

Übungsaufgaben - Quantenchemie

1. Die Elektronenkonfiguration für Si lautet: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$. Gemäss Tetraedermodell der Valenzschale sieht die Elektronenverteilung folgendermassen aus:

• $\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{Si}}}$ • In welchen Orbitalen befinden sich die vier einzelnen Elektronen und welcher Widerspruch besteht zwischen dem quantenchemischen Modell und dem Tetraedermodell?

2. Das Energieniveauschema von F_2 in Kurzschreibweise lautet: $1s\sigma^2 1s\sigma^{*2} 2s\sigma^2 2s\sigma^{*2} 2p\sigma^2 2p\pi^4 2p\pi^{*4}$

a) Welche maximale negative Ladung dürfte das F_2 -Teilchen (nicht das F-Atom) annehmen, ohne dass es in die Atome zerfällt?

b) Welche maximale positive Ladung dürfte das F_2 -Teilchen annehmen, ohne dass es in die Atome zerfällt? Mit jeweiliger Begründung.

3. Warum ist in einer Dreifachbindung zwischen Atomen der zweiten Periode immer eine σ -Bindung vorhanden, bei Doppelbindungen unter Umständen nicht?

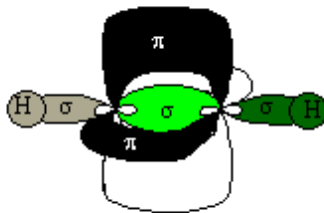
4. Gegeben ist das Molekül $CH_2CHCHCH_2$.

a) Welche Hybridisierung müsste an den C-Atomen vorgenommen werden, damit die korrekte Geometrie erreicht wird?

b) Was spricht dafür, dass dieses Molekül farbig ist? Falls es aber nicht farbig wäre, was wäre der Grund?

c) Versuchen Sie den Aufenthaltsort der Elektronen in allen bindenden π -Orbitalen im delokalisierten π -System des obigen Moleküls mit Hilfe der Grafiken G8 und G9 zu zeichnen. (Nicht einfach die Darstellungen aus den Grafiken abzeichnen, sondern die daraus resultierenden Aufenthaltsorte.)

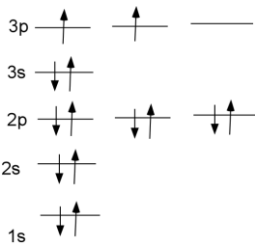
5. Wie viele Elektronen lassen sich in den nebenstehend abgebildeten Molekülorbitalen maximal unterbringen? Herleitung muss ersichtlich sein

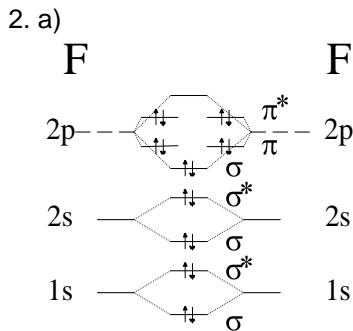


6. Aus welchem Grund leitet Natrium den elektrischen Strom? Falls es mehrere Gründe gibt, müssen alle angegeben werden. Zur Beantwortung der Frage ist ein Mikrokristall aus zwei Na-Atomen zu konstruieren. Dabei können die entstehenden MO als Grenzen der bei grösseren Kristallen auftretenden Energiebänder betrachtet werden. Mit Hilfe des vollständigen Bändermodells ist die obige Frage zu beantworten.

7. Aus welchem physikalischen Grund bindet eigentlich ein bindendes Molekülorbital zwei Atome zusammen? Max. 2 Sätze.

Lösungen:

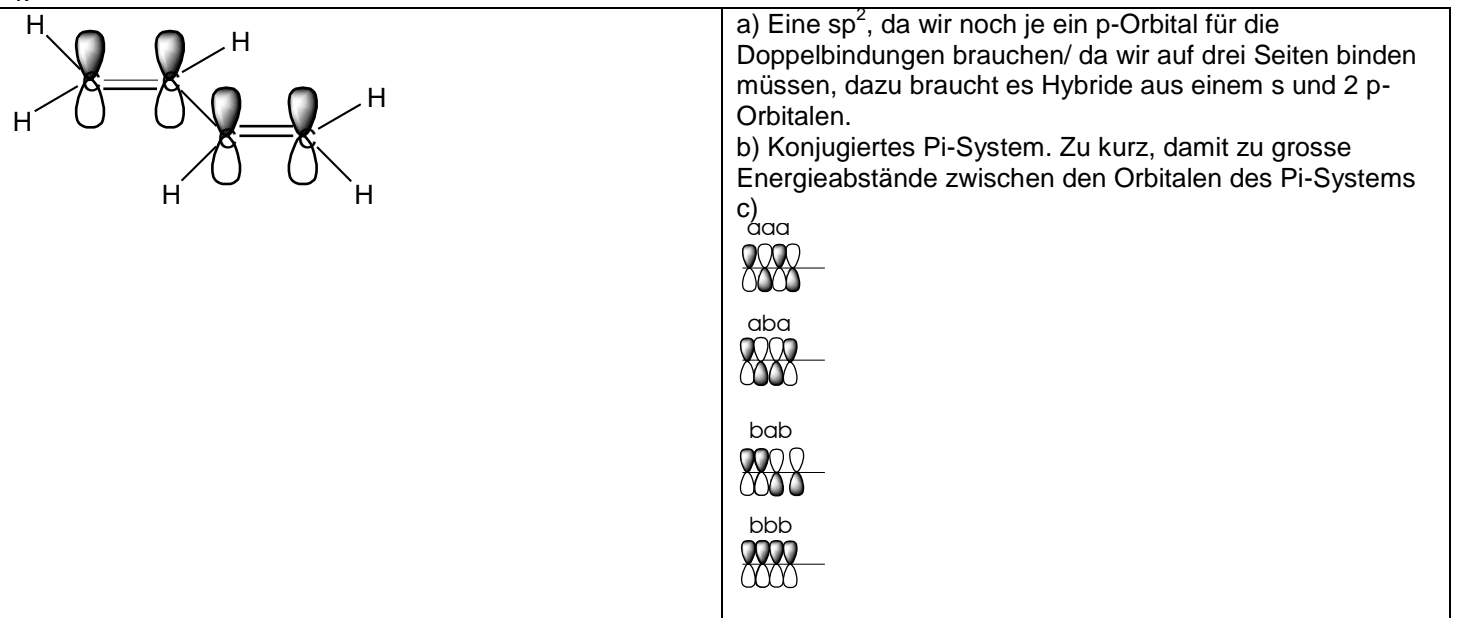
1.  Sie befinden sich in den 3s und 3p Orbitalen. Der Widerspruch liegt darin, dass gemäss der nebenstehenden Aufstellung zwei der Elektronen ein Pärchen bilden sollten. Statt vier einzelner Punkte sollten um Si ein Strich und zwei Punkte gezeichnet werden.



- b) Eins negativ (ein zusätzliches e^-), damit wäre das oberste antibindende Orbital nur halb besetzt und die Konstellation gerade noch bindend..
 c) 10^+ (minus 10), dann wären alle bindenden Pi-Orbitale leer.

3. Je nach Reihenfolge im Energieniveauschema der Molekülorbitale ist es möglich, dass die beiden bindenden π -Orbitale tiefer liegen als das bindende σ -Orbital und bei einer Doppelbindung werden dann nur diese beiden benötigt. Bei einer Dreifachbindung kommen notgedrungen alle drei zum Zuge.

4.



The diagram shows the orbital overlap in ethene (C_2H_4). On the left, the sigma bond is formed by the overlap of sp² hybrid orbitals from the two carbon atoms, and the pi bond is formed by the overlap of unhybridized p orbitals. On the right, four configurations of pi orbitals are shown, labeled a, b, and c):

- aaa: All three p orbitals on the same side of the carbon-carbon bond.
- aba: The first and third p orbitals are on the same side, while the second is on the opposite side.
- bab: The second and third p orbitals are on the same side, while the first is on the opposite side.
- bbb: All three p orbitals on the opposite side of the carbon-carbon bond.

5. Man erkennt drei σ - und zwei π -Orbitale. Sie enthalten je zwei Elektronen, also 10.
6. Grundsätzlich leiten alle Metalle, weil die Leitungsbänder mit den Valenzbändern überschneiden. In diesem Fall ist aber auch das 3s Valenzband nur halb voll, so dass auch hier Elektronen in andere Orbitale wechseln können.
7. Die potentielle Energie der Elektronen wird durch die Lage des bindenden Orbitals gesenkt. Weil es zwischen zwei positiven Zentren liegt, gibt es eine elektrostatische Anziehung.