

# Lückentext Editor

neu öffnen speichern import export C >>

Lückentext: [ 23a MO-Theorie ]

Begriffe

- arabische Ziffern 1,2,3 ...
- Atomorbitale:
- C-H-Bindungen
- Doppel-Bindung
- ein s (sharp) -Orbital
- einer  $\pi$ -Bindung
- Ethen:
- Ethin:
- halbwegs plausibler
- Hückel-Regel
- Mesomerie-Energie.
- Molekülorbitale
- Orbital-Modell
- p(principal)-
- Ringstrom
- s, p, d und f
- sind alle gleich
- sp-sp- Molekülorbital
- sp<sup>2</sup>-sp<sup>2</sup>- Molekülorbital
- sp<sup>3</sup>-Hybridorbitale bilden
- Wahrscheinlichkeit von ca. 90%)
- zwei  $\pi$ -Bindungen.
- $\sigma$ -Bindung

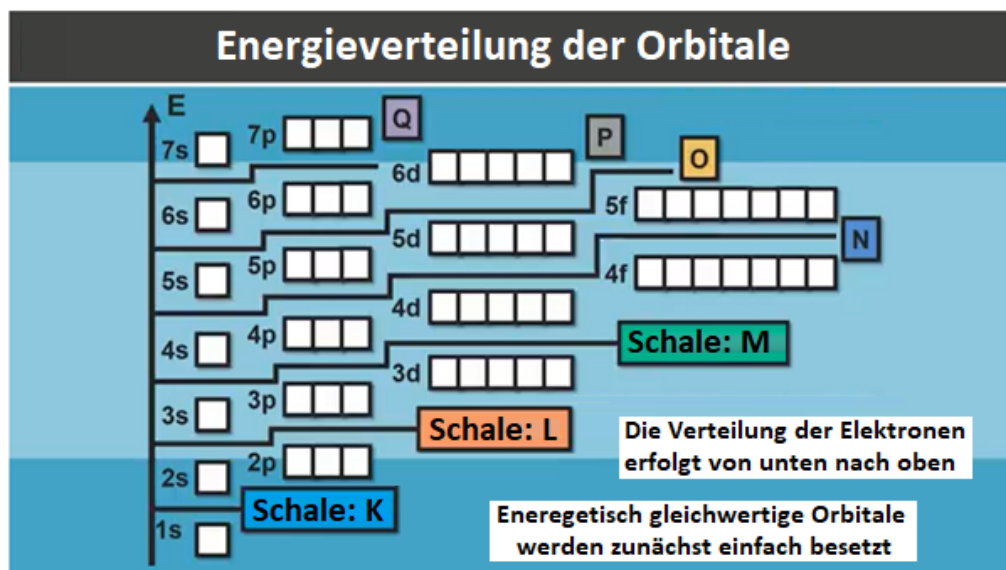
## Stark vereinfachte Molekül-Orbital-Theorie

Als Weiterentwicklung des Schalenmodells von Bohr geht man beim **Orbital-Modell** davon aus, dass sich die Elektronen in bestimmten Aufenthaltsräumen (mit einer **Wahrscheinlichkeit von ca. 90%**) bewegen.

Die Orbitale haben unterschiedliche Formen und Energien und können maximal 2 Elektronen aufnehmen (Pauli-Prinzip).

### Atomorbitale:

Die ehemalige „Schalennummer“ K, L, M etc. ergibt das Grundenergieniveau. Wir benutzen ab jetzt dafür die Hauptquantenzahl (**arabische Ziffern 1,2,3 ...**).

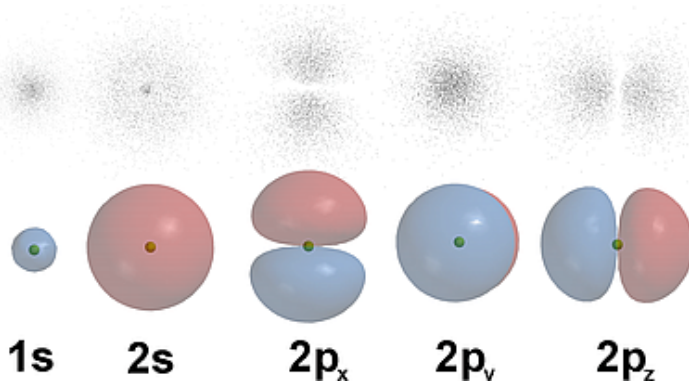


Die maximale Anzahl der Elektronen auf einer Schale lässt sich noch unterteilen in „Nebenquanten“ mit den Buchstaben **s, p, d und f**. Die Anzahl der tatsächlichen Elektronen wird oben als Index geschrieben.

So werden die 5 Elektronen des Bor mit  $1s^2, 2s^2, 2p^1$  bezeichnet.

Wegen der Komplexität beschäftigen wir uns nur mit den einfachen Orbitalen:

Für jede Hauptquantenzahl gibt es, wenn möglich, jeweils **ein s (sharp) -Orbital** (kugelförmig) und drei **p(principal)-** Orbitale (hantelförmig - jeweils in eine der drei Raumrichtungen x, y und z gerichtet).

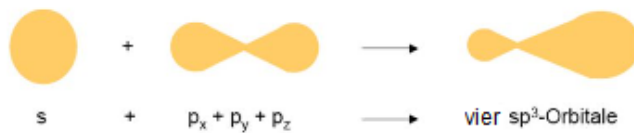


Formen und Größen der energieärmsten Orbitale (90% Wahrscheinlichkeit)

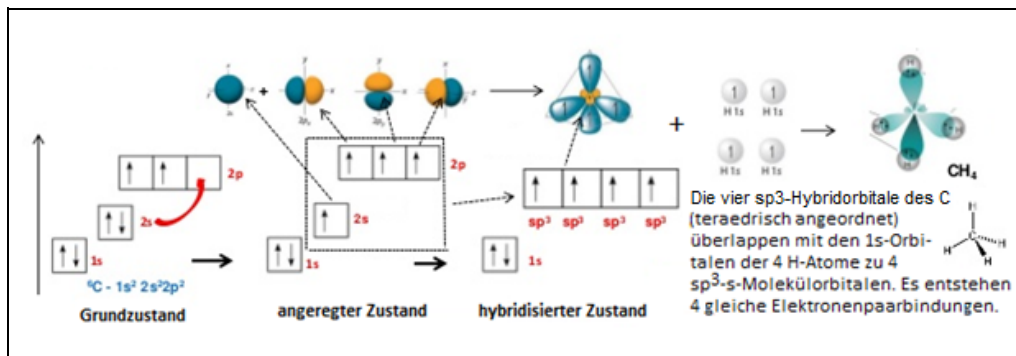
**Hybridisierung und Molekülorbitale**

An dieser Stelle werden nicht die Komplexe MO-Theorie, basierend auf der Schrödinger-Gleichung und die entsprechenden LCAO-Methoden oder Hückel-Rechnungen ohne antibindende und nichtbindende Orbitale dargestellt, sondern nur deren Ergebnisse in halbwegs plausibler Darstellung wiedergegeben.

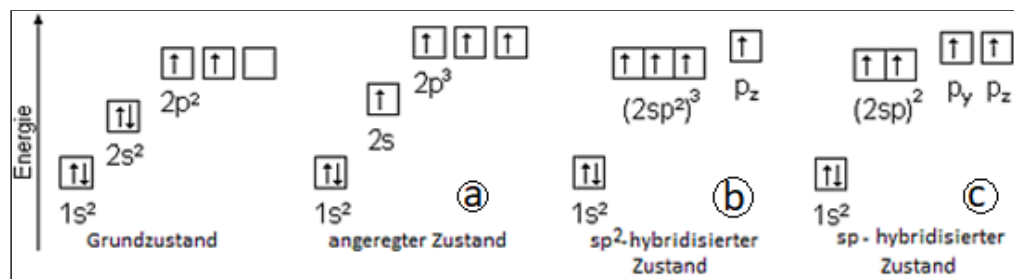
Experimentelle Untersuchungen zeigten, dass im Methanmolekül alle C-H-Bindungen gleichwertig sind. Die Bildung von vier Bindungen im Methanmolekül, die das Kohlenstoffatom eingeht, lässt sich aus der Elektronenkonfiguration des C-Atoms im sogenannten Grundzustand nicht so ohne weiteres verstehen. Deshalb schlug PAULING über einen angeregten Zustand den hybridisierten Modellzustand vor. Er nahm an, dass die drei senkrecht aufeinander stehenden 2p-Orbitale und das kugelsymmetrische 2s-Orbital beim angeregten C-Atom vier gleichwertige, energetisch etwas tieferliegende, sogenannte sp<sup>3</sup>-Hybridorbitale bilden. Sie haben etwa folgende Form: (90 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen).



a) Das eine 2s Orbital hybridisiert aus einem angeregten Zustand mit den drei 2p-Orbitalen und es entstehen vier energetisch gleichwertige sp<sup>3</sup>-Hybridorbitale. Im Überblick ergibt sich folgendes Schema:



Aus dem angeregten Zustand s.o. können durch Überlappung auch noch **weitere Hybridzustände** entstehen:



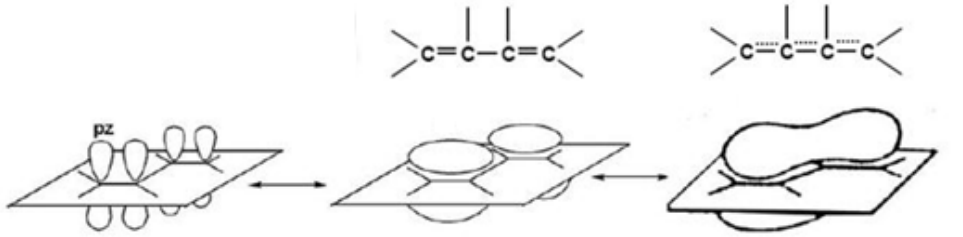
b) aus zwei 2p Orbitalen und einen 2s Orbital entstehen drei gleichwertige  $sp^2$ -Orbitale, das  $p_z$ -Orbital bleibt

c) aus einem 2p Orbital und einen 2s Orbital entstehen zwei gleichwertige  $sp$ -Orbitale, Die  $p_y$  und  $p_z$ -Orbitale bleiben außen vor.

<p style="text-align: center;"><b>Ethen:</b></p> <p>Die beiden C- und die 4 H-Atome liegen <b>in einer Ebene</b>:</p> <p>1) „<b><math>sp^2-sp^2</math>- Molekülorbital</b>“ gebildet von jeweils einem <math>2sp^2</math> Hybridorbital der zwei Kohlenstoffatome. <b><math>\sigma</math>-Bindung</b>. (Die anderen beiden <math>sp^2</math>-Orbitale eines jeden C-Atoms bilden jeweils mit den 1s-AOs der beiden H-Atome <math>sp^2-s</math> Molekülorbitale <math>s</math>-Bindungen)</p> <p>2) Das übrig gebliebene <math>2p_z</math>-Atomorbital des einen C-überlappt <u>oberhalb und unterhalb</u> der Ebene mit dem <math>2p_z</math>-Orbital des anderen C-Atoms zu <b>einer <math>\pi</math>-Bindung</b></p>	<p style="text-align: center;"><b>Ethin:</b></p> <p>Die beiden C- und die 2 H-Atome liegen <b>auf einer Linie</b>.</p> <p>1) „<b><math>sp-sp</math>- Molekülorbital</b>“ gebildet von jeweils einem <math>2sp</math> Hybridorbital der zwei Kohlenstoff-atome: <b><math>\sigma</math>-Bindung</b>. (Das andere <math>sp</math> Orbital jedes C-Atoms bildet mit dem 1s-AO des jeweiligen H-Atoms eine <math>s</math>-Bindung)</p> <p>2) Die beiden übrigen <math>2p</math>-Orbitale des einen C-Atoms überlappen <u>oberhalb und unterhalb</u> der Ebene und <u>vorne und hinten</u> mit den <math>2p</math> AOs des anderen C-Atoms zu <b>zwei <math>\pi</math>-Bindungen</b>.</p>
<p><b> Doppel-Bindung</b></p>	<p><b> Dreifach-Bindung</b></p>

### Konjugierte Systeme

#### Butadien



Die p Orbitale überlappen sich zu zwei Doppelbindungen

Die  $\pi$ -Elektronen konjugierter Doppelbindungen vermischen sich - sind **delokalisiert**

Tatsächlich sind die Bindungslängen der Doppelbindung länger als die einer isolierten Doppelbindung und die Einfachbindungen sind kürzer als ‚normale‘ Einfachbindungen. Das Molekül ist stabiler: Die Energie des Moleküls ist geringer als die theoretische Energie der Summe der Bindungen. Die Differenz nennt man: **Mesomerie-Energie**.

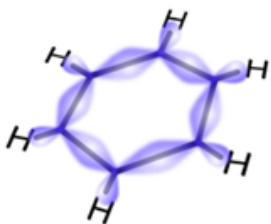
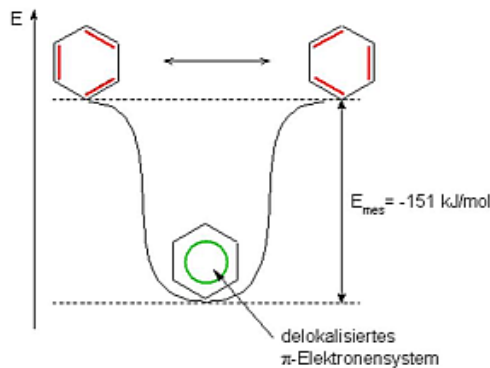
### Aromatische Systeme

Die Energie des Benzol-Moleküls ist viel niedriger (um 151 kJ/mol, die Mesomerieenergie) als das von den einzelnen Bindungsenergien zu erwarten ist.

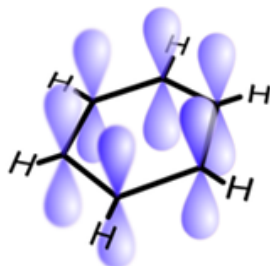
Die C-C Bindungslängen **sind alle gleich** und kürzer als Einfachbindungen aber länger als Doppelbindungen.

Die 6 Doppelbindungselektronen sind im Kreis delokalisiert.

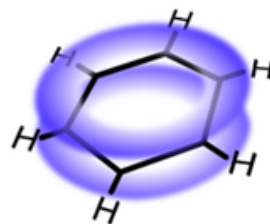
Der „**Ringstrom**“ lässt sich NMR spektroskopisch nachweisen.



Benzol  
6  $sp^2-sp^2$ - $\sigma$ -Bindungen C-C  
6  $sp^2-s$ -  $\sigma$ -Bindungen C-H



Benzol  
6 p-Atomorbitale



Benzol  
delokalisierte  
 $\pi$ -Orbitalwolke

**Allgemein:** **Hückel-Regel**

für Aromaten Eine ungesättigte, ringförmige Substanz ist dann ein Aromat, wenn für die Zahl der  $\pi$ -Elektronen in ihrem konjugierten Ringsystem gilt:  $Z = (4n + 2)$   $\pi$ -Elektronen mit  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  Dann ist Verbindung **planar**.

Autor: [Ka](#) Anmerkung: [Sehr vereinfacht](#)