

ÜS 6 - Quantenchemie

Quantenmechanik und Quantenchemie ist ein Thema in ACOC I, wo die Vorlesung und das Skript einen wirklich überfordern, aber glücklicherweise sind die ganzen mathematischen Herleitungen zu CAO nicht wirklich klausurrelevant (richtiges Verständnis ohnehin erst mit PC III und OC IV)

Orbitale

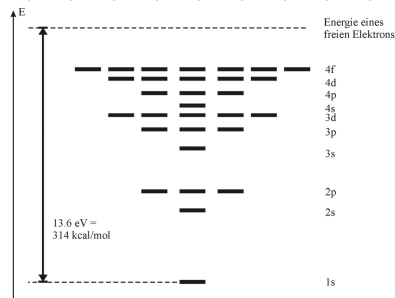
In der Schule wird häufig das Schalenmodell für die Elektronenkonfiguration gelehrt. Die bessere Beschreibung erfolgt durch Orbitale. Quantenmechanisch lassen sich Moleküle nur sehr eingeschränkt berechnen. (Analytisch lösbar nur mit H-Atom, H_2^+ -Molekül numerisch, Rest nicht). Da sich die exakten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten eines Elektrons (Orbital) nur für H berechnen lässt, gehen wir einfach davon aus, dass die Orbitale der schwereren Elemente gleich aussehen.

Jedes Elektron im Atom hat vier Quantenzahlen, die für jedes Elektron unterschiedlich sein müssen.

Orbitale mit derselben Energie heißen "entartet"

Hauptquantenzahl	n	Schale	$n = 1, 2, 3, \dots$
Nebenquantenzahl	l	Orbitalform	$l = 0, 1, \dots, n-1$
Magnetische Quantenzahl	m_l	Orbitalausrichtung	$m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$
Spinquantenzahl	s	Elektronenspin	$s = \pm 1$ (Deswegen passen $2e^-$ in ein Orbital)

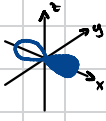
	n	l	m	Symbol
vierte Schale	4	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	4f
		2	-2, -1, 0, 1, 2	4d
		1	-1, 0, 1	4p
		0	0	4s
dritte Schale	3	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d
		1	-1, 0, 1	3p
		0	0	3s
zweite Schale	2	1	-1, 0, 1	2p
		0	0	2s
erste Schale	1	0	0	1s



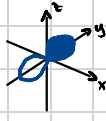
In der OC interessieren uns eigentlich nur s und p Orbitale.



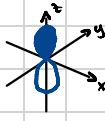
s



p_x



p_y



p_z

Elektronenkonfiguration

Die Elektronenkonfiguration eines Elements ist einfach eine Auflistung der befüllten Orbitale und mit wie vielen Elektronen es befüllt ist.

H: $1s^1$

Li⁺: $1s^2$

He: $1s^2$

Ne⁴⁺: $1s^2 2s^2 2p^4$

Li: $1s^2 2s^1$

B⁻: $1s^2 2s^2 2p^2$

Be: $1s^2 2s^2$

N³⁻: $1s^2 2s^2 2p^6$

B: $1s^2 2s^2 2p^1$

C: $1s^2 2s^2 2p^2$

N: $1s^2 2s^2 2p^3$

O: $1s^2 2s^2 2p^4$

F: $1s^2 2s^2 2p^5$

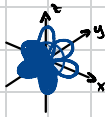
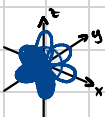
Ne: $1s^2 2s^2 2p^6$

LCAO ("Linear Combination of Atomic Orbitals")

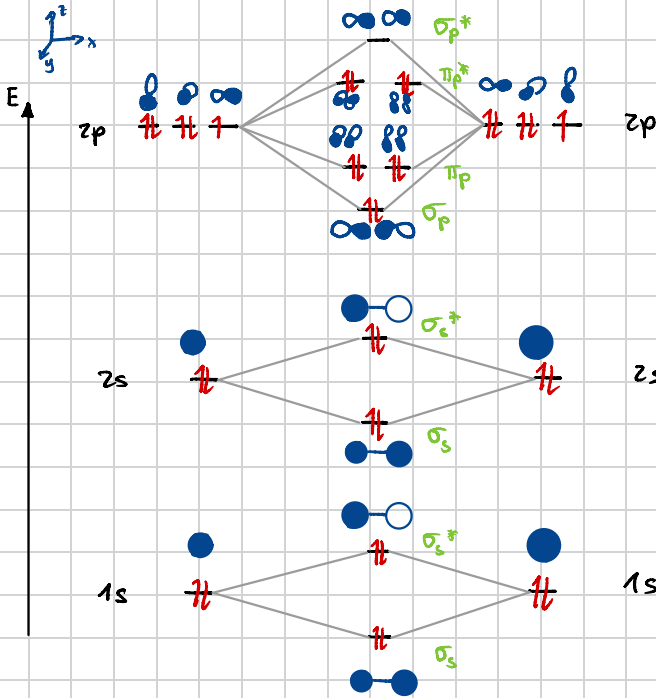
LCAO ist ein Thema, was im ersten Jahr in ACAC II, ACOC I und ACPC I angesprochen wird, aber wirklich geprüft wird es erst im 3. Semester in AC I. (Also sich nicht all zu sehr von der mathematischen Herleitung abschrecken lassen.)

Grundsätzlich gehts darum Molekülorbitale (MO) qualitativ konstruieren zu können. Dazu gehen wir davon aus, dass zwei Atome nebeneinander liegen und ihre Orbitale wechselwirken. LCAO ist die einfachste Kombinationsmöglichkeit und es gilt eine extrem wichtige Regel: **"Nur gleichsymmetrische Orbitale interagieren miteinander."**

Bsp.:



Wir konstruieren ein MO-Schema für F_2



Bindungsordnung:

$$B.O. = \frac{\# \text{ bind. } e^- - \# \text{ antibind. } e^-}{2}$$

$$= \frac{10 - 8}{2} = 1$$

$|\bar{F}-\bar{F}|$ passt ✓

3 MO-Theorie, Aromatizität (30 Punkte)

3.1 LCAO-Modell (20 Punkte)

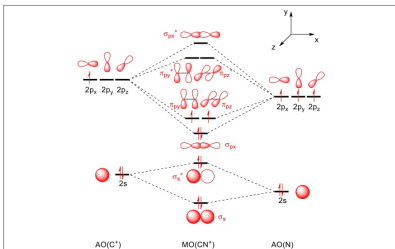
In dieser Aufgabe wird das Kation CN^+ behandelt.

- a) Geben Sie die Elektronenkonfiguration von C^+ (Ordnungszahl 6) und N (Ordnungszahl 7) an. (2 Punkte)

$C^+: 1s^2 2s^2 2p^1$

$N: 1s^2 2s^2 2p^3$

- b) Zeichnen Sie die Atomorbitale (AO) für C^+ und N in das Diagramm (unten) ein. (4 Punkte)
c) Zeichnen Sie die MO (Molekülorbitale) für das Kation CN^+ im Diagramm ein und benennen Sie diese. (8 Punkte)
d) Füllen Sie die Elektronen zunächst in die jeweiligen Atomorbitale ein und anschließend auch in die Molekülorbitale. (3 Punkte)



- e) Berechnen Sie die Bindungsordnung für das Kation CN^+ . (1 Punkt)

$$BO = \frac{6-2}{2} = 2$$

- f) Zeichnen Sie die Lewis-Struktur des Kations CN^+ und dessen Resonanzstrukturen. (2 Punkte)

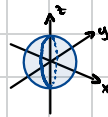


Prüfung 823

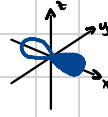
Hybridisierung

Hybridisierung ist ein sehr gutes Konzept, um Reaktivitäten und Molekülgeometrie in OC zu erklären, aber es ist wichtig im Hinterkopf zu behalten, dass es nur ein Modell ist und diese Hybridorbitale nicht existieren. Es funktioniert für OC deswegen so gut, da wir vorrangig Elemente der ersten beiden Perioden betrachten und dort Geometrie und elektronische Struktur entsprechend eingeschränkt sind.

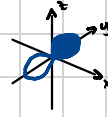
In der 2. Periode haben wir 4 Orbitale: (s ist tiefer in Energie als p)



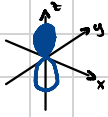
2s



2p_x



2p_y

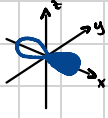


2p_z

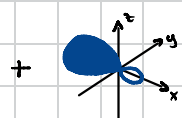
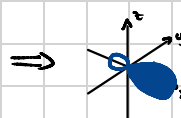
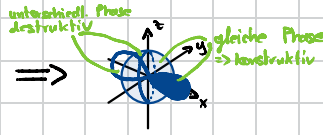
Der Einfachheit halber, wollen wir, dass alle Orbitale dieselbe Energie (entartet) haben. => "Wir kombinieren jedes p mit 1/3 s"



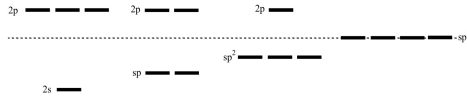
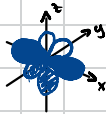
2s



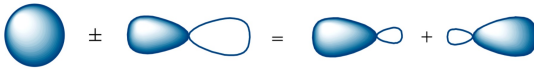
2p_x



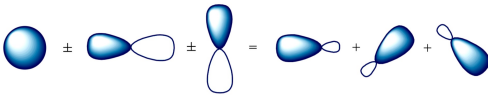
Gesamt:



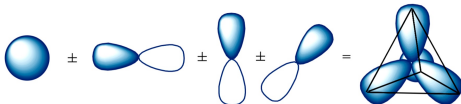
sp



sp²



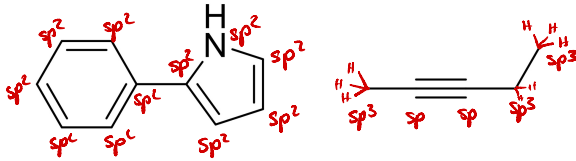
sp³



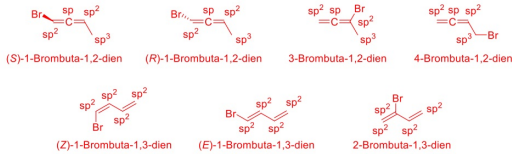
In der Klausur leiten wir die Hybridisierung an der Struktur ab:

meist: 2 Bindungspartner sp
 3 Bindungspartner sp^2
 4 Bindungspartner sp^3

sp^3 tetraedisch
 sp^2 planar
 sp linear

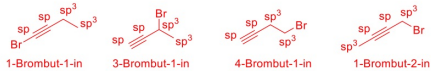


Isomer 1 – Strukturformel, Hybridisierung:



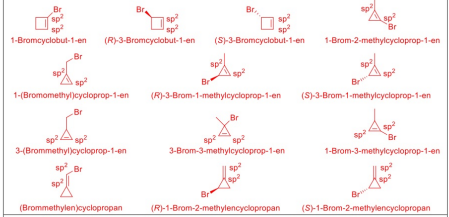
Name: (eine der obigen Diene wird akzeptiert, Stereodeskriptoren sind nicht nötig)

Isomer 2 – Strukturformel, Hybridisierung:



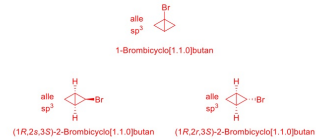
Name: (eine der obigen Alkine wird akzeptiert, Stereodeskriptoren sind nicht nötig)

Isomer 3 – Strukturformel, Hybridisierung:



Name: (eine der obigen Cycloalkene wird akzeptiert, wo nicht angegeben, Hybridisierung ist sp^3 , Stereodeskriptoren sind nicht nötig)

Isomer 4 – Strukturformel, Hybridisierung:



Name: (eine der obigen bicyclischen Verbindungen wird akzeptiert, Stereodeskriptoren sind nicht nötig)