

## Arbeitsblatt: Bindungsarten & ihre Beschreibung durch AOs<sup>3</sup> (EVA geeignet)

### Ziel: Darstellung von MOs aus AOs erklärt Bindungsarten

Man kann an den elektrischen Ladungsdichten der beteiligten Molekülorbitale verschiedene Bindungsarten unterscheiden. Wenn man weiß, wie sich die Molekülorbitale (MOs) aus den Atomorbitalen (AOs) zusammensetzen, kann man die Bindungsart vorhersagen.

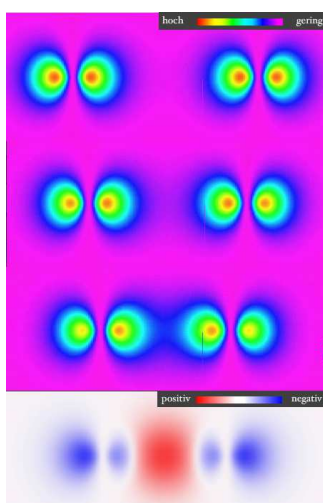


Abbildung 5: Entstehung der Bindung im F<sub>2</sub> aus 2p<sub>x</sub>-Orbitalen an F-Kernen (von oben nach unten) und Differenzdichte im Gleichgewichtsabstand (unten)

### Ladungsverschiebung in Bereich der Kern-Kern-Verbindungsachse: $\sigma$ -Bindung, s- & p-Überlapp.

In Abbildung 5 ist dargestellt, wie die Bindung im F<sub>2</sub>-Molekül entsteht, wenn sich die beiden F-Atome immer näher kommen. Man sieht, dass das Molekülorbital aus einer Überlappung der beiden 2p<sub>x</sub>-Atomorbitale an den F-Kernen entsteht (x-Achse nach rechts). Es entsteht eine –im Vergleich zu den isolierten Atomorbitalen– eine Erhöhung der elektrischen Ladungsdichte zwischen den Kernen (roter Bereich der Differenzdichte). Wenn diese Ladungsverschiebung hauptsächlich in den Bereich der Verbindungsachse verläuft, nennt man die entstandene Bin-

dung eine “ $\sigma$ -Bindung”. Eine ähnliche Ladungsverschiebung hast Du beim Entstehen des H<sub>2</sub>-Moleküls gesehen. Viele  $\sigma$ -Bindungen entstehen aus einer Überlappung von s- und p-Orbitalen.

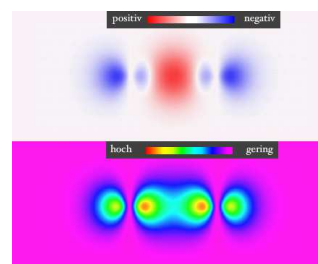


Abbildung 6: Differenz-Dichte (oben) und Dichte des Hüllenmaterials (unten) des O<sub>2</sub>-Moleküls, das an der  $\sigma$ -Bindung beteiligt ist

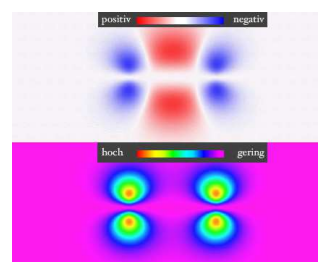


Abbildung 7: Differenz-Dichte (oben) und Dichte des Hüllenmaterials (unten) des O<sub>2</sub>-Moleküls, das an der  $\pi$ -Bindung beteiligt ist

### $\pi$ -Bindung: Ladungsverschiebung in Gebiet zw. Kerne, aber mit Knotenebene entlang Kern-Verbindungsachse aus 2p-Orbitalen $\perp$ zur K-K-Verb.achse

In Abbildung 6 erkennst Du, dass auch das Sauerstoff-Molekül ein Molekülorbital besitzt, das eine  $\sigma$ -Bindung aus 2p<sub>x</sub>-Orbitalen bildet. O<sub>2</sub> bildet aber noch eine andere Bindungsart aus. Das liegt daran, dass jedes Sauerstoff-Atom –im Vergleich zum Fluor-Atom– ein Elektron weniger besitzt. Dieses besetzt im O-Atom ein weiteres 2p-Atomorbital, wenn man die z-Achse z.B. nach oben ausrichtet, das 2p<sub>z</sub>-Orbital. Abbildung 7 zeigt, wie aus der Über-

<sup>3</sup> Abbildungen und zugehörige Filme aus der Staatsexamensarbeit von Johannes Seeger (Universität Karlsruhe (TH) Abteilung für Didaktik der Physik) [http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/software/moleculab/mo\\_start.html](http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/software/moleculab/mo_start.html)  
Kritik und Anregungen zum Text an Thomas Beyer (liberobeyer@gmx.de)

lappung der beiden  $2p_z$ -Atomorbital eine weitere Bindung entstehen kann, die sogenannte " $\pi$ -Bindung". Sie zeichnet sich dadurch aus, dass die Ladungsverschiebung zwar in ein Gebiet erfolgt, das zwischen den Kernen liegt, sich aber ein Stück oberhalb und unterhalb der Kern-Kernverbindungsachse liegt. Das zugehörige Molekülorbital hat also genau entlang der Verbindungsachse der Kerne eine Knotenebene.

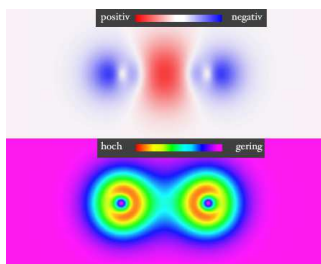


Abbildung 8: Differenzdichte (oben) und Dichte des an der *Mehrfachbindung* beteiligten Hüllenmaterials von  $O_2$

### $O_2$ -Doppelbindung: $\sigma$ - & $\pi$ -Bindung

Abbildung 9 (unten) zeigt die Dichte des gesamten an der Bindung beteiligten Hüllenmaterials. Die zugehörige Differenzdichte (Abbildung 8 oben) macht deutlich, dass mehr Hüllenmaterial zwischen die Kerne verlagert wird, als bei einer Einfachbindung. Die elektrostatische Anziehungskraft zwischen Hülle und Kernen ist also stärker als bei einer Bindung mit nur einem Molekülorbital. Das Sauerstoffmolekül bildet also eine sogenannte Doppelbindung aus, ein bindendes  $\sigma$ - und ein bindendes  $\pi$ -Orbital.

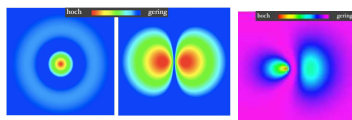


Abbildung 9: Die el. Ladungsdichte des  $2s$ -, des  $2p$ -Orbitals und des  $sp$ -Hybridorbitals im Atom (von links nach rechts)

### $2s\text{-AO} + 2p\text{-AO} = sp\text{-Hybrid-AO}$ $\sigma\text{-Bind. im } C_2\text{: zweimal } sp\text{-Hybrid-AO}$

Insbesondere bei Kohlenstoff-Kohlenstoffverbindungen kommt die  $\sigma$ -Bindung nicht durch die Überlappung von zwei  $2p$ -Orbitalen

zustande. Die Kohlenstoffatome dieser Verbindungen bilden je ein Atomorbital, das aus einer Mischung eines  $2s$ - und eines  $2p$ -Atomorbitals besteht, Abbildung 9, ein sogenanntes " $sp$ -Hybridorbital". Für ein Kohlenstoffatom alleine wäre die Besetzung so eines  $sp$ -Hybridorbital kein stabiler Zustand, denn das  $2s$ -Orbital hat eine andere Orbitalenergie als ein  $2p$ -Orbital. In einem Molekül kann jedoch die Bildung einer  $\sigma$ -Bindung aus zwei  $sp$ -Hybridorbitalen einen stabilen Zustand ergeben. Abbildung 10 zeigt die Bildung einer  $\sigma$ -Bindung in einer  $C_2$ -Verbindung aus zwei  $sp$ -Hybridorbitalen.

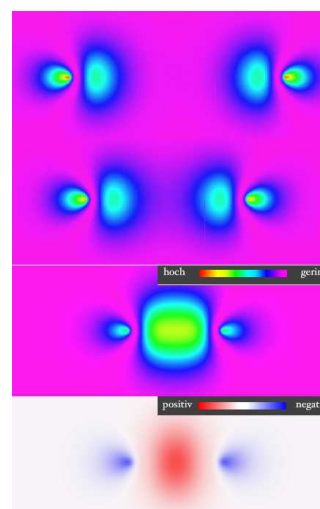


Abbildung 10: Entstehung der  $\sigma$ -Bindung im  $C_2$  aus  $sp$ -Orbitalen an C-Kernen (von oben nach unten) und Differenzdichte im Gleichgewichtsabstand (unten)

#### 1. Aufgabe

- Unterstreichen Sie Wichtiges!
- Tragen Sie für die Teilabschnitte Überschriften ein, die beschreiben, was man in diesem Abschnitt erfährt.
- Notieren Sie Ihre Fragen zum Text.

#### 2. Aufgabe

Vergleiche die  $\sigma$ -Bindung im  $F_2$ -Molekül mit der entsprechenden Bindung im  $O_2$ -Molekül und erkläre die Gemeinsamkeiten und Unterschiede.

#### 3. Aufgabe

Bestimme die Elektronenkonfiguration des N-Atoms und erkläre den Aufbau der bindenden Molekülorbitale des  $N_2$ -Moleküls aus den zugehörigen Atomorbitalen.

Lösungsvorschläge:

2 Gemeinsamkeiten der  $\sigma$ -Bindungen in  $F_2$  &  $O_2$ :

Sowohl die Differenzdichten als auch die Dichten der MOs weisen die gleiche Anzahl und relative Lage von Maxima, Minima und Nulllinien auf. Das liegt daran, dass beide MOs aus einer Überlagerung von  $2p_x$ -Orbitalen ( $x$ -Achse nach rechts) an den jeweiligen Kernen entstehen.

Unterschiede zwischen  $\sigma$ -Bindungen in  $F_2$  &  $O_2$ :

Augenscheinlich ist der Kernabstand bei der  $\sigma$ -Bindung im  $O_2$  kleiner als im  $F_2$ . (Die Bindungslänge von  $F_2$  beträgt etwa 142 pm und der von  $O_2$  etwa 121 pm.) Das kann nicht an der Ladung der Kerne

liegen, denn die ist beim Sauerstoff geringer als bei Fluor. Beim Fluorid liegt nur eine  $\sigma$ -Bindung vor. Beim Oxid hingegen liegt außer der  $\sigma$ -Bindung noch eine  $\pi$ -Bindung vor. Diese führt dazu, dass sich noch mehr Hüllenmaterial im Bereich zwischen den Kernen sammelt und so die elektro-statisch anziehende Wirkung verstärkt.

3 N:  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$

Wenn die  $x$ -Achse die Molekülverbindungsachse darstellt, so ergibt sich durch Überlappung der  $2p_x$ -Orbitale eine  $\sigma$ -Bindung und durch Überlappung der  $2p_y$ - bzw.  $2p_z$ -Orbitale je eine  $\pi$ -Bindung.  $N_2$  hat also eine Dreifachbindung.

## Arbeitsblatt: Bindungsarten & ihre Beschreibung durch AOs<sup>3</sup>

Man kann an den elektrischen Ladungsdichten der beteiligten Molekülorbitale verschiedene Bindungsarten unterscheiden. Wenn man weiß, wie sich die Molekülorbitale (MOs) aus den Atomorbitalen (AOs) zusammensetzen, kann man die Bindungsart vorhersagen.

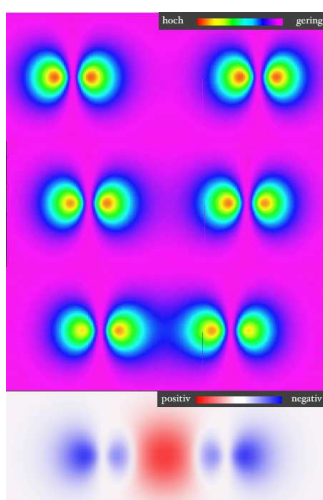


Abbildung 5: Entstehung der Bindung im F<sub>2</sub> aus 2p<sub>x</sub>-Orbitalen an F-Kernen (von oben nach unten) und Differenzdichte im Gleichgewichtsabstand (unten)

In Abbildung 5 ist dargestellt, wie die Bindung im F<sub>2</sub>-Molekül entsteht, wenn sich die beiden F-Atome immer näher kommen. Man sieht, dass das Molekülorbital aus einer Überlappung der beiden 2p<sub>x</sub>-Atomorbitale an den F-Kernen entsteht (*x*-Achse nach rechts). Es entsteht eine –im Vergleich zu den isolierten Atomorbitalen– eine Erhöhung der elektrischen Ladungsdichte zwischen den Kernen (roter Bereich der Differenzdichte). Wenn diese Ladungsverschiebung hauptsächlich in den Bereich der Verbindungsachse verläuft, nennt man die entstandene Bin-

dung eine “ $\sigma$ -Bindung”. Eine ähnliche Ladungsverschiebung hast Du beim Entstehen des H<sub>2</sub>-Moleküls gesehen. Viele  $\sigma$ -Bindungen entstehen aus einer Überlappung von *s*- und *p*-Orbitalen.

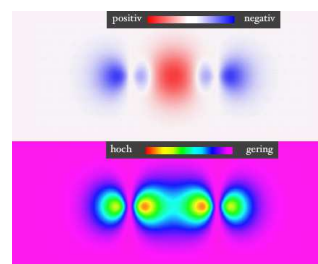


Abbildung 6: Differenz-Dichte (oben) und Dichte des Hüllenmaterials (unten) des O<sub>2</sub>-Moleküls, das an der  $\sigma$ -Bindung beteiligt ist

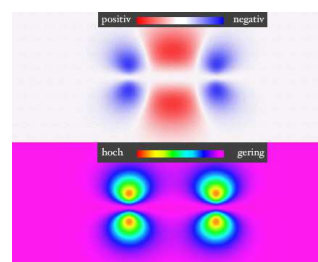


Abbildung 7: Differenz-Dichte (oben) und Dichte des Hüllenmaterials (unten) des O<sub>2</sub>-Moleküls, das an der  $\pi$ -Bindung beteiligt ist

In Abbildung 6 erkennst Du, dass auch das Sauerstoff-Molekül ein Molekülorbital besitzt, das eine  $\sigma$ -Bindung aus 2p<sub>x</sub>-Orbitalen bildet. O<sub>2</sub> bildet aber noch eine andere Bindungsart aus. Das liegt daran, dass jedes Sauerstoff-Atom –im Vergleich zum Fluor-Atom– ein Elektron weniger besitzt. Dieses besetzt im O-Atom ein weiteres 2p-Atomorbital, wenn man die *z*-Achse z.B. nach oben ausrichtet, das 2p<sub>z</sub>-Orbital. Abbildung 7 zeigt, wie aus der Über-

<sup>3</sup> Abbildungen und zugehörige Filme aus der Staatsexamensarbeit von Johannes Seeger (Universität Karlsruhe (TH) Abteilung für Didaktik der Physik) [http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/software/moleculab/mo\\_start.html](http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/software/moleculab/mo_start.html) Kritik und Anregungen zum Text an Thomas Beyer ([liberobeyer@gmx.de](mailto:liberobeyer@gmx.de))

lappung der beiden  $2p_z$ -Atomorbital eine weitere Bindung entstehen kann, die sogenannte " $\pi$ -Bindung". Sie zeichnet sich dadurch aus, dass die Ladungsverschiebung zwar in ein Gebiet erfolgt, das zwischen den Kernen liegt, sich aber ein Stück oberhalb und unterhalb der Kern-Kernverbindungsachse liegt. Das zugehörige Molekülorbital hat also genau entlang der Verbindungsachse der Kerne eine Knotenebene.

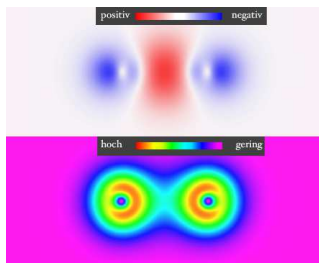


Abbildung 8: Differenzdichte (oben) und Dichte des an der *Mehrfachbindung* beteiligten Hüllenmaterials von  $O_2$

Abbildung 8 (unten) zeigt die Dichte des gesamten an der Bindung beteiligten Hüllenmaterials. Die zugehörige Differenzdichte (Abbildung 8 oben) macht deutlich, dass mehr Hüllenmaterial zwischen die Kerne verlagert wird, als bei einer Einfachbindung. Die elektrostatische Anziehungskraft zwischen Hülle und Kernen ist also stärker als bei einer Bindung mit nur einem Molekülorbital. Das Sauerstoffmolekül bildet also eine sogenannte Doppelbindung aus, ein bindendes  $\sigma$ - und ein bindendes  $\pi$ -Orbital.

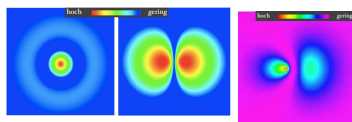


Abbildung 9: Die el. Ladungsdichte des  $2s$ -, des  $2p$ -Orbitals und des  $sp$ -Hybridorbitals im Atom (von links nach rechts)

Insbesondere bei Kohlenstoff-Kohlenstoffverbindungen kommt die  $\sigma$ -Bindung nicht durch die Überlappung von zwei  $2p$ -Orbitalen

zustande. Die Kohlenstoffatome dieser Verbindungen bilden je ein Atomorbital, das aus einer Mischung eines  $2s$ - und eines  $2p$ -Atomorbitals besteht, Abbildung 9, ein sogenanntes " $sp$ -Hybridorbital". Für ein Kohlenstoffatom alleine wäre die Besetzung so eines  $sp$ -Hybridorbital kein stabiler Zustand, denn das  $2s$ -Orbital hat eine andere Orbitalenergie als ein  $2p$ -Orbital. In einem Molekül kann jedoch die Bildung einer  $\sigma$ -Bindung aus zwei  $sp$ -Hybridorbitalen einen stabilen Zustand ergeben. Abbildung 10 zeigt die Bildung einer  $\sigma$ -Bindung in einer  $C_2$ -Verbindung aus zwei  $sp$ -Hybridorbitalen.

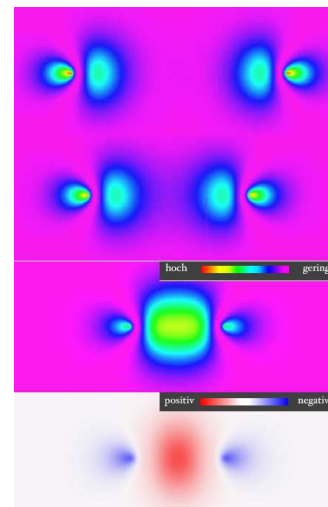


Abbildung 10: Entstehung der  $\sigma$ -Bindung im  $C_2$  aus  $sp$ -Orbitalen an C-Kernen (von oben nach unten) und Differenzdichte im Gleichgewichtsabstand (unten)

### 1. Aufgabe

- Unterstreichen Sie Wichtiges!
- Tragen Sie für die Teilabschnitte Überschriften ein, die beschreiben, was man in diesem Abschnitt erfährt.
- Notieren Sie Ihre Fragen zum Text.

### 2. Aufgabe

Vergleiche die  $\sigma$ -Bindung im  $F_2$ -Molekül mit der entsprechenden Bindung im  $O_2$ -Molekül und erkläre die Gemeinsamkeiten und Unterschiede.

### 3. Aufgabe

Bestimme die Elektronenkonfiguration des N-Atoms und erkläre den Aufbau der bindenden Molekülorbitale des  $N_2$ -Moleküls aus den zugehörigen Atomorbitalen.