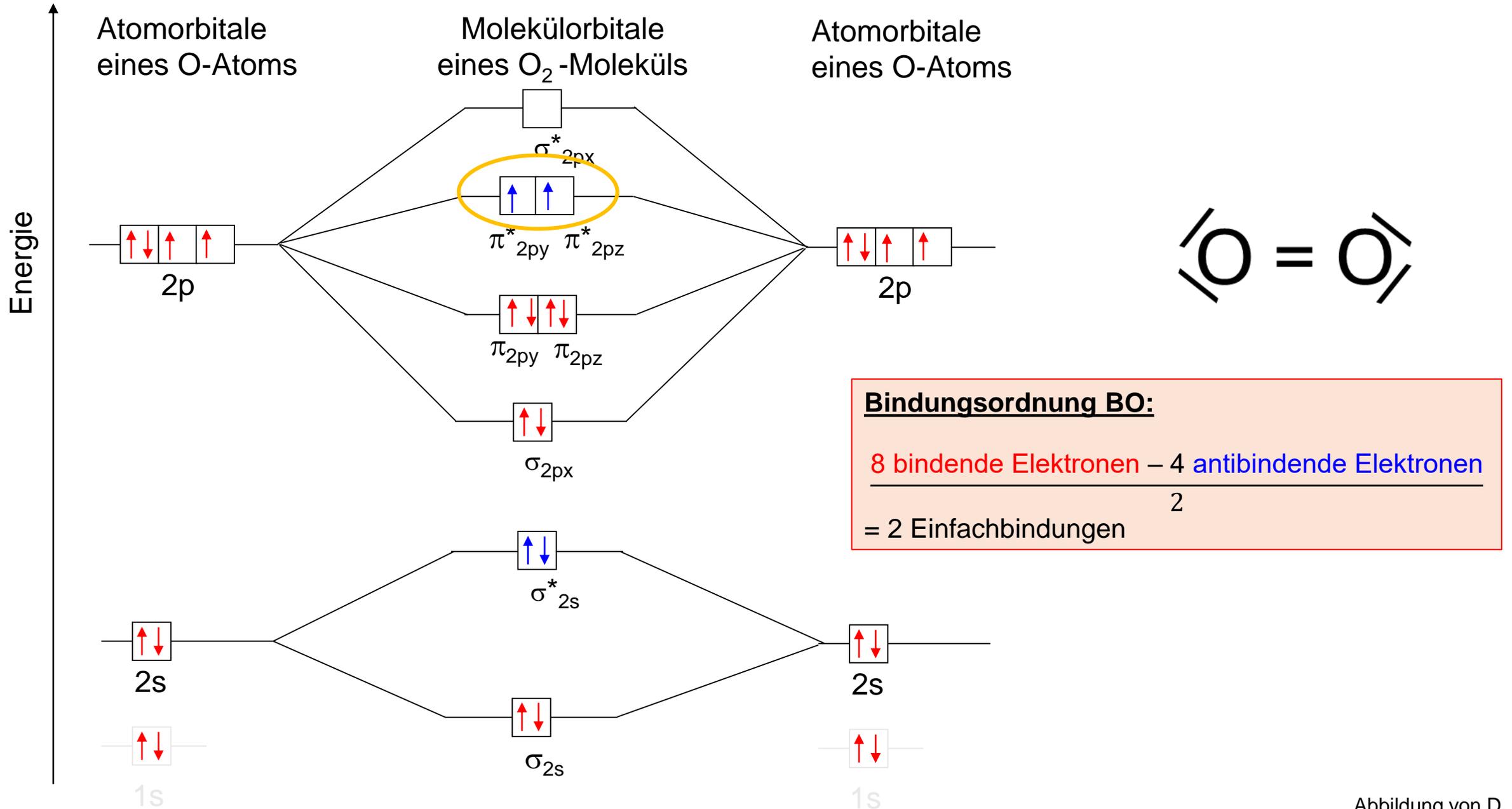
Anwendungsbeispiel: Applikationen



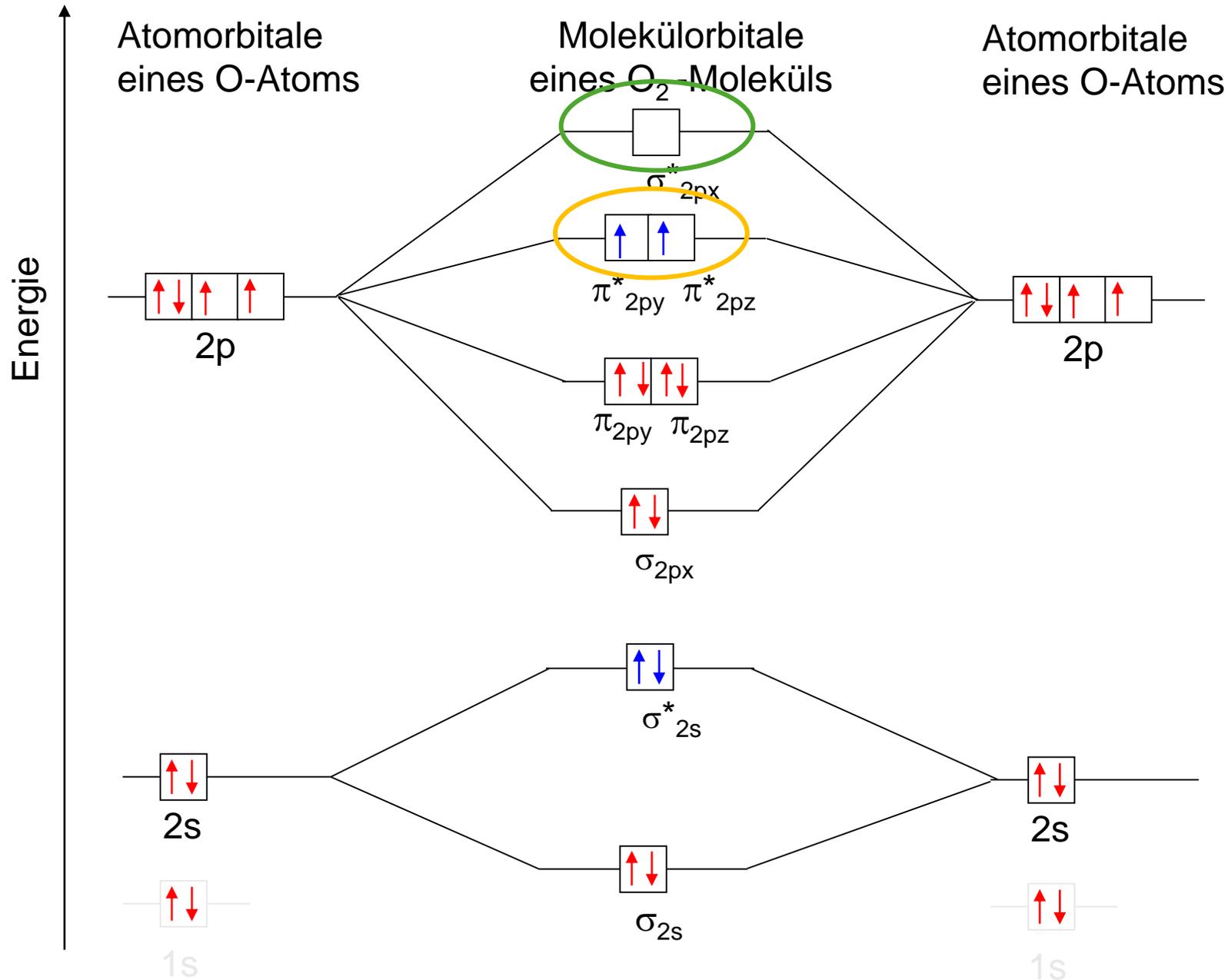
Zurück zum Einstiegsproblem: Paramagnetismus von Sauerstoff



Zurück zum Einstiegsproblem: Paramagnetismus von Sauerstoff



Definition: HOMO und LUMO



LUMO

= lowest unoccupied molecular orbital

→ Niedrigste unbesetzte MO

HOMO

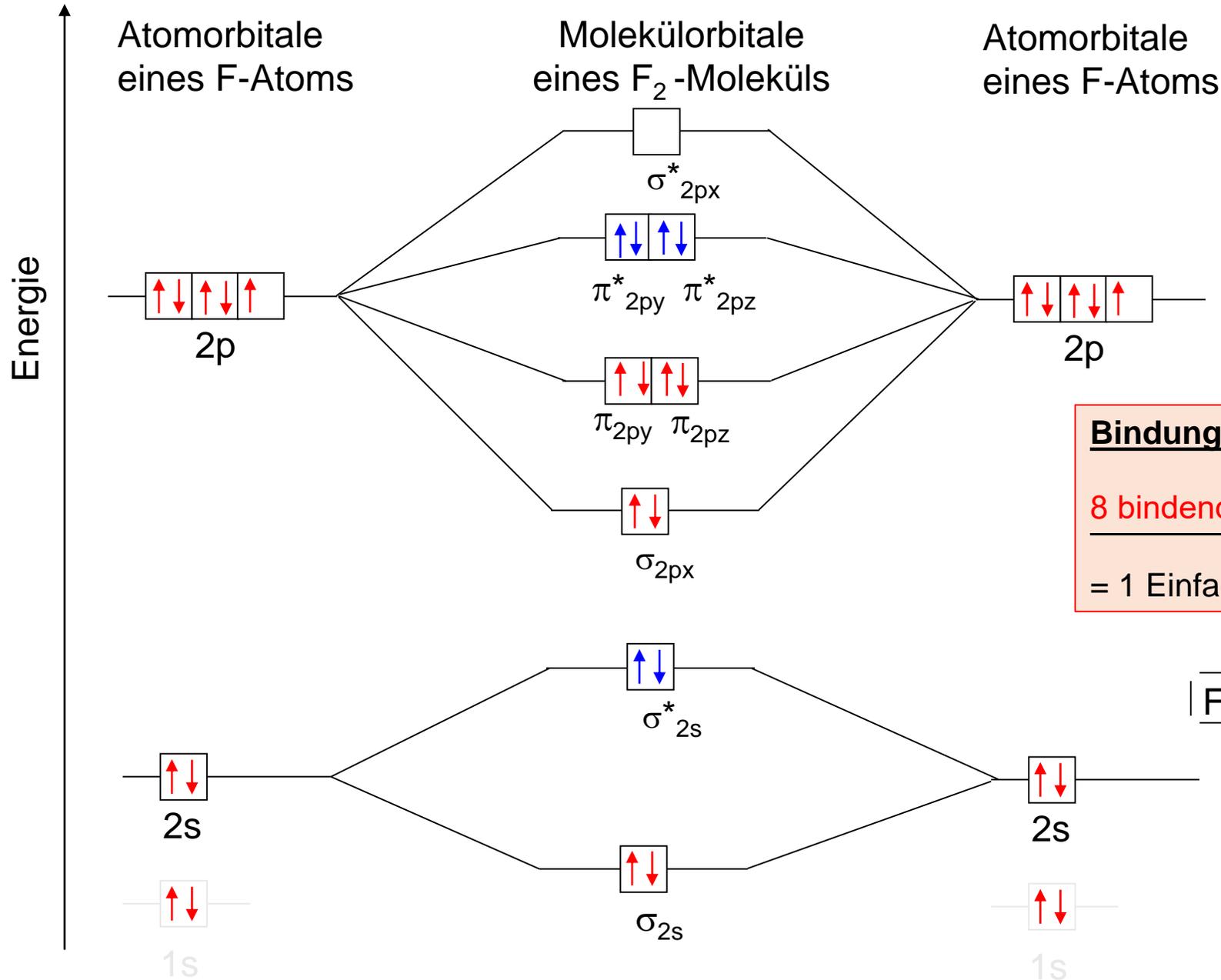
= Highest occupied molecular orbital

→ Höchste besetzte MO

Weitere Beispiele zu MO-Diagrammen von zweiatomigen homonuklearen Verbindungen

Laut Lehrplan: H_2 , F_2 , N_2 , O_2

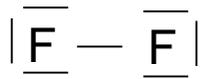
Bindungsverhältnisse und Molekülorbitale im Fluor-Molekül



Möglich Verständnisfragen:
 Magnetisches Verhalten vorhersagen lassen;
 BO berechnen lassen

Bindungsordnung BO:

$$\frac{8 \text{ bindende Elektronen} - 6 \text{ antibindende Elektronen}}{2}$$
 = 1 Einfachbindung



Beispielaufgabe

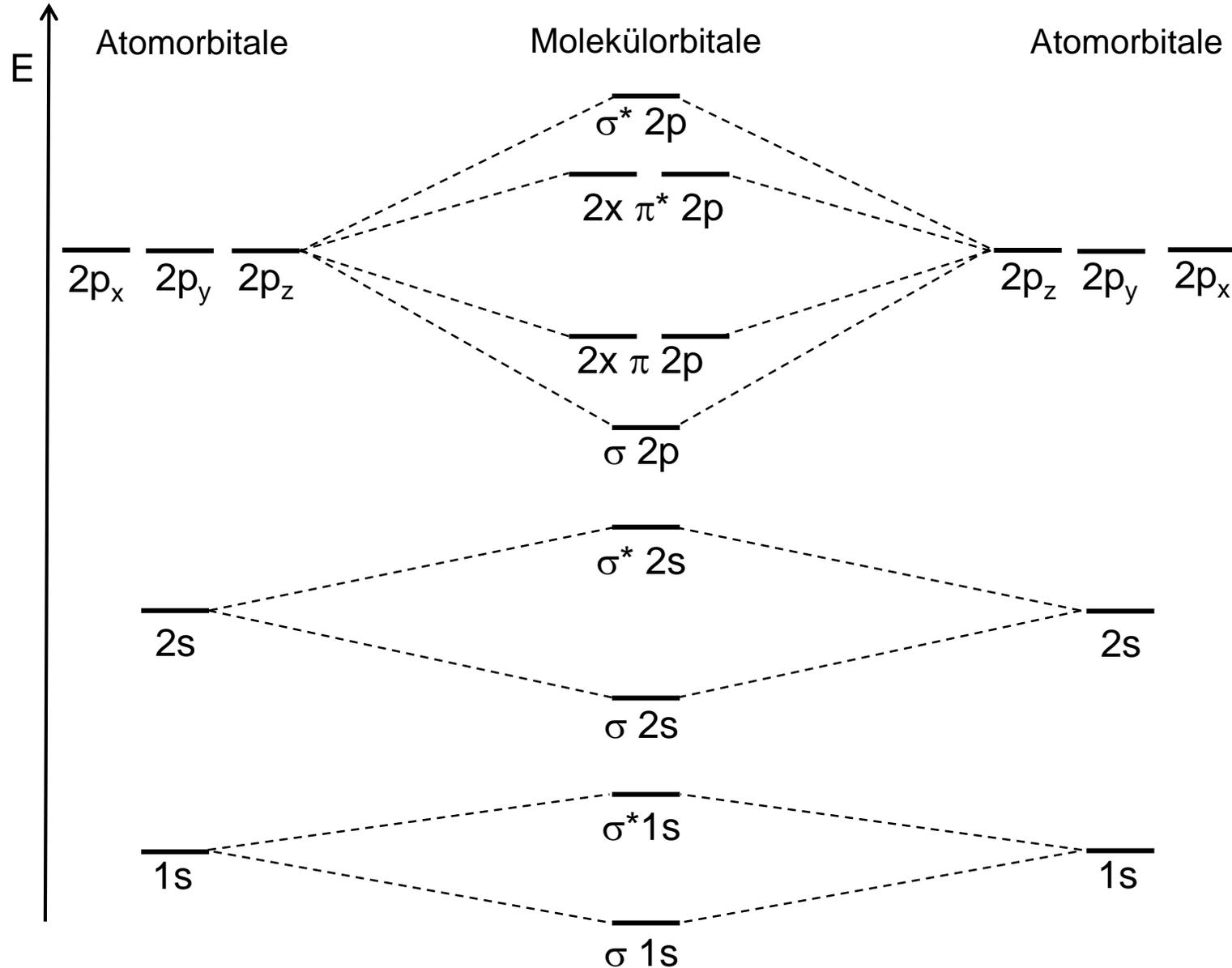


13,8 Milliarden Jahre ist unser Universum alt. Es hat sich explosionsartig nach dem Urknall entwickelt. Kurz darauf bildete sich ein Molekül: das Heliumhydrid-Ion. Soweit die Theorie. Seit 1925 war das erste Molekül im Universum ein Phantomteilchen, das zwar im Labor belegbar war, aber nicht im All gefunden werden konnte. Bis jetzt! Nun ist es nachgewiesen und im Fachmagazin "nature" beschrieben worden.

Quelle: <https://www.br.de/nachrichten/wissen/erstes-molekuel-im-all-chemielabor-universum,ROTqIbQ> (Quelle nicht mehr verfügbar)

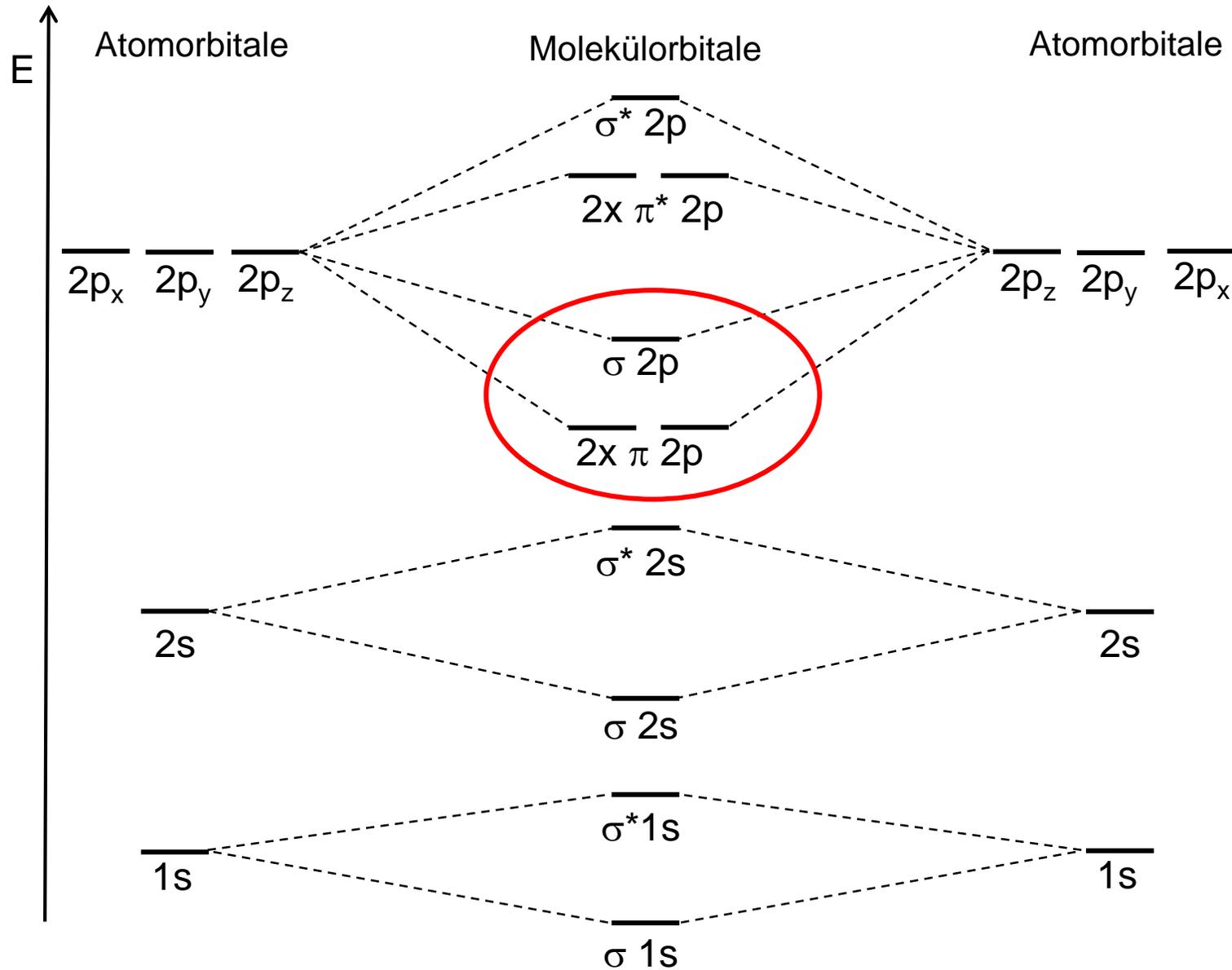
Beurteilen Sie mithilfe der MO-Theorie die **Stabilität** eines **Helium-Moleküls (He_2)** und eines **Heliummolekül-Kations (He_2^+)**, **Heliumhydrid-Kations (HeH^+)**.

Beispielaufgabentyp 1: Ausfüllen von vorgegebenen MO-Schemata



MO-Schemata für folgende Moleküle/Molekül-Ionen:
O₂, F₂, NO, C₂²⁻ (Dicarbid-Anion)

Beispielaufgabentyp 1: Ausfüllen von vorgegebenen MO-Schemata

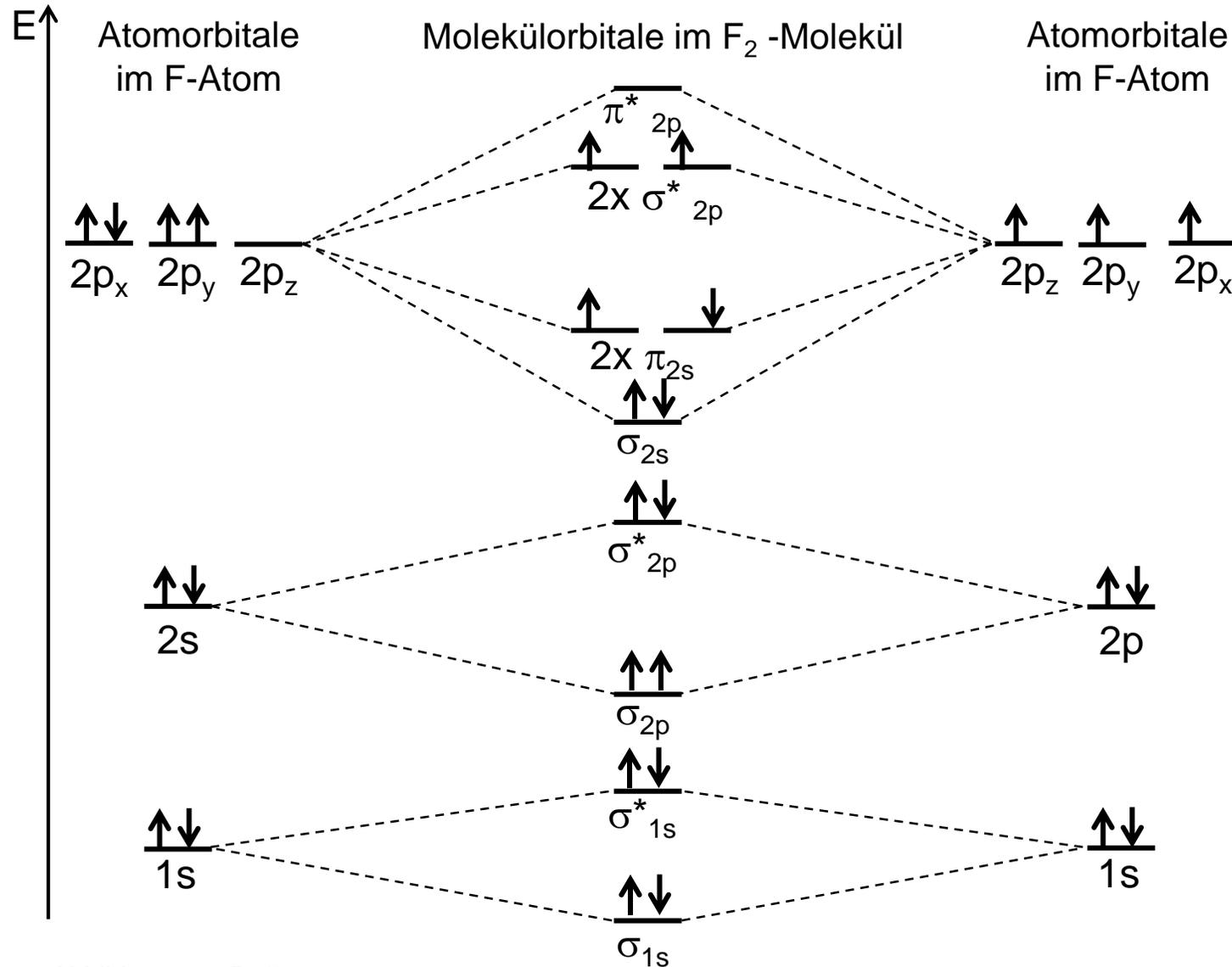


Vergleich mit MO-Diagramm von Sauerstoff + Eingehen auf magnetisches Verhalten!

MO-Schemata für folgende Moleküle/Molekül-Ionen:
 N_2 , CN^-

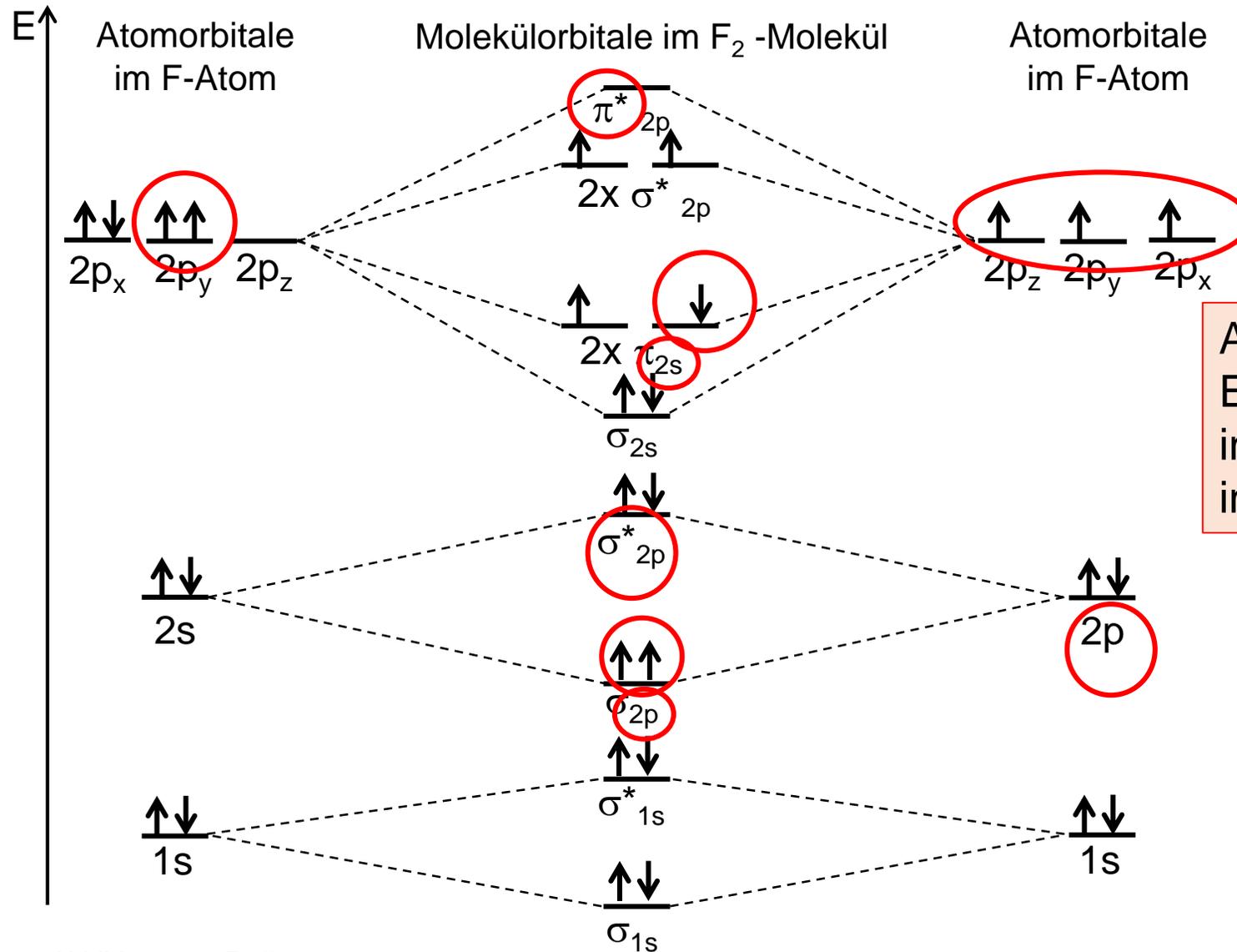
Beispielaufgabentyp 2 - Fehleraufgabe:

Korrigieren Sie das folgende MO-Schema für ein Fluor-Molekül



Beispielaufgabentyp 2 - Fehleraufgabe:

Korrigieren Sie das folgende MO-Schema für ein Fluor-Molekül



Allgemeine
Elektronenverteilung
in den MOs
insgesamt: $18 e^-$

Fehleraufgabe:

Korrigieren Sie das folgende MO-Schema für ein Fluor-Molekül

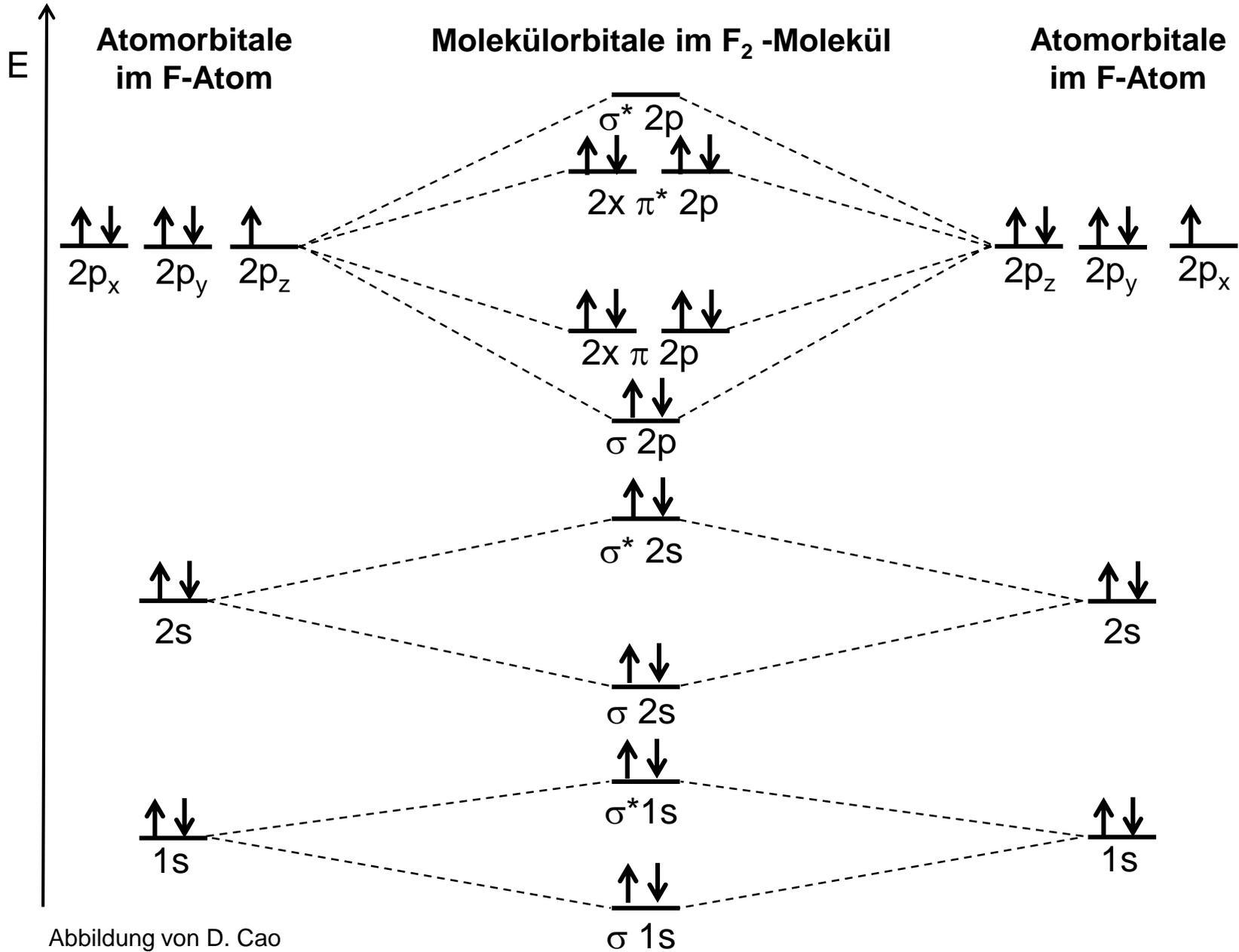


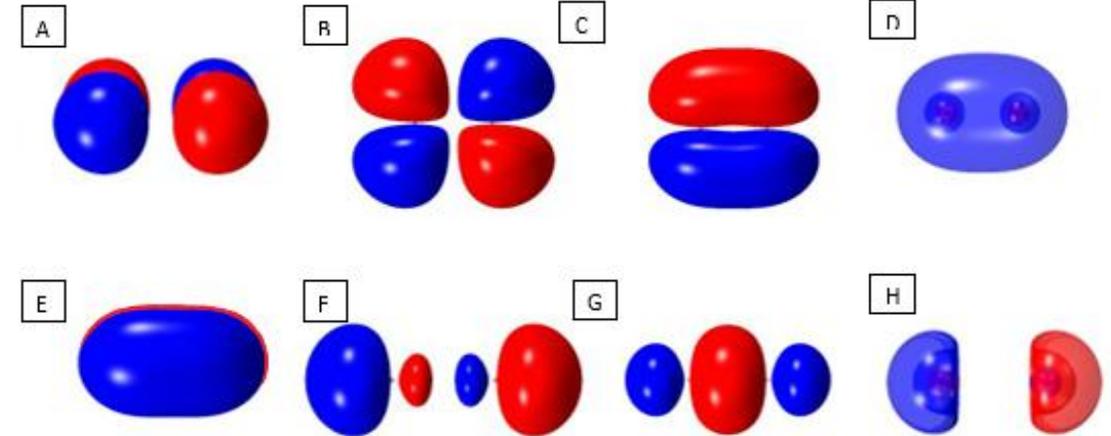
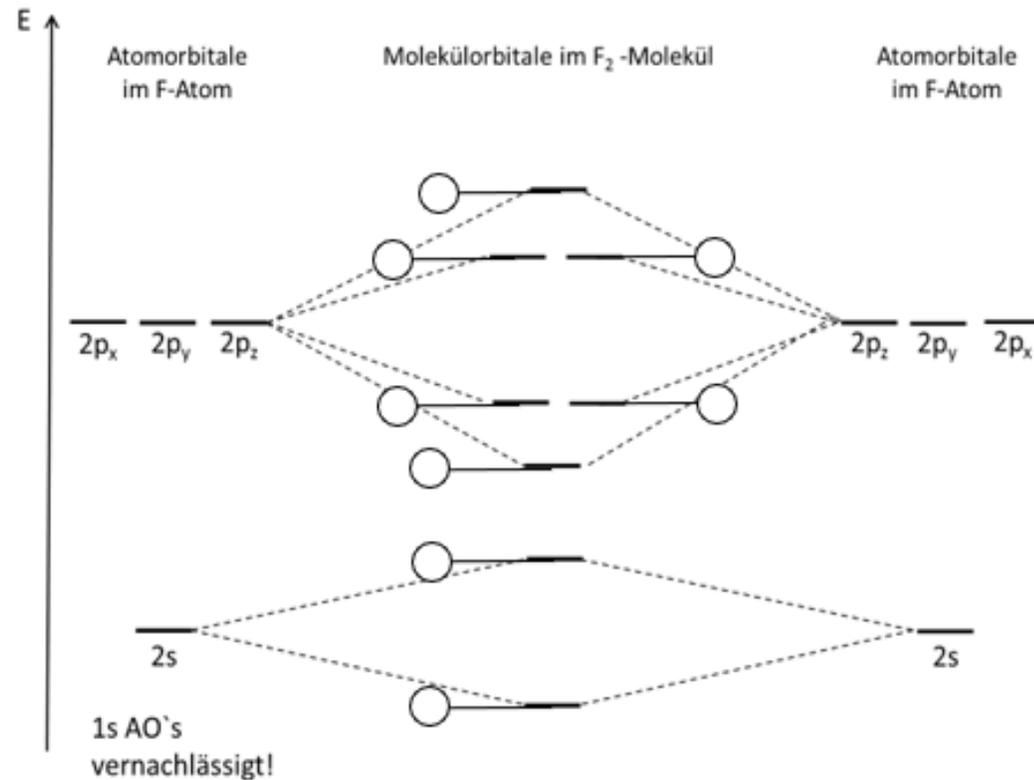
Abbildung von D. Cao

Beispielaufgabe: Zuordnung von MOs zu Energiestufen

Energieniveauschema der Molekülorbitale im Fluormolekül– Molekül F_2

Aufgabenstellung:

1. Geben Sie die Elektronenkonfiguration in einem Fluor-Atom an.
2. Die folgende Abbildung zeigt die energetische Anordnung der Molekülorbitale in einem Fluor-Molekül.
 - a. Ordnen Sie die Bilder der räumlichen Ausdehnung der Molekülorbitale den verschiedenen Stufen zu.
 - b. Benennen Sie die resultierenden Molekülorbitale in einem Fluor-Molekül.
 - c. Verteilen Sie die Elektronen auf den Molekülorbitalen (Pfeilsymbole).
 - d. Berechnen Sie die Bindungsordnung in einem Fluor-Molekül.





Weitere Anmerkungen:

- MO-Schemata mit heteronuklearen zweiatomigen Molekülen nicht explizit im LP
→ Einfluss der Elektronegativität auf AOs!

- *D. Hauck – Technische Universität Dortmund*



Molekülorbitaltheorie digital lernen – eine interaktive Lernumgebung

<https://motheorie.ccb.tu-dortmund.de/>

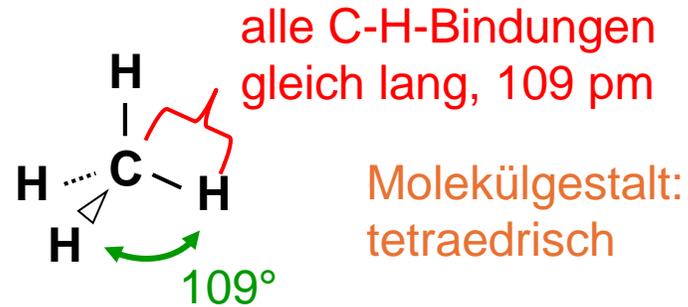


Molekülorbitale in Molekülen aus mehr als
zwei Atomen der 2. Periode

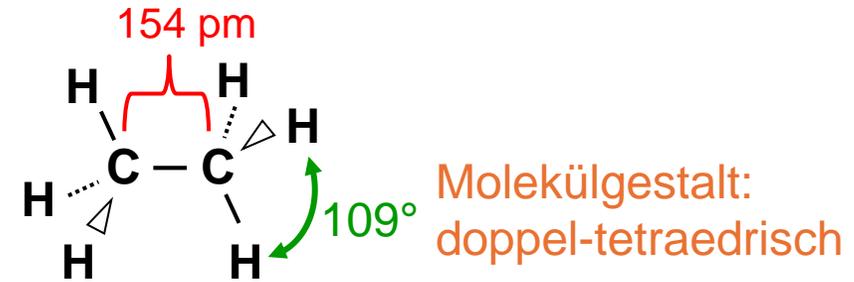
Was wir aus Experimenten wissen:

Molekülgestalt, Bindungswinkel, Bindungslänge,

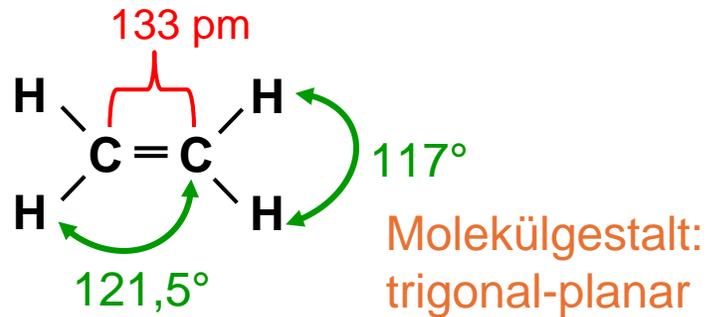
Methan-Molekül



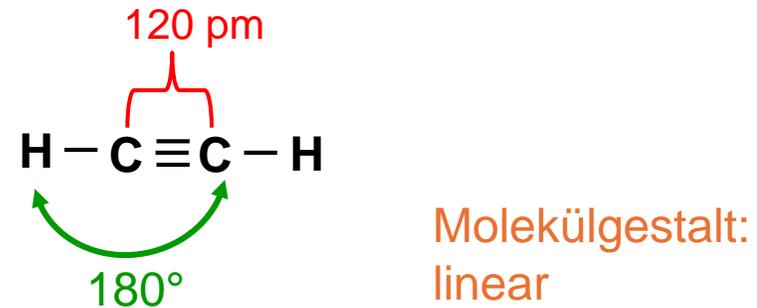
Ethan-Molekül



Ethen-Molekül:



Ethin-Molekül:



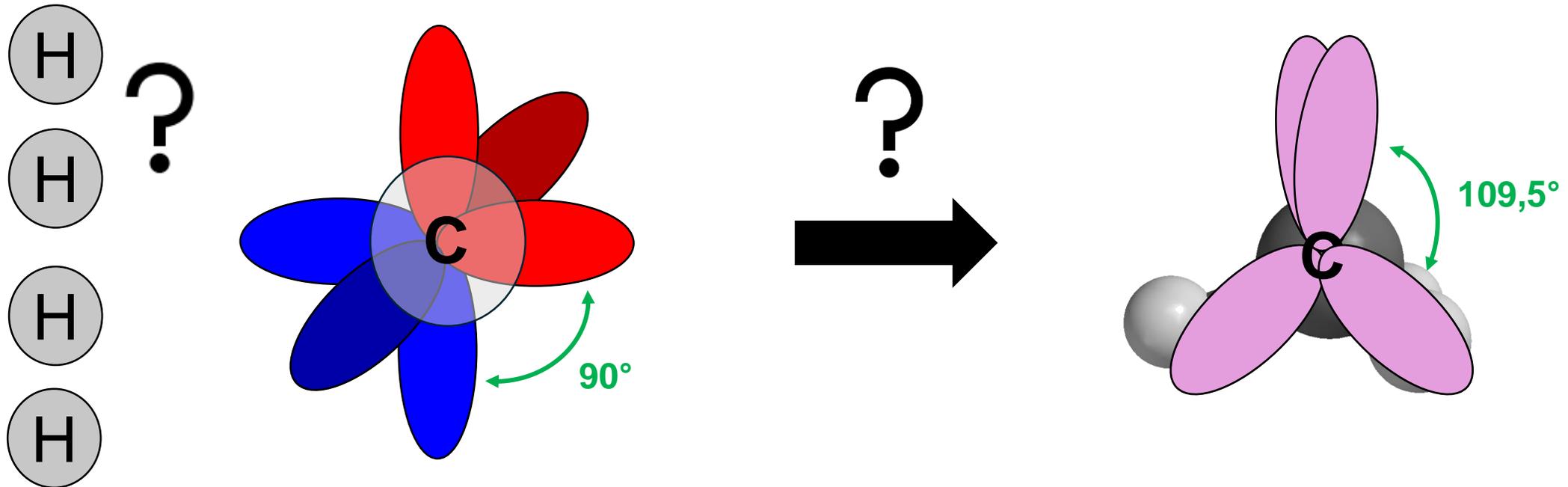
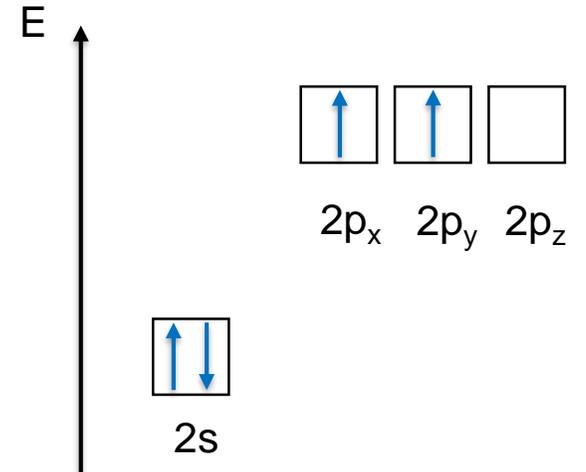
Hybridisierung

Überleitung/Problemstellung: Vierbindigkeit des Kohlenstoffatoms

Elektronenkonfiguration des Kohlenstoffatoms $1s^2 2s^2 3p_x^1 3p_y^1$ lässt in der VB-Theorie nur zwei Bindungen zu

→ VB-Theorie kann Vierbindigkeit von Kohlenstoffatomen nicht erklären

→ Hybridisierungstheorie liefert hier eine Lösung



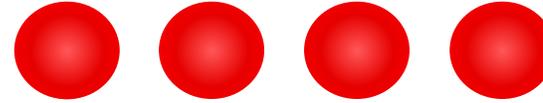
Methan-Molekül CH₄

Röntgenstrukturanalyse:

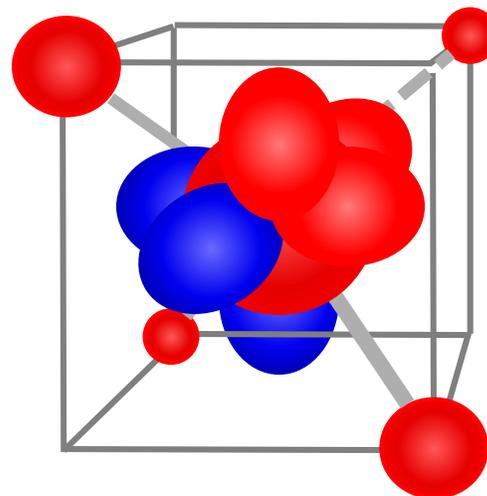
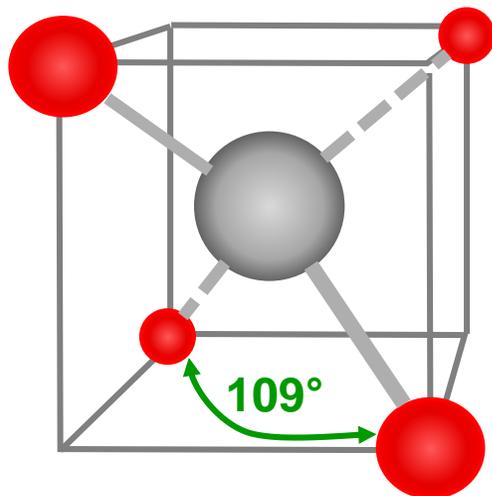
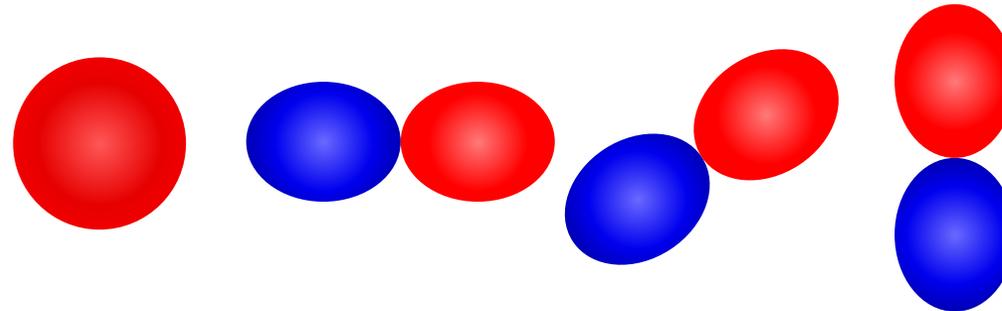
4 Wasserstoff-Atome
sind tetraedrisch um das
Kohlenstoff-Atom
angeordnet;

Atomorbitale aus Spektren berechnet:

4 x 1s Atomorbital



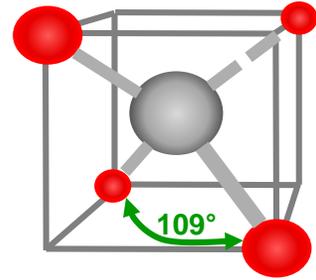
2s Atomorbital, p_x-, p_y- und p_z-Atomorbital



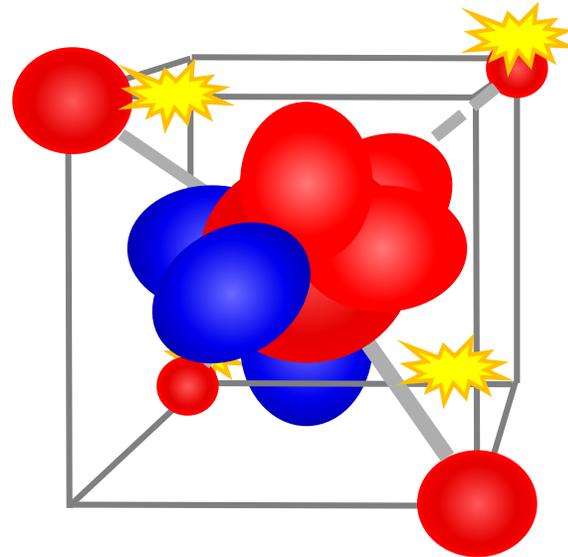
Welche
Molekülorbitale
resultieren?

Methan-Molekül CH₄

Lassen sich die Bindungsverhältnisse in mehratomigen Molekülen auch ohne schwierige Berechnungen vorhersagen?



Linus Pauling,
Nobelpreis 1954



Zwischen allen 8 Atomorbitalen lassen sich bindende Molekülorbitale ausbilden

P „Form“ der resultierenden Molekülorbitale?

Durch Berechnung: $\Psi_1 + \Psi_2 + \Psi_3 + \Psi_4 + \dots$

$\Psi_1 - \Psi_2 + \Psi_3 + \Psi_4 + \dots$

$\Psi_1 - \Psi_2 - \Psi_3 + \Psi_4 + \dots$

.....

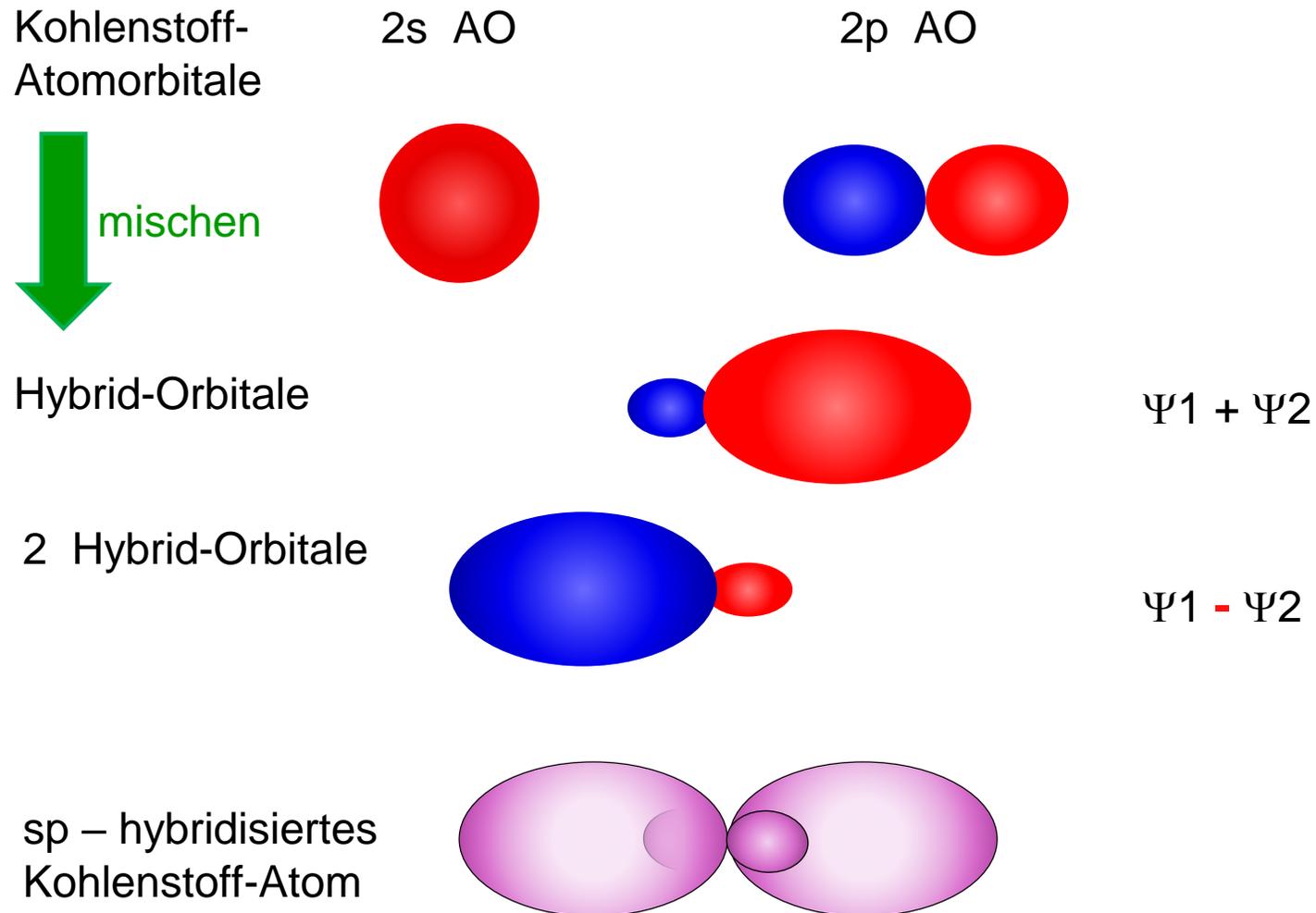
Das Quadrat der Lösungen liefert
Antreffwahrscheinlichkeit für Elektronen
=> MO's

Molekülorbitaltheorie mit Hybridisierung

Vereinfachung:

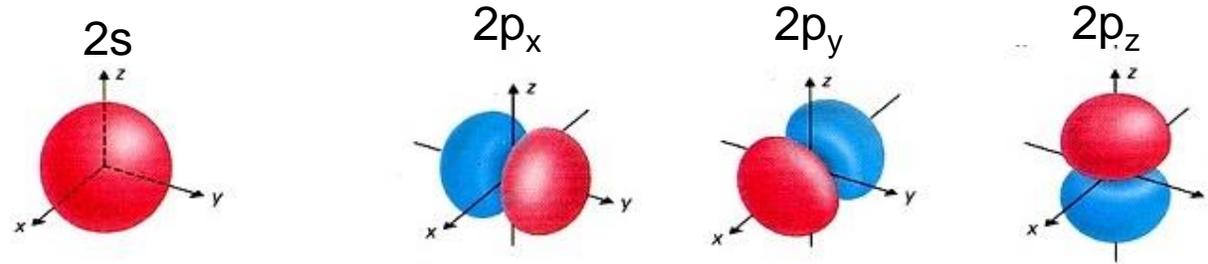
„Mathematisches Mischen“ der Atomorbitale des Kohlenstoff-Atoms

Atomorbitale des Wasserstoff-Atoms werden zunächst nicht betrachtet



sp^3 -Hybridisierung = Kombination von 1 x $2s$ - und 3 x $2p$ -Atomorbitalen des C-Atoms

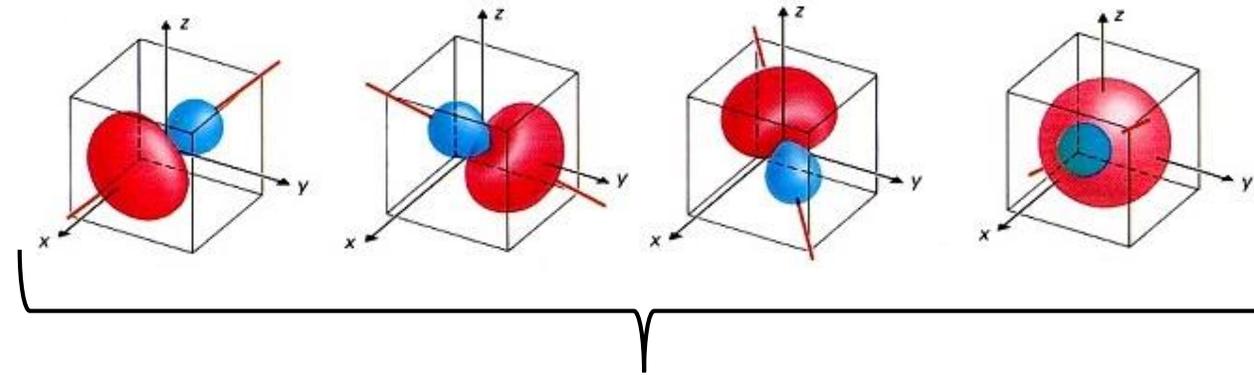
Kohlenstoff-Atomorbitale



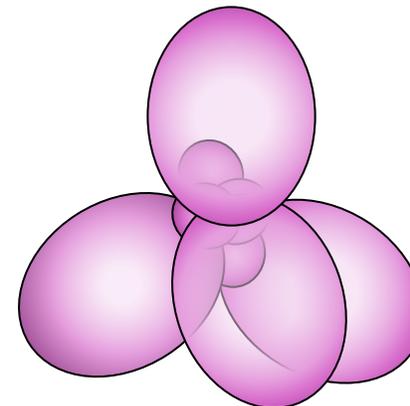
↓ mischen

Hybrid-Orbitale

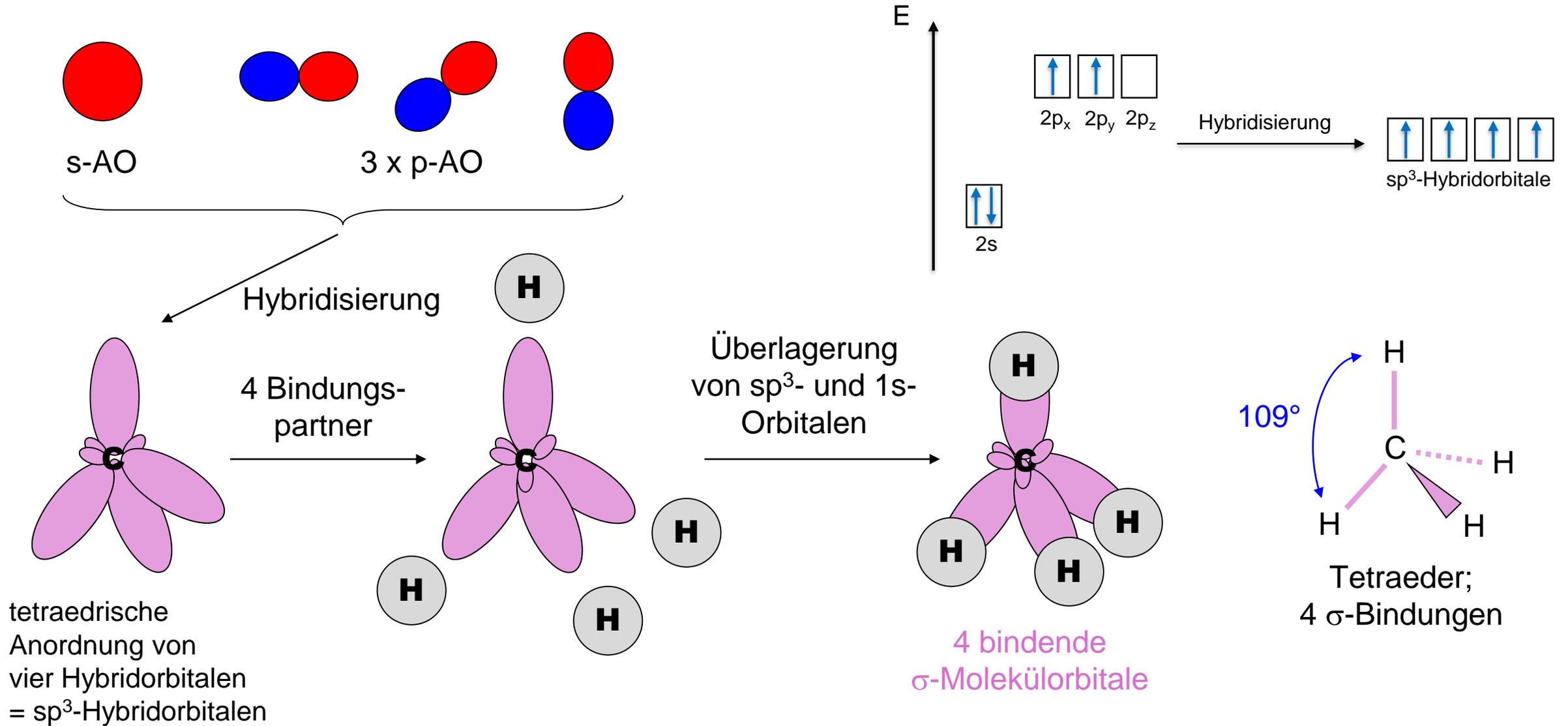
vier sp^3 Hybrid-Orbitale



sp^3 – hybridisiertes Kohlenstoff-Atom

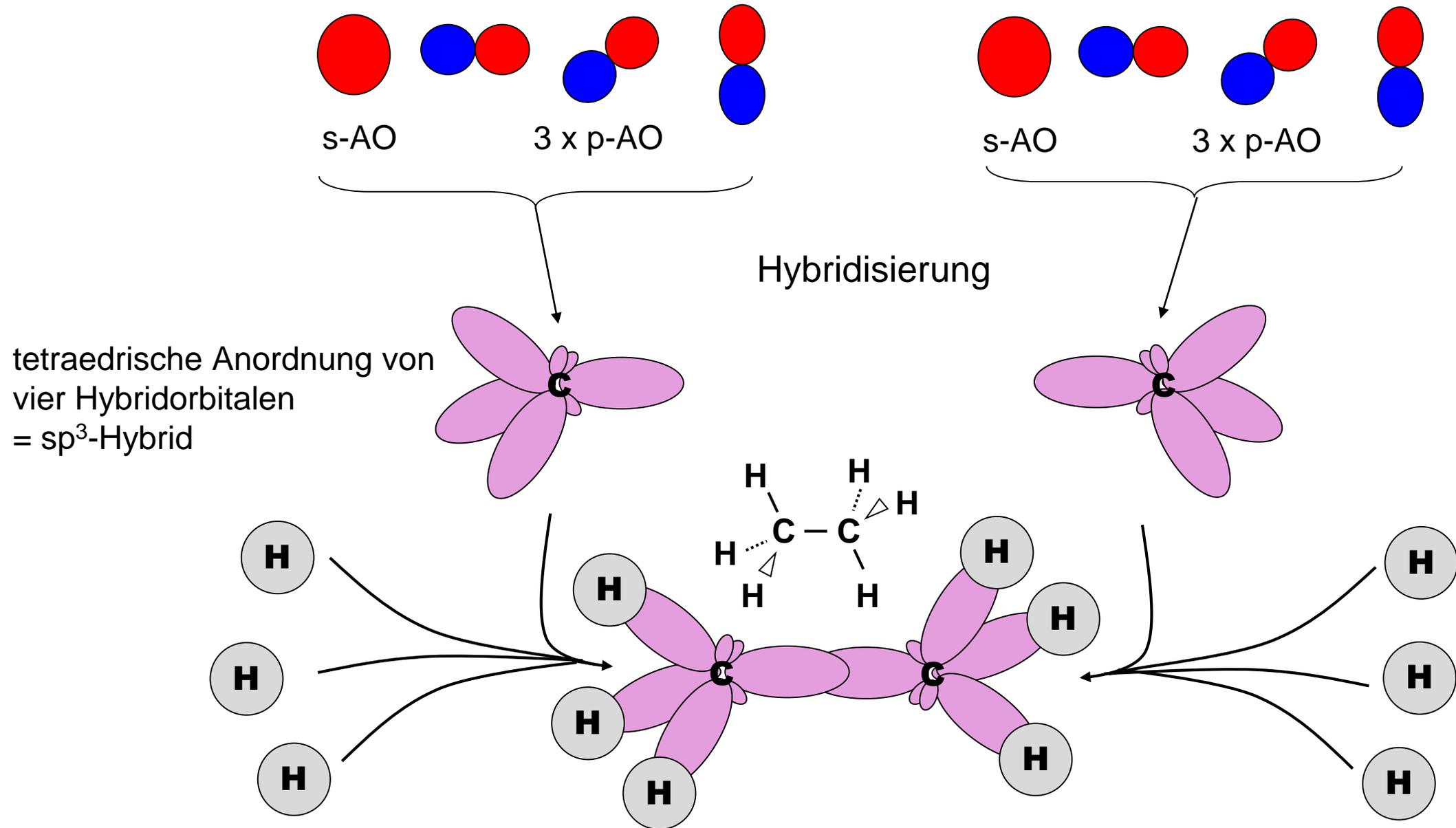


C-Atom mit 4 Bindungspartnern: sp^3 -Hybridorbitale im Methan-Molekül

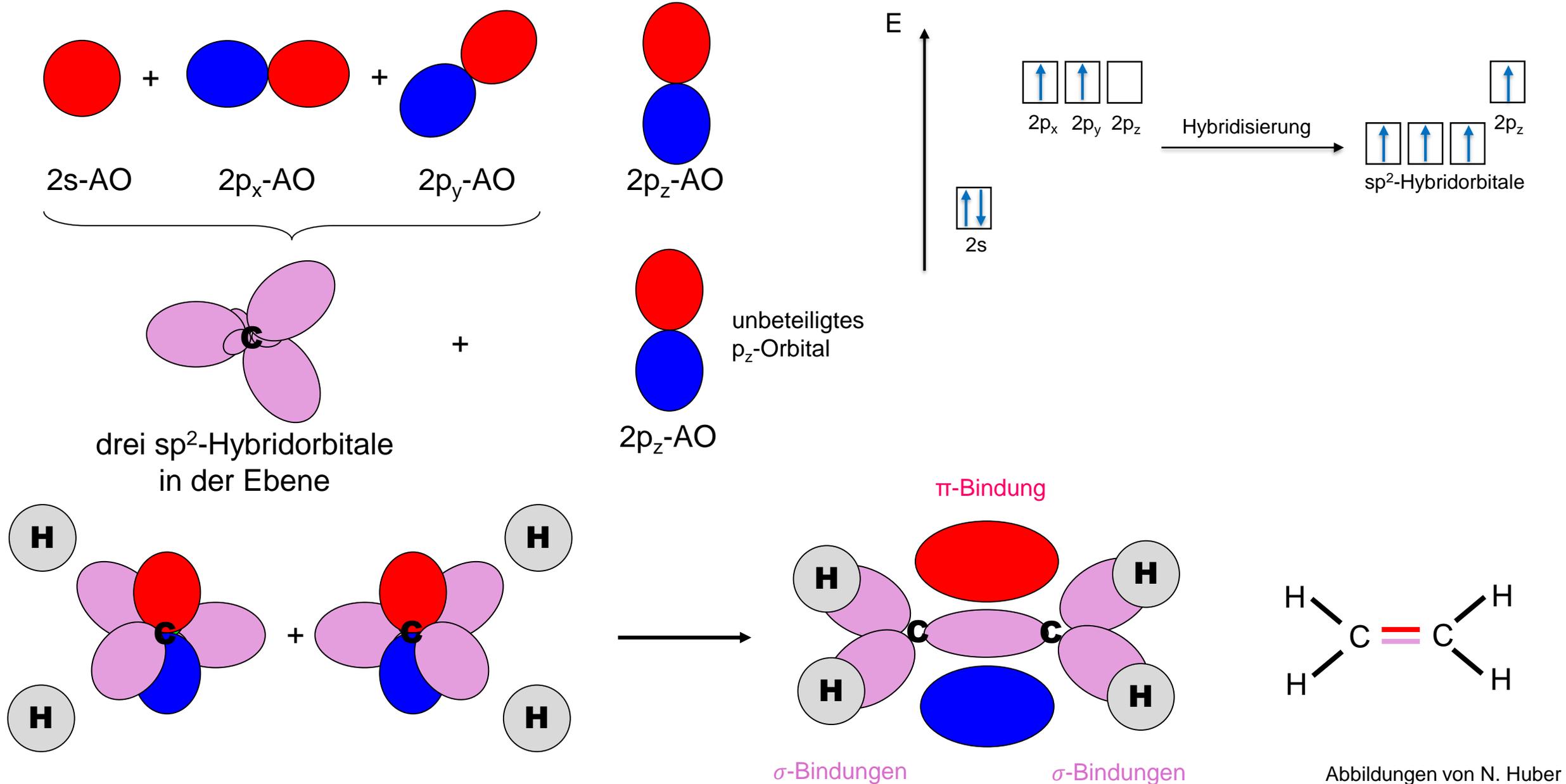


Es entstehen auch 4 antibindende MOs, die - da unbesetzt - vernachlässigt werden können.

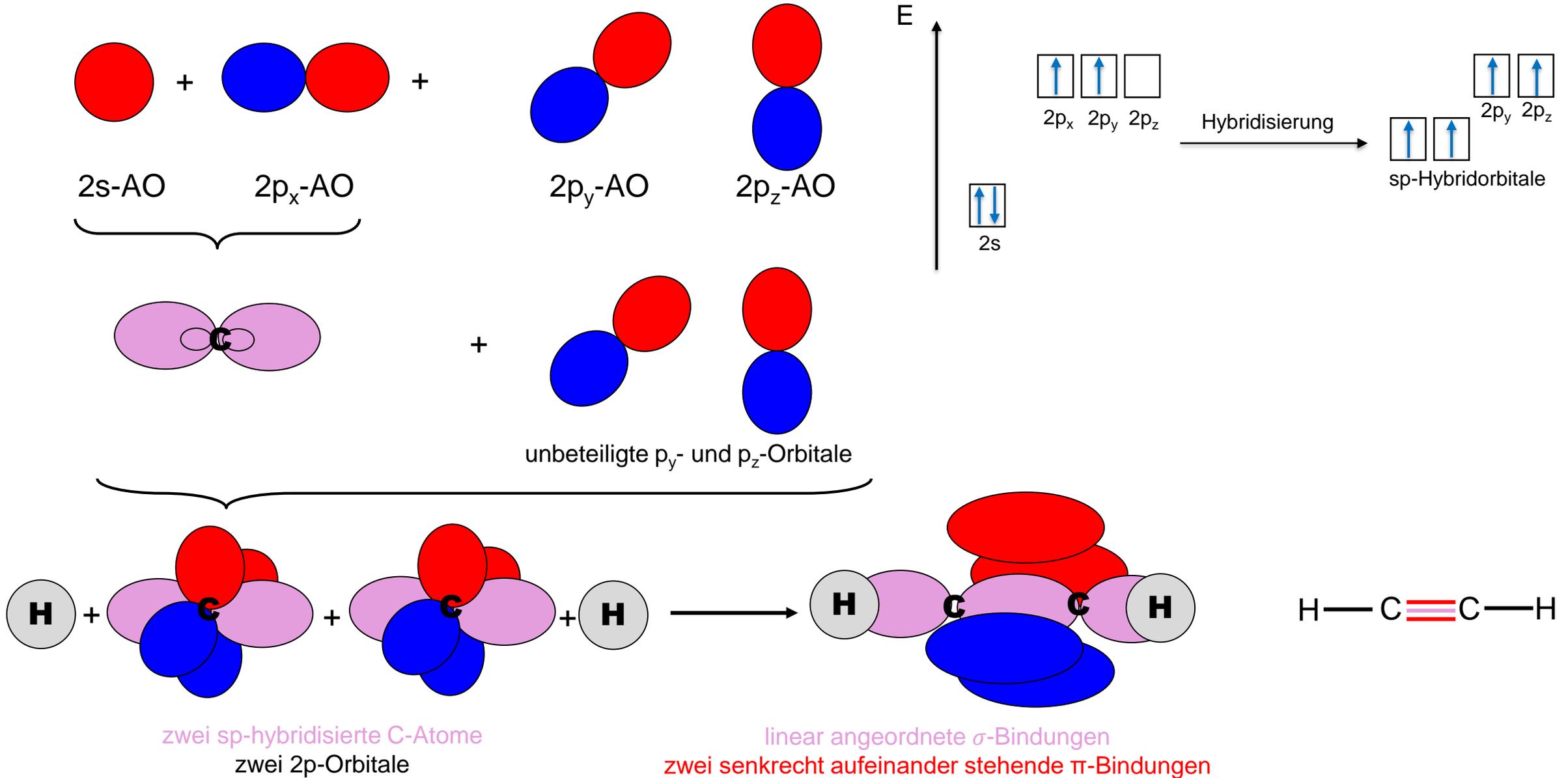
C-Atome mit 4 Bindungspartnern: sp^3 -Hybridorbitale im Ethan-Molekül



C-Atom mit 3 Bindungspartnern: sp^2 -Hybridorbitale und π -Bindung im Ethen-Molekül

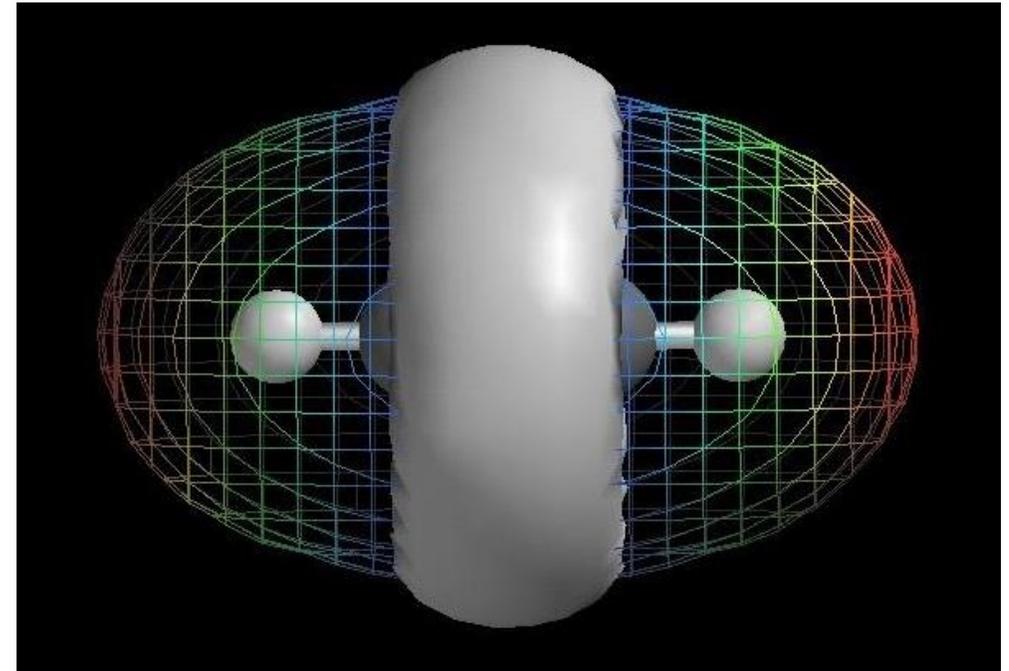
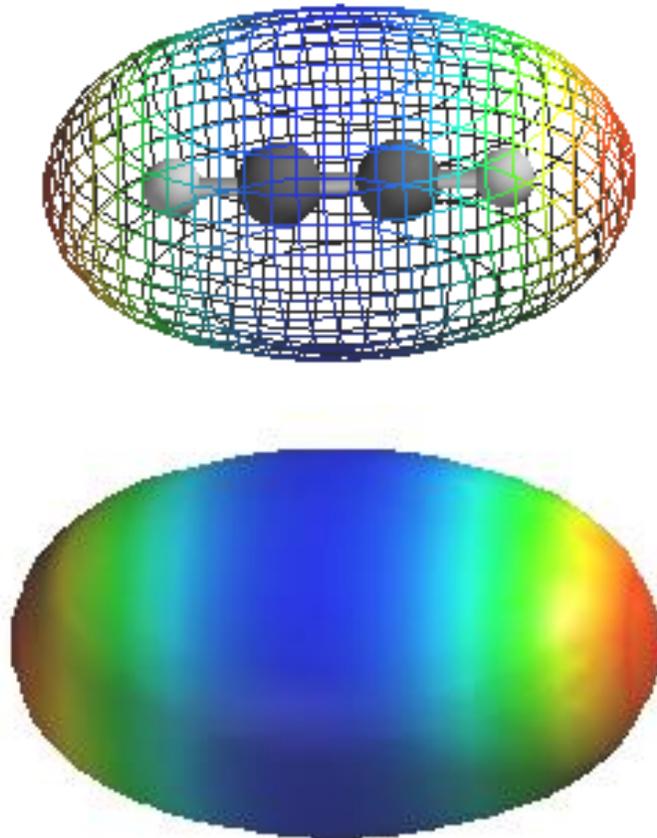


C-Atom mit zwei Bindungspartnern: sp-Hybridorbitale und π -Bindungen im Ethin-Molekül



Elektronendichte im Ethin-Molekül

Elektronendichteverteilung
an der Moleküloberfläche

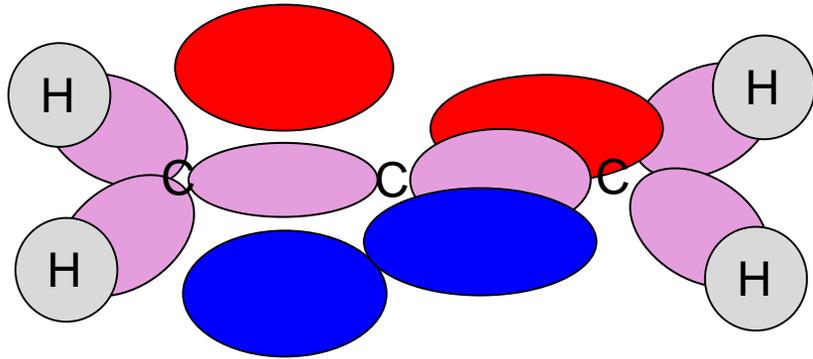


seitliche In-Phase-Überlagerung
der beiden π -Orbitale erklärt
ringförmige Elektronendichte

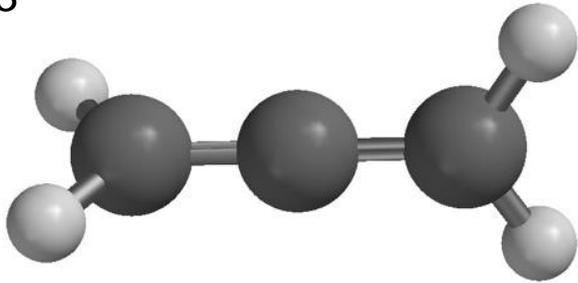
Kumulierte, konjugierte und isolierte π -Bindungen, Mesomerie

Anwendung des EPA-Modells und Hybridisierungsmodells

Propa-1,3-dien

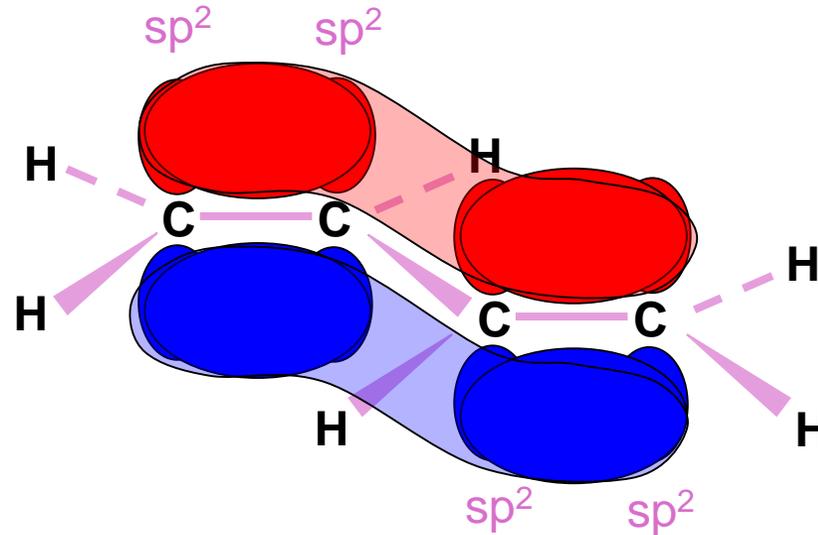


→ Ebene der drei Bindungspartner an C1 steht senkrecht zur Ebene der drei Bindungspartner an C3

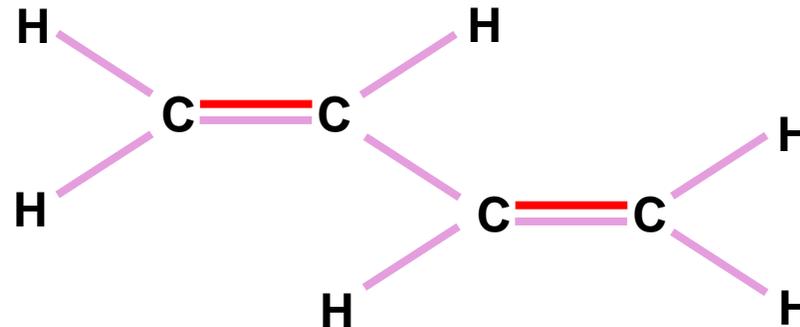


Bindungslängen:
kürzer als typische Doppelbindung, erklärbar durch Beteiligung der sp-Hybridorbitale an den σ -Bindungen

Buta-1,3-dien



Bindungswinkel ? alle 120 °

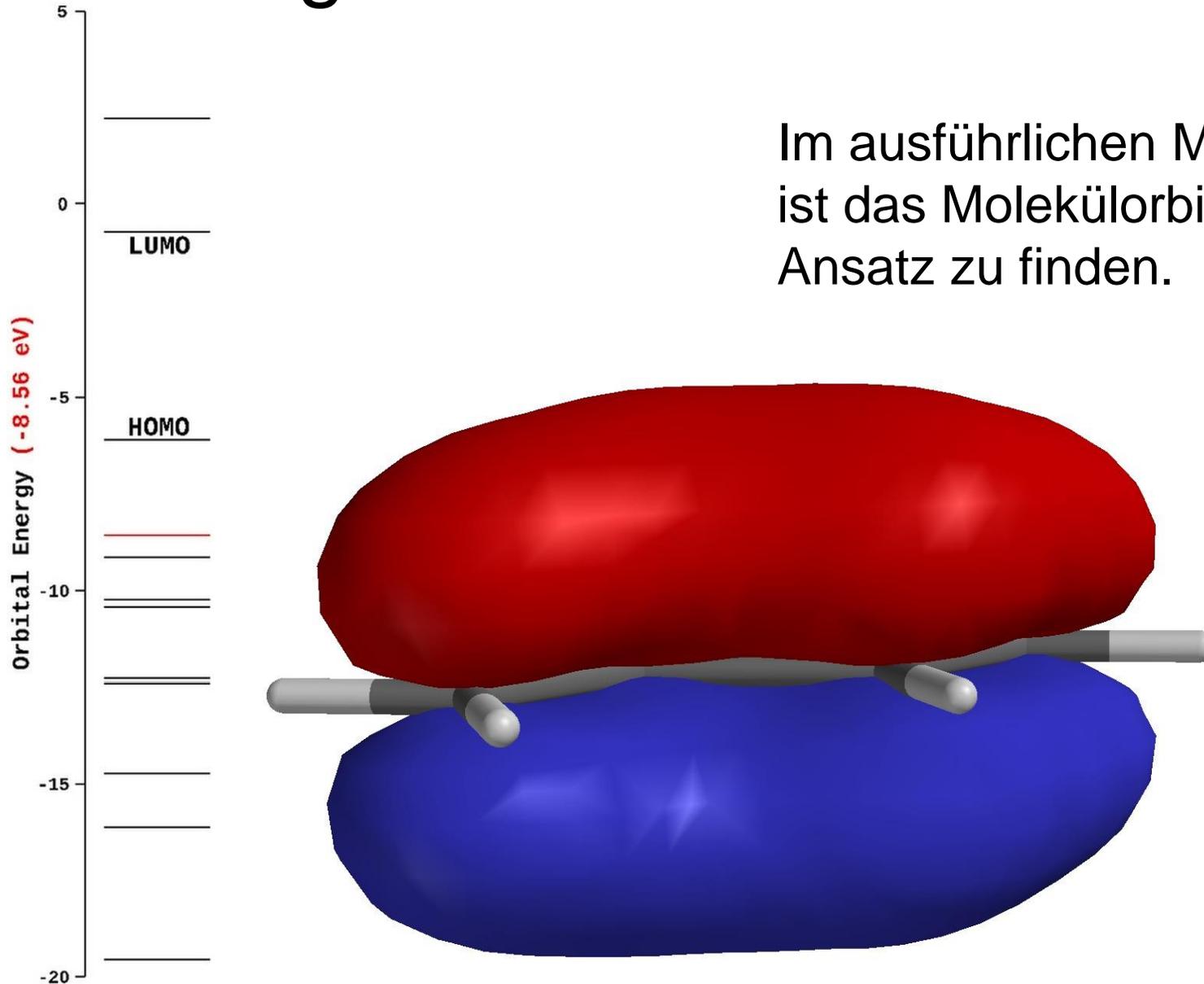


Penta-1,4-dien

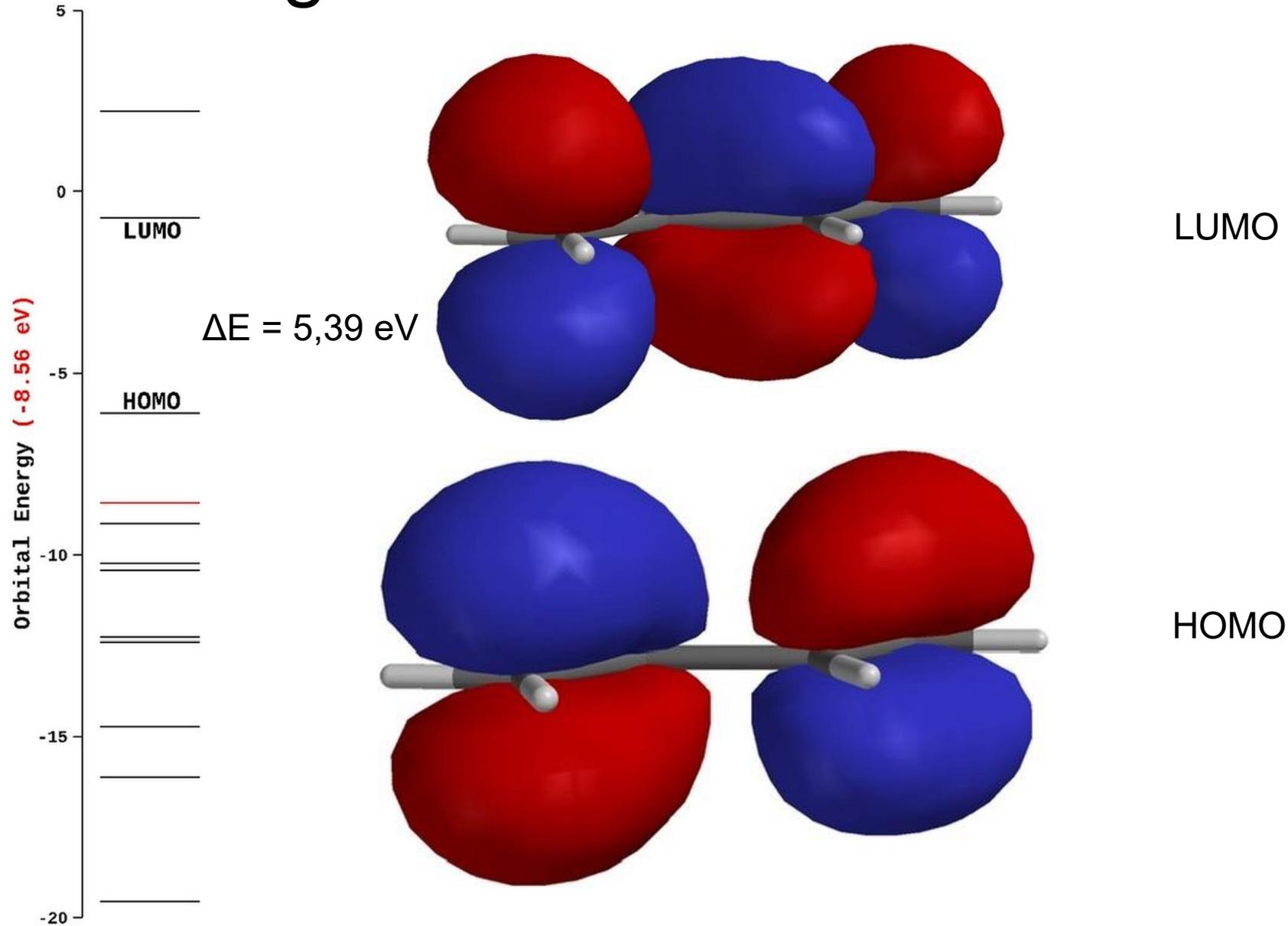
Bindungsverhältnisse analog zu Ethen

Energieschema der MOs von Buta-1,3-dien

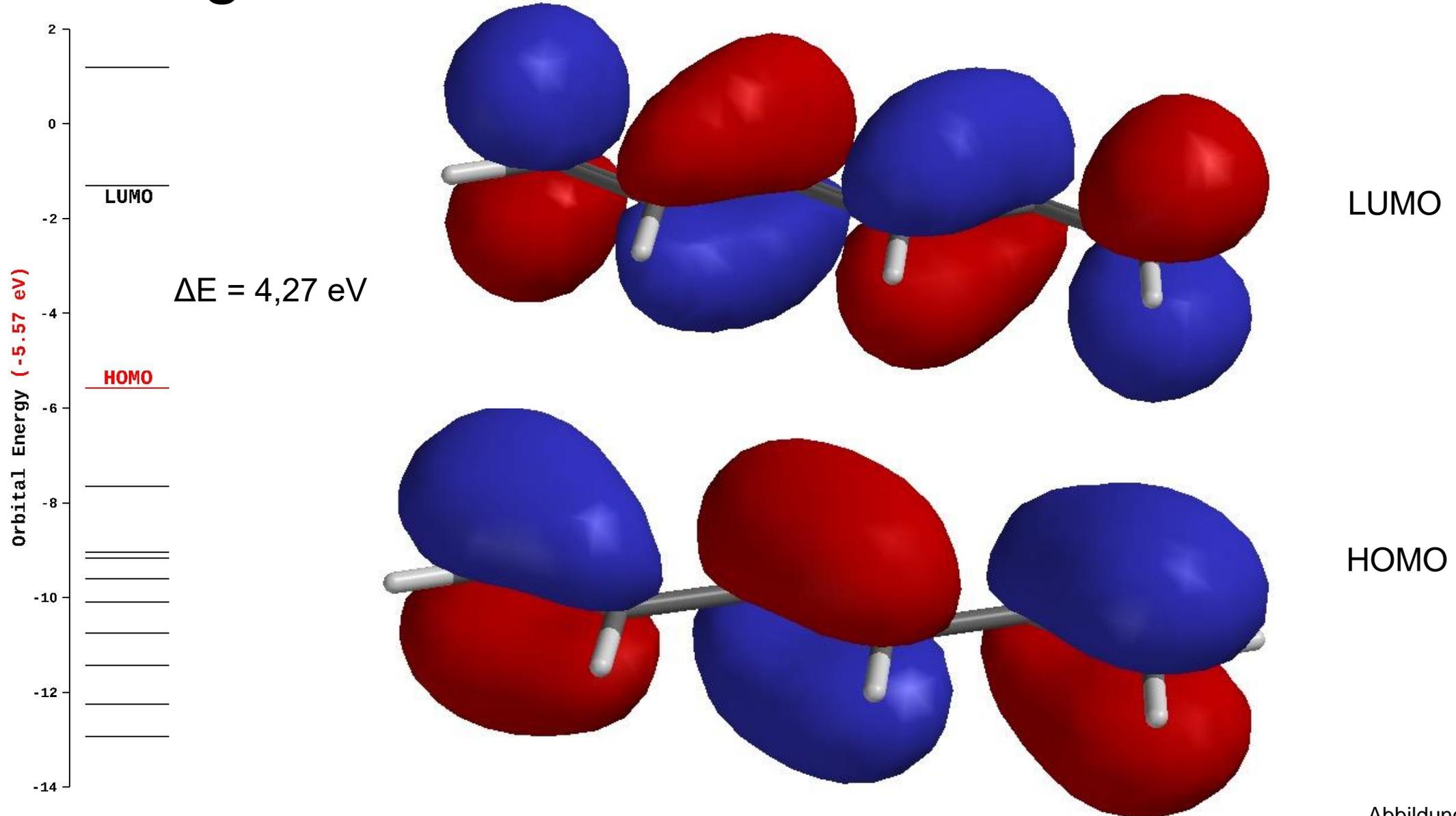
Im ausführlichen MO-Schema von Buta-1,3-dien ist das Molekülorbital aus dem Hybridisierungs-Ansatz zu finden.



Energieschema der MOs von Buta-1,3-dien



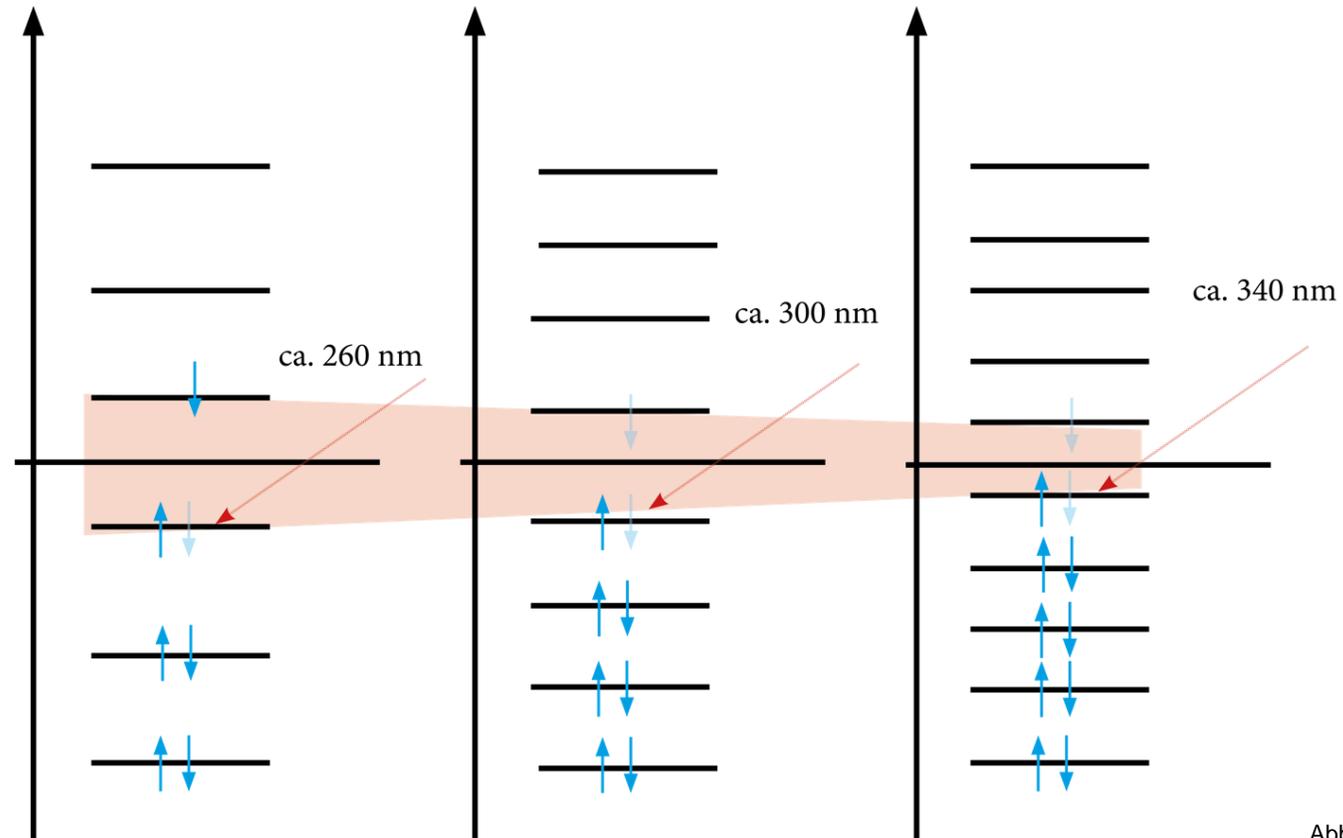
Energieschema der MOs von Hexa-1,3,5-trien



Orbitalenergie der HOMOs und LUMOs von Alken- Molekülen mit konjugierten Doppelbindungen

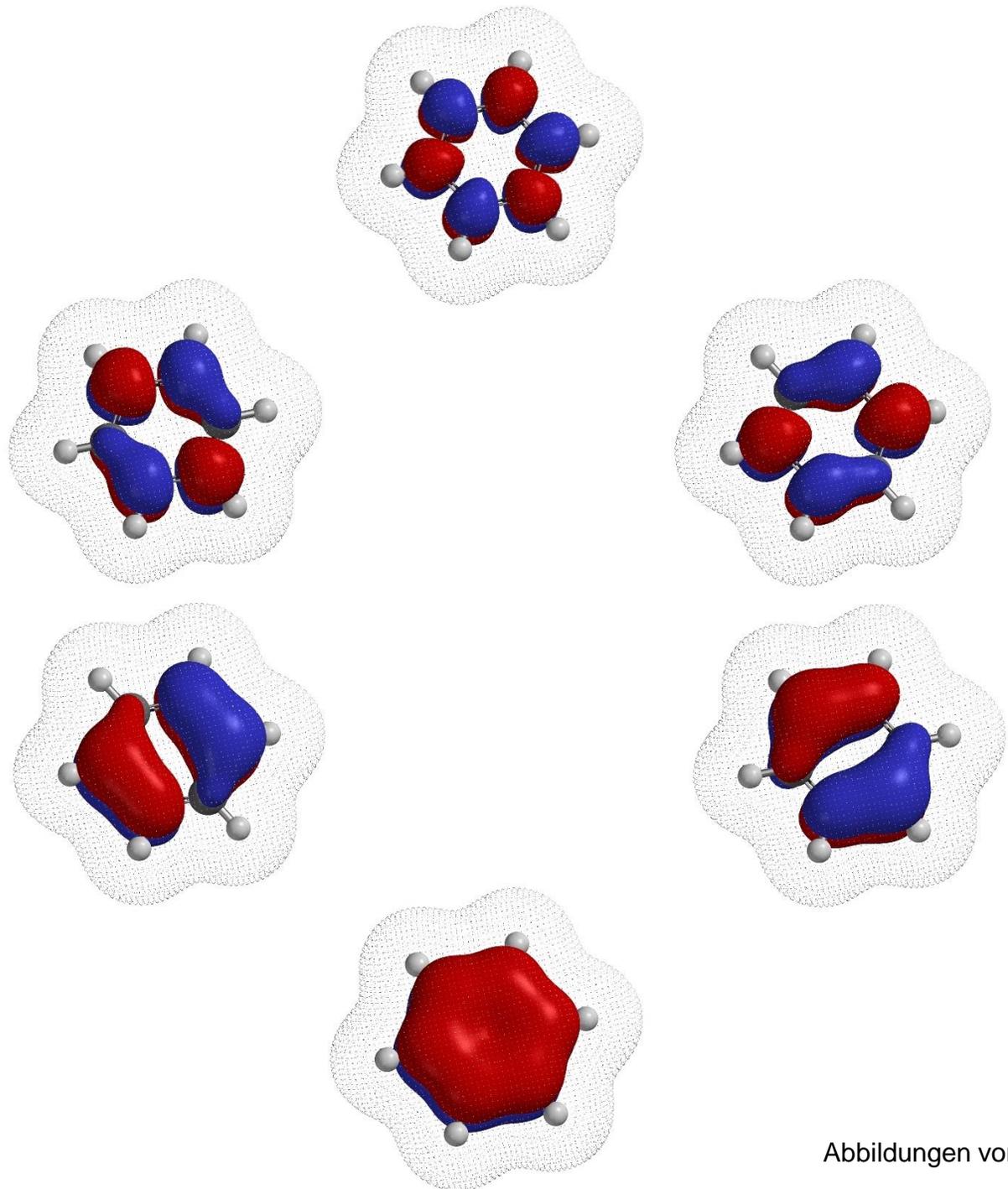
Molekül	Orbital Energy HOMO	Orbital Energy LUMO	ΔE_o (HOMO-LUMO)
Ethen	-10,3 eV	5,1 eV	15,4 eV
Butan-1,3-dien	-8,8 eV	3,6 eV	12,4 eV
Hexa-1,3,5-trien	-8,1 eV	2,8 eV	10,9 eV
Octa-1,3,5,7-tetraen	-7,6 eV	2,3 eV	9,9 eV
Deca-1,3,5,7,9-pentaen	-7,3 eV	1,9 eV	9,2 eV

Energiediagramme der MOs von Polyenen mit 6, 8 und 10 C-Atomen



Mit zunehmender Zahl an π -MOs wird der energetische Abstand zwischen HOMO und LUMO immer **kleiner** und somit das zur Elektronenanregung notwendige Licht immer energieärmer und **langwelliger**.

Molekülorbitale im Benzol-Molekül C_6H_6

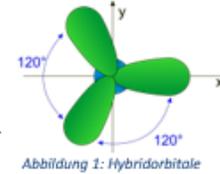


Beispielaufgaben:

Übungsaufgaben: Hybridisierungs-Modell

1. Hybridisierungs-Modell

- 1.1. Erläutern Sie die Hybridisierung eines s- und eines p- Orbitals.
- 1.2. Zeichnen Sie das entstehende Hybridorbital.



2. Typen von Hybridorbitalen

- 2.1. Benennen Sie die in Abb. 1 dargestellten Hybridorbitale.
- 2.2. Nennen Sie die Orbitale, die an der Bildung dieser Hybridorbitale beteiligt sind?

3. Bindungsverhältnisse in einfachen Kohlenwasserstoff-Molekülen.

- 3.1. Stellen Sie die Bindungsverhältnisse in Methan-, Ethan-, Ethen- und Ethin-Molekülen mit Hilfe des Hybridisierungs-Modells unter Verwendung von Orbitalskizzen dar.
- 3.2. Vergleichen Sie die Leistungsfähigkeit des Elektronenpaarabstoßungsmodells und des Hybridisierungsmodells am Beispiel des Ethen-Moleküls.

4. Bindungsverhältnisse im Propen-, ~~Propadien~~, Buta-1,2-dien- und Buta-1,3-dien-Molekül.

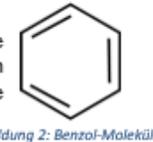
- 4.1. Zeichnen Sie für die obigen Moleküle die Lewis-Formel = Valenzstrichformel.
- 4.2. Zeichnen Sie in die Valenzstrichformel alle an den Bindungen beteiligten Orbitale mit Überlagerung. Verwenden Sie grün für σ -Bindungen und rot für π -Bindungen.
- 4.3. Geben Sie die Hybridisierungszustände aller C-Atome an.
- 4.4. Zeichnen Sie die Strukturformel der Moleküle in Keil-Strich-Schreibweise.
- 4.5. Leiten Sie für das Buta-1,3-dien-Molekül alle möglichen bindenden und antibindenden π -Molekülorbitale, sowie deren energetische Anordnung und Besetzung ab.

5. Moleküle mit der Molekülformel C_6H_6 .

- 5.1. Entwickeln Sie mindestens zwei verschiedene mögliche Valenzstrichformeln für Moleküle mit der Molekülformel C_6H_6 .
- 5.2. Leiten Sie die Bindungsverhältnisse in diesen Molekülen mit Hilfe des Hybridisierungs-Modells ab. σ -Bindungen dürfen zur Vereinfachung als Striche dargestellt werden.

6. Benzol-Molekül

- 6.1. Leiten Sie mit Hilfe des Hybridisierungs-Modells die Bindungsverhältnisse im Benzol-Molekül (siehe Abb. 2) ab. Fertigen Sie dazu eine Zeichnung nur mit den σ -Molekülorbitalen und eine Zeichnung nur mit dem energetisch günstigsten π -Molekülorbital an.
- 6.2. Entwickeln Sie Vorhersagen über den räumlichen Bau, die Bindungswinkel und die Bindungslängen im Benzol-Molekül.
- 6.3. Erklären Sie, warum die Benennung „Cyclohexa-1,3,5-trien“ für das Benzol-Molekül falsch ist.
- 6.4. Leiten Sie ab, welche weiteren bindenden und antibindenden π -Molekülorbitale existieren sollten und entwickeln Sie Vorschläge für deren energetische Stufung.



Disclaimer:

Die Nutzung der verlinkten Angebote erfolgt ausschließlich auf freiwilliger Basis.

Bei der Nutzung gelten die Datenschutzbestimmungen und Nutzungsbedingungen des jeweiligen Diensteanbieters.

Bitte beachten Sie insbesondere auch, dass sich diese Internetseiten inkl. der Verlinkungen ausschließlich an Lehrkräfte richten.

Vor einer Nutzung des Angebots und insbesondere vor einer Weitergabe der Links an Schülerinnen und Schüler zur Nutzung durch diese müssen Lehrkräfte unbedingt prüfen,

- ob die Nutzung/Weitergabe von den Nutzungsbedingungen des Angebots gedeckt ist.

(Manche Angebote sind nicht auf eine unmittelbare Nutzung durch Minderjährige ausgelegt, enthalten z. B. keine auf Minderjährige ausgelegten Nutzungsbedingungen.)

- ob und wenn ja in welcher Form die Schülerinnen und Schüler das Angebot datenschutzkonform nutzen können.