



UNIVERSITÄT ROSTOCK



Vorlesung *Allgemeine Chemie* (CH01)

Für Studierende im B.Sc.-Studiengang Chemie

Prof. Dr. Martin Köckerling

Arbeitsgruppe Anorganische Festkörperchemie

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, Institut für Chemie



Wiederholung der letzten Vorlesungsstunde:

Thema: Chemische Bindungen

Mehrfachbindungen, Doppelbindungen, Konformation, Newman-Projektion, Dieder-Winkel, Dreifachbindung, Bindungsgrad, Bindungslänge, Doppelbindungsregel, VSEPR-Theorie, Hybridisierung

Thema heute: Chemische Bindungen - Molekülorbitaltheorie.



Beschreibung chemischer Bindungen mittels quantenchemischer Verfahren

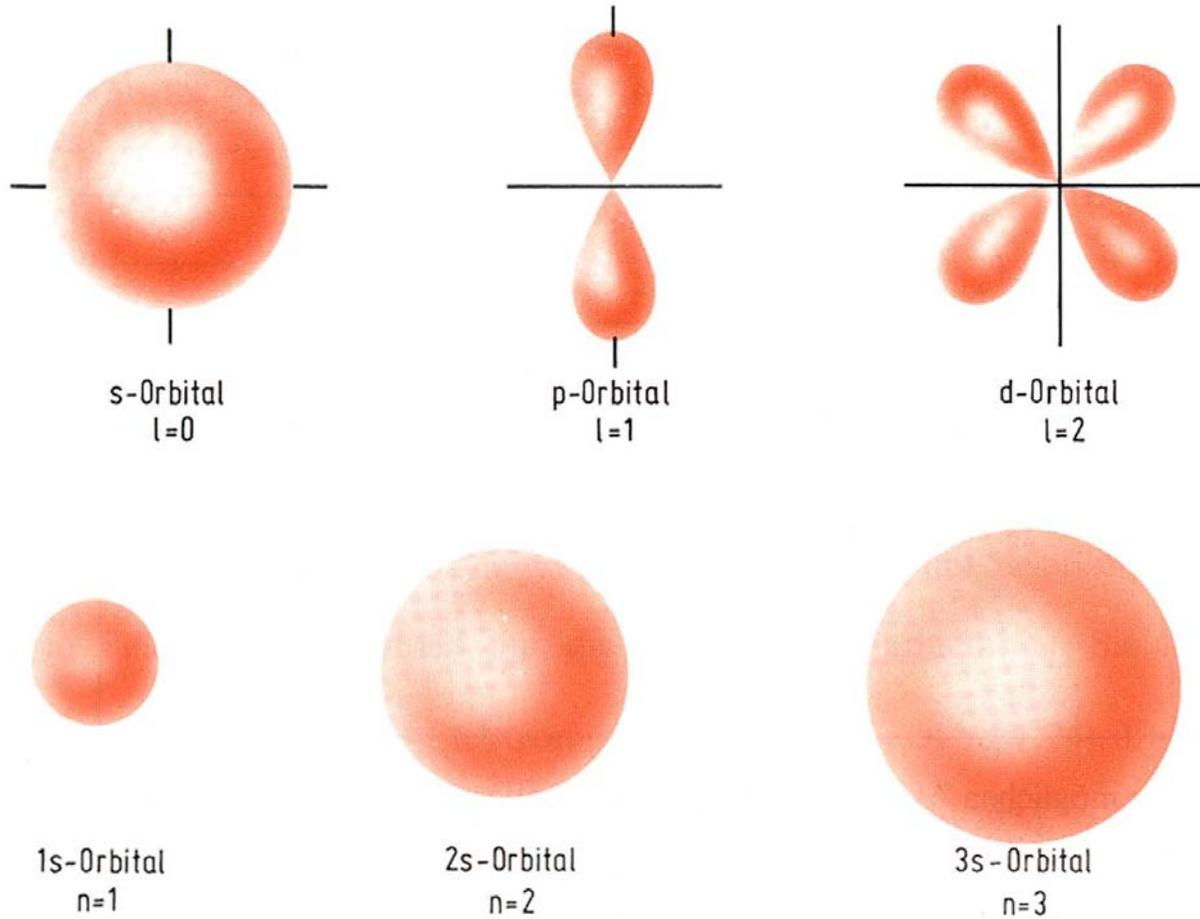
Die Molekülorbital-Theorie (MO-Theorie)

Betrachtet werden Gesamtwellenfunktionen des Moleküls → *Molekülorbitale*

Man kann näherungsweise Molekülorbitale erhalten durch Linearkombinationen (Addition und Subtraktion) der Atomorbitale (LCAO-Methode: **L**inear **C**ombination of **A**tomic **O**rbitals)

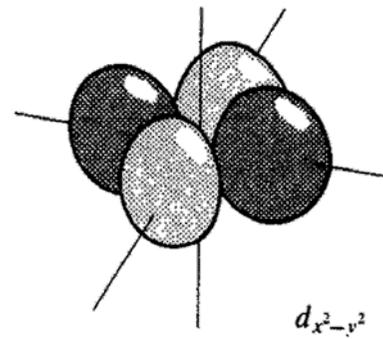
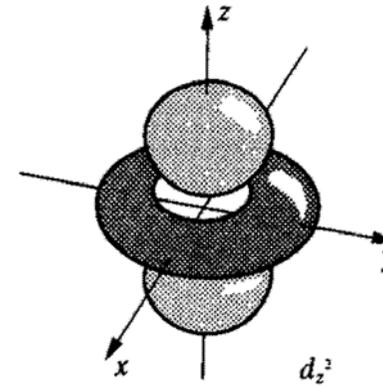
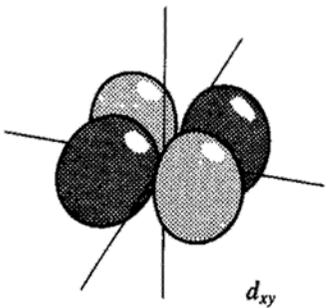
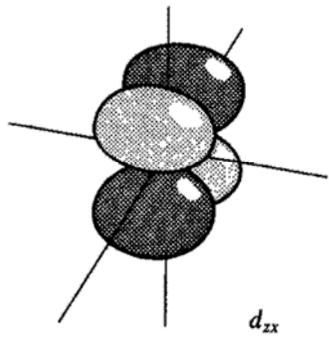
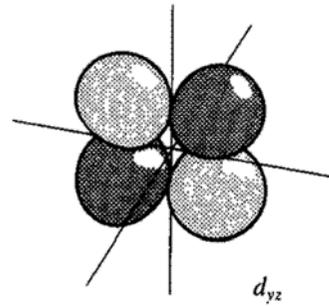


Wiederholung: Atomorbitale



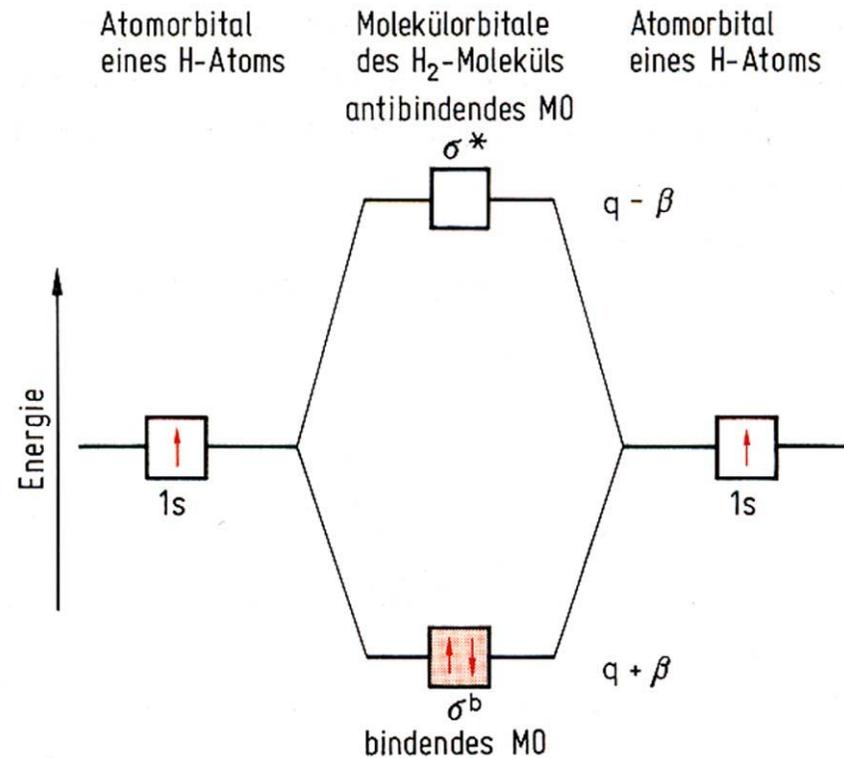
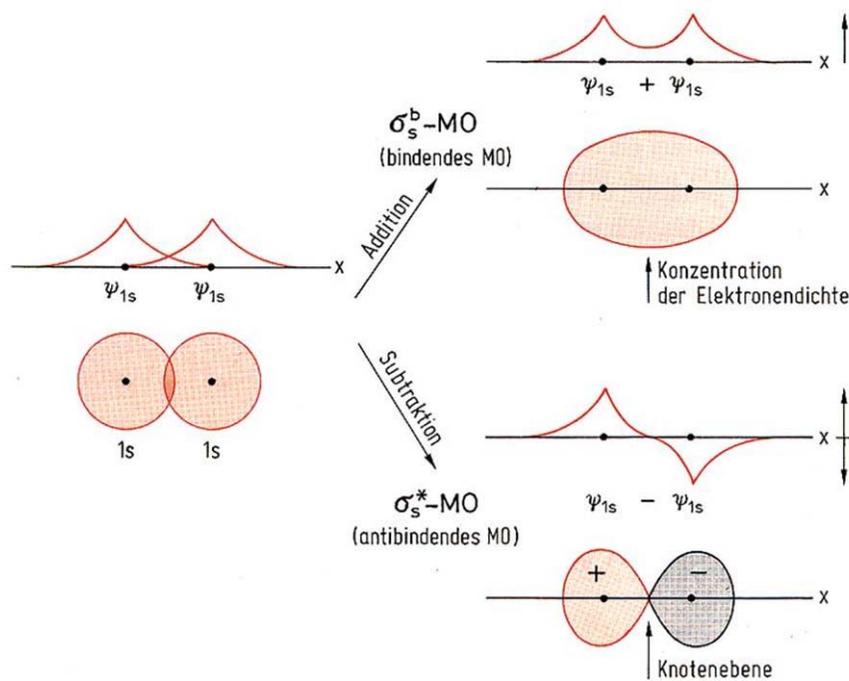


d-Orbitale



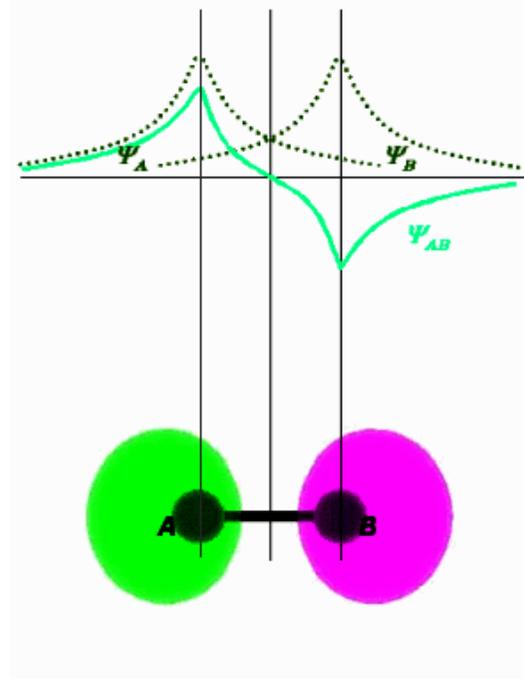
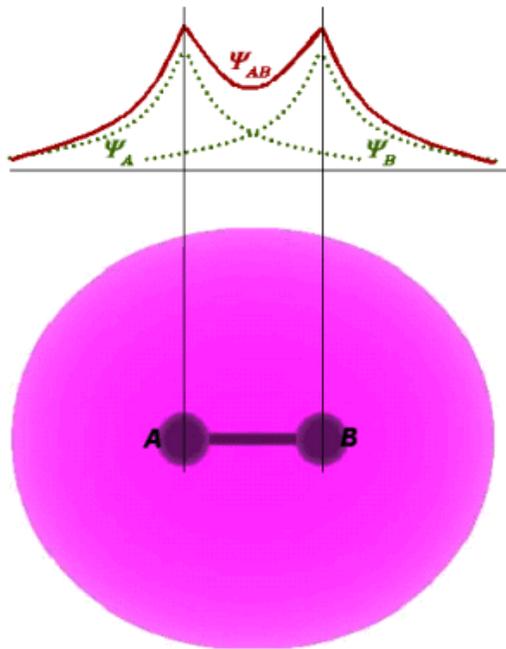


Molekülorbitale werden durch lineare Kombination (Addition und Subtraktion) von Atomorbitalen gebildet (LCAO-Linear Combination of Atomic Orbitals):



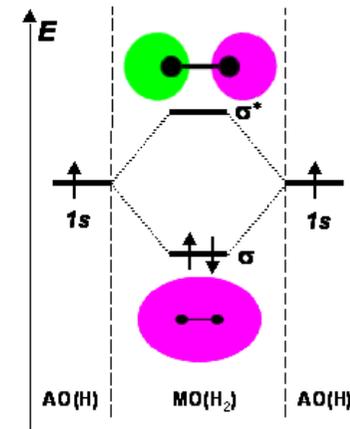
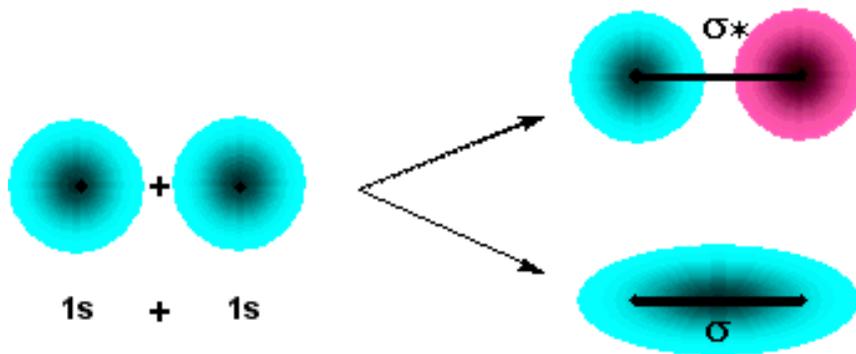


Durch Linearkombinationen entstehen bindende und antibindende (lockernde) Molekülorbitale, die unterschiedliche Energien haben. Bindende MO's liegen energetisch tiefer als zu zugrundeliegenden Atomorbitale \rightarrow stabilisierender Effekt bei Ausbildung einer Bindung!





Die Besetzung von Molekülorbitalen erfolgt nach steigender Energie unter Berücksichtigung der Hund'schen Regel und des Pauli-Prinzip's.

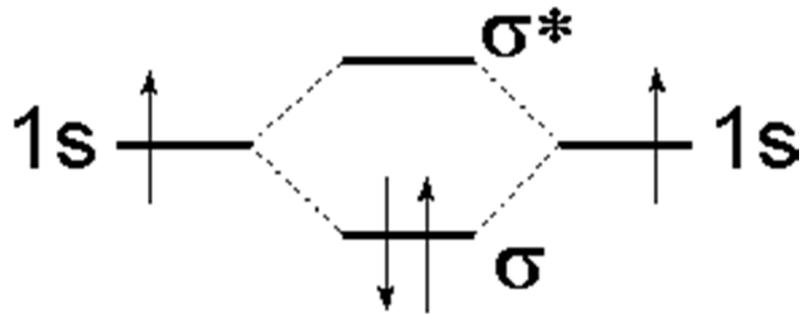


Ist das MO entlang der Kernverbindungsachse rotationssymmetrisch, so spricht man von bindenden oder antibindenden σ oder σ^* Orbitalen.

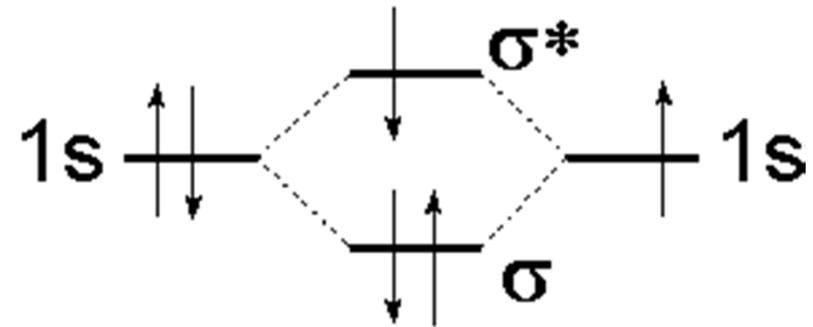
Die LCAO-Methode ist eine mathematische Vorschrift, die Molekülorbitale liefert.

Für die Kombination von AO's ist zu beachten:

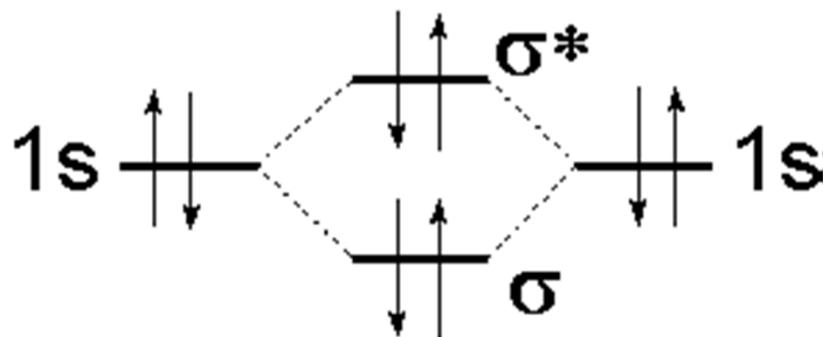
- Die Energien der zu kombinierenden AO's dürfen sich nicht zu stark unterscheiden
- Die beteiligten AO's müssen bzgl. der Kernverbindungsachse gleiche Symmetrie aufweisen.



H_2 -Molekül



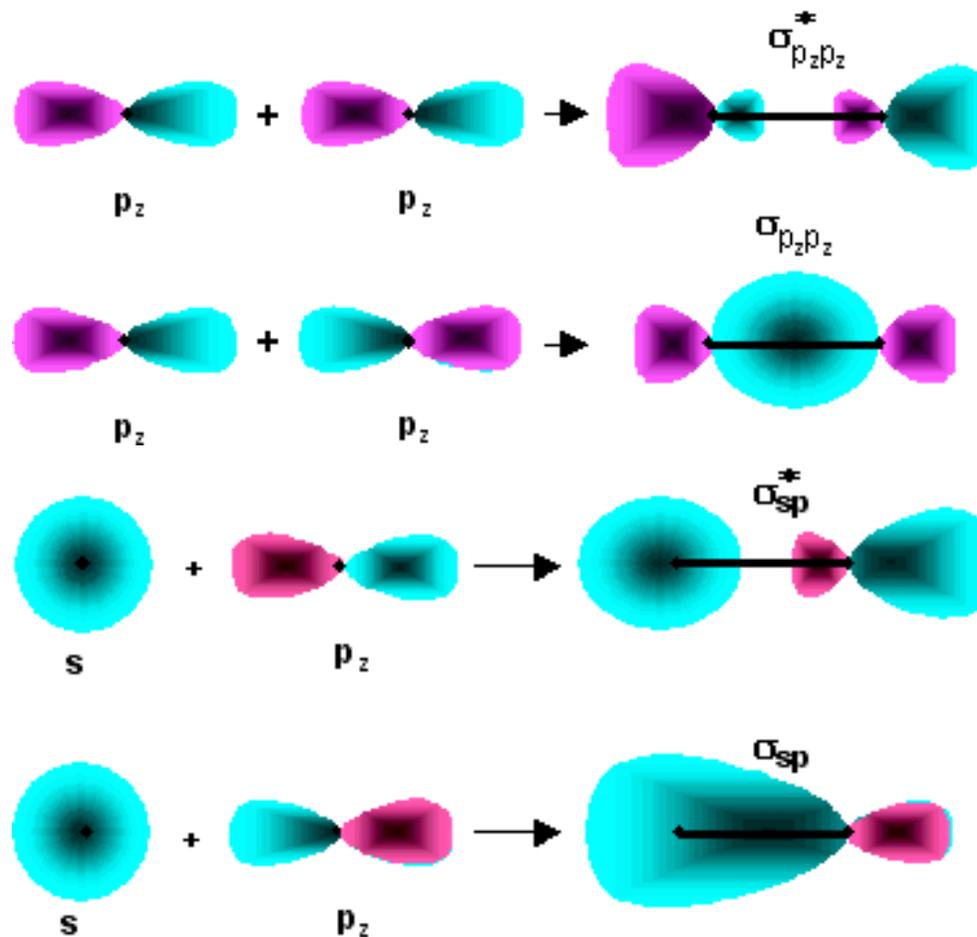
He_2^+ -Molekül

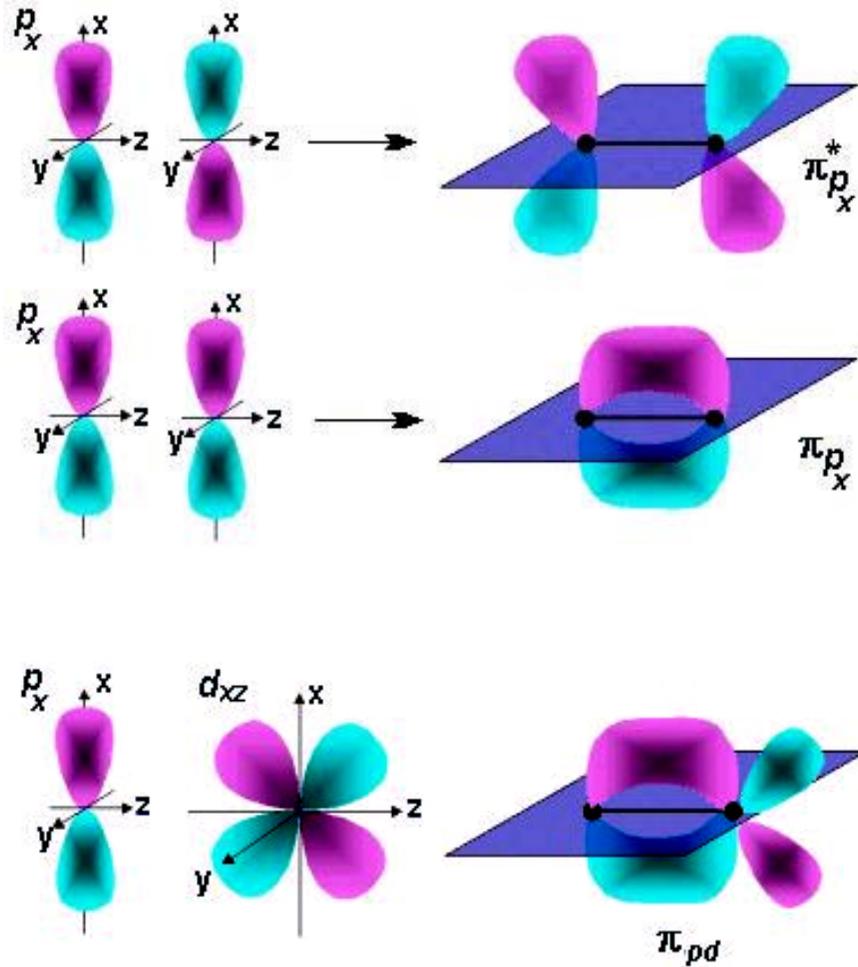


„ He_2 -Molekül“



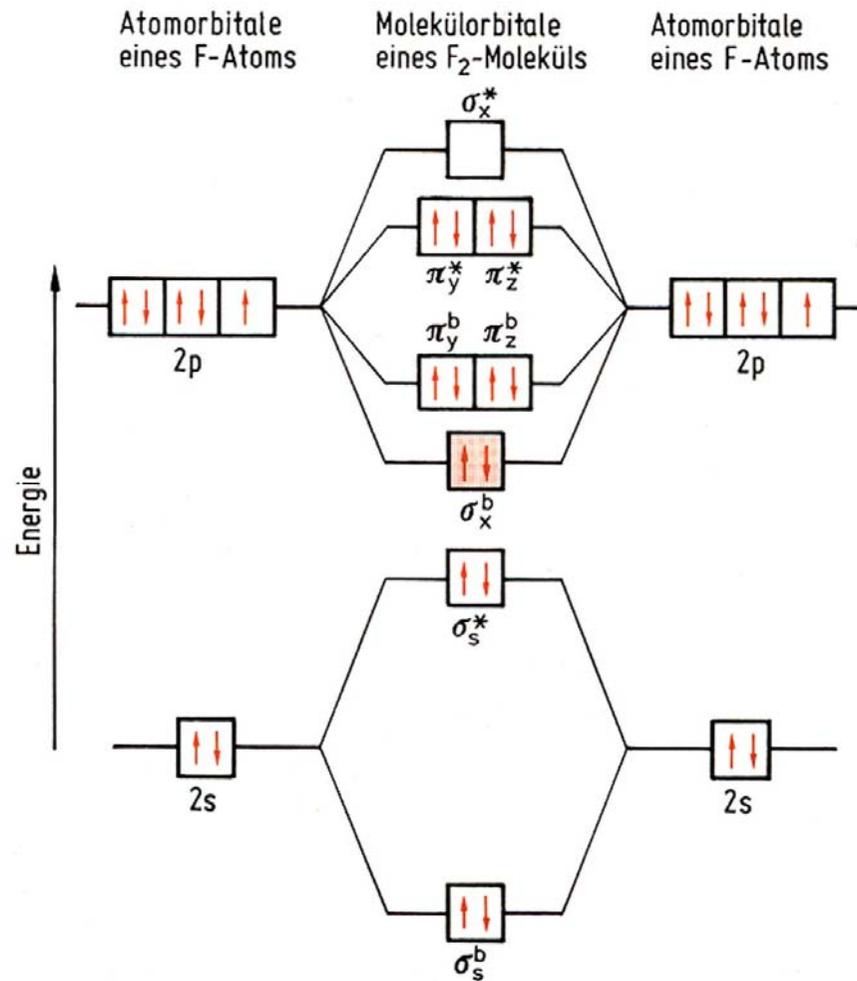
Je nach Art der beteiligten AO's ergeben sich unterschiedliche Arten von Molekülorbitalen:





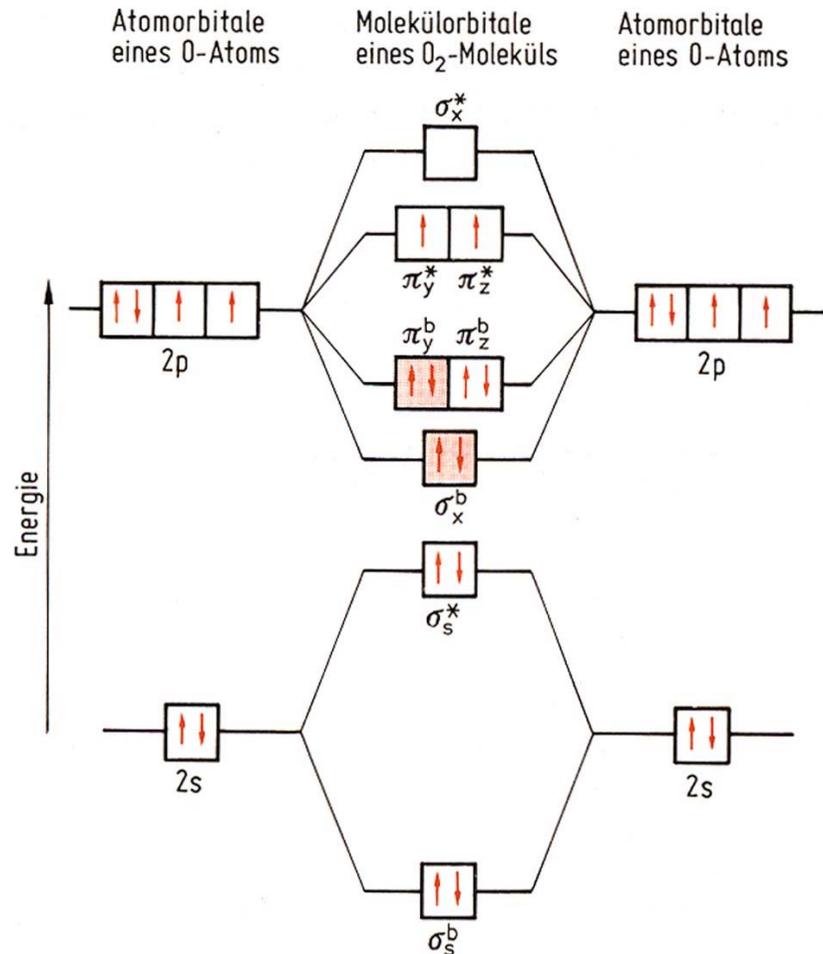


Molekülorbitaldiagramm für das Fluormolekül:





Molekülorbitaldiagramm für das Sauerstoffmolekül:



Im höchst-besetzten MO sind 2 ungepaarte Elektronen → Paramagnetismus!

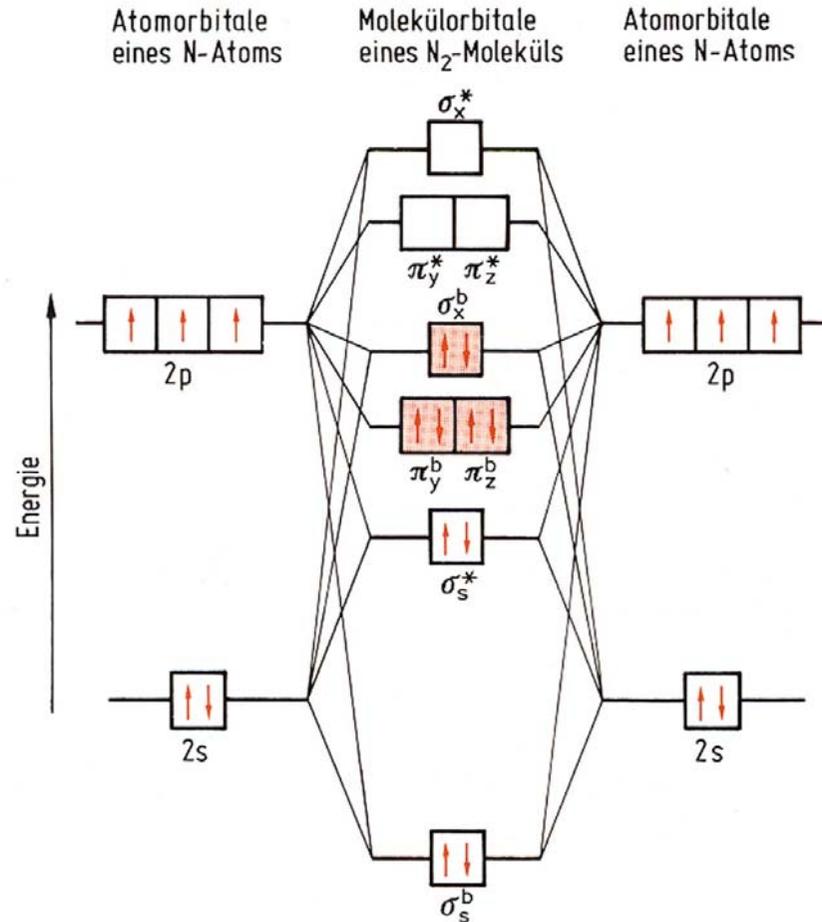
Bindungsordnung:

$BO = \frac{1}{2} [\text{Elektronen (in bindenden MO's)} - \text{Elektronen (in antibindenden MO's)}]$

Entspricht Anzahl der bindenden Elektronenpaare in Lewis-Formeln

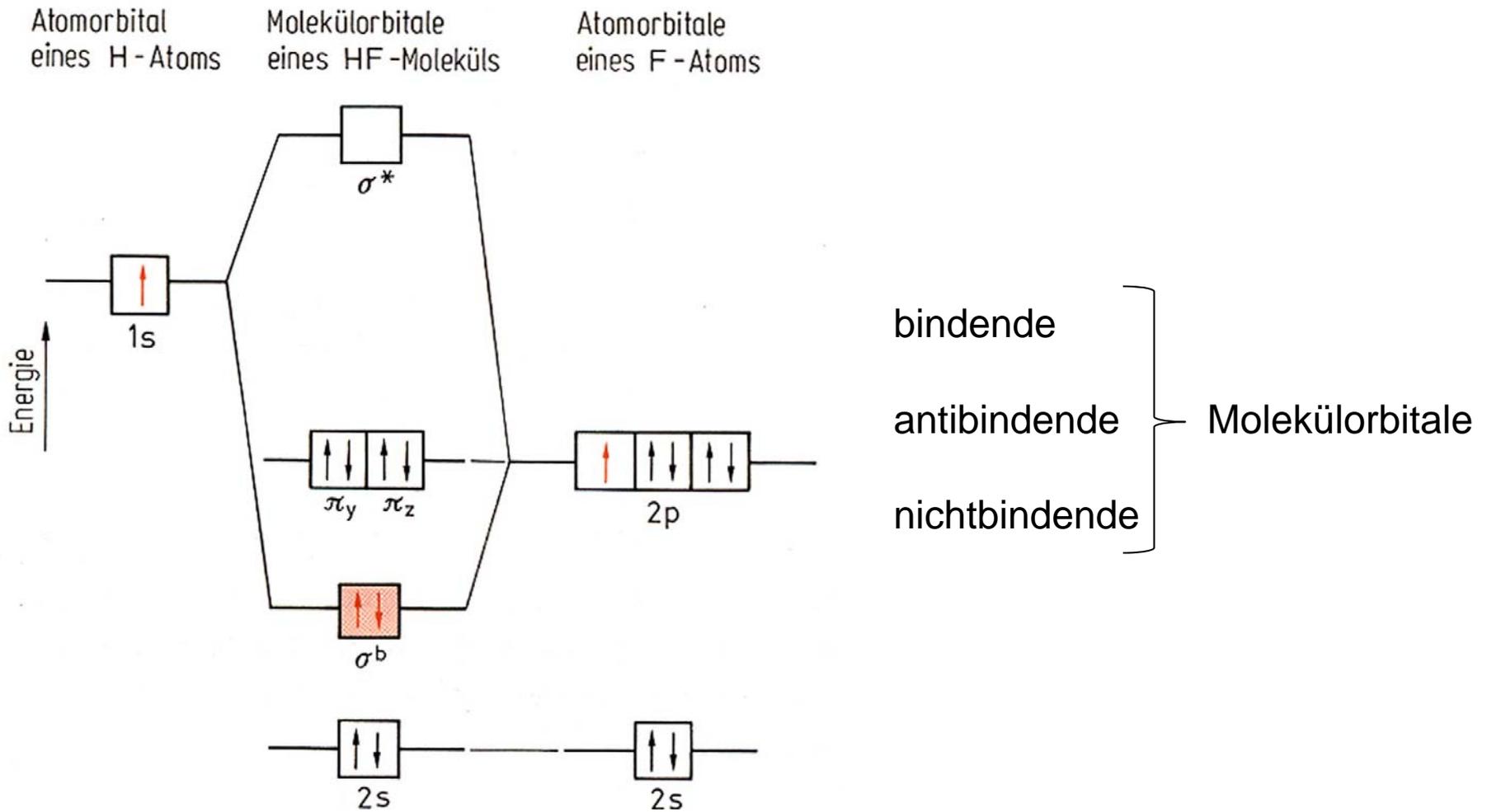


Molekülorbitaldiagramm für das Distickstoffmolekül:



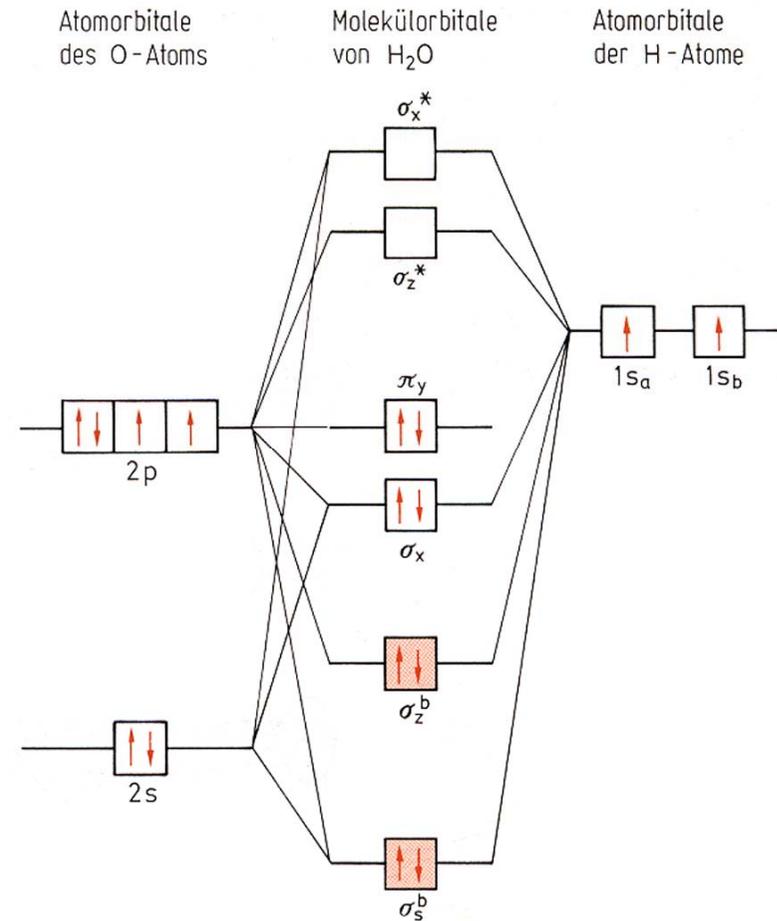
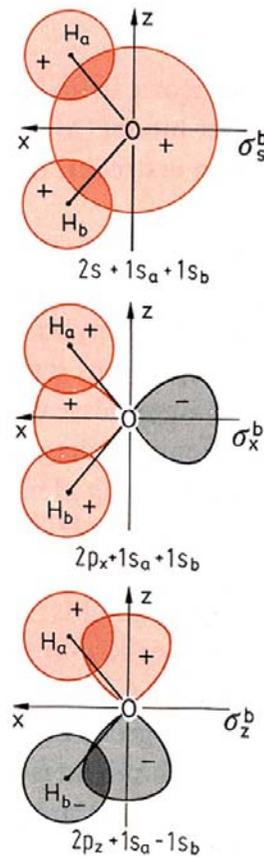
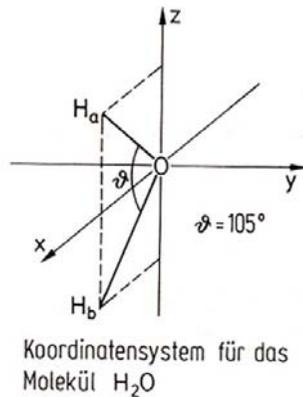


Molekülorbitaldiagramm für das Fluorwasserstoffmolekül:





Molekülorbitaldiagramm für das Wassermolekül:





Pi-Molekülorbitale des Benzolmoleküls:

