

3 Mehrelektronensysteme

3.1 Lernziele

Die Schülerinnen und Schüler

1. sind in der Lage, den Aufbau des Periodensystems nachzuvollziehen.
2. können die Elektronenverteilung eines Atoms angeben, wenn Sie seine Elektronenanzahl kennen.
3. können erklären, wie aus Atomorbitalen Molekülorbitale gebildet werden.
4. sind in der Lage, die räumliche Darstellung von Molekülorbitalen zu beschreiben.
5. ist Ihnen möglich, nach dem Studium des vorliegenden Texts die Elektronenkonfiguration aller erwähnten Beispiele anzugeben.
6. können von allen erwähnten Beispielen die Bindungsordnung ausrechnen. Sie kennen somit die ungefähren Stabilitätseigenschaften und Energien der einzelnen behandelten Moleküle qualitativ.

3.2 Die Wellenfunktionen in höheren Atomen: Atomorbitale

Kennt man die Wellenfunktionen für alle möglichen Energiezustände des Elektrons im Wasserstoff-Atom, so lassen sich damit Energien, Elektronendichten, radiale Elektronendichten, Aufenthaltswahrscheinlichkeiten usw. berechnen. Die auf diese Weise erhaltenen Ergebnisse stimmen mit den gemessenen Werten exakt überein. „Die Wellenfunktionen des Wasserstoff-Atoms sind observabel“, wie sich die Naturwissenschaftler ausdrücken. Anders sieht es bei den Mehrelektronensystemen aus. Schon beim Helium-Atom, das dem Wasserstoff-Atom im Periodensystem folgt, können die Wellenfunktionen für die beiden Elektronen nicht mehr exakt mathematisch berechnet werden. Dies gilt generell für alle Mehrelektronensysteme. Um trotzdem zu messbaren Ergebnissen zu kommen, wird das Mehrelektronensystem zu einem Eielektronensystem reduziert. Man beginnt dabei im betreffenden Atom mit dem energieärmsten Elektron, das sich im Einflussbereich (im Potenzial) des Atomkerns samt allen restlichen Elektronen befindet (effektives Potenzial). In einem aufwendigen Verfahren (Hartree-Fock-Verfahren) verändert man eine „willkürlich“ angenommene Wellenfunktion so lange, bis die Energie, die sich damit berechnen lässt, ein Minimum beträgt. Das dabei erhaltene Orbital, eine Eielektronenwellenfunktion, kann dann für die beiden energieärmsten Elektronen des Atoms verwendet werden. Ein entsprechender weiterer Schritt liefert ein Orbital, das zwei Elektronen mit dem nächsthöheren Energiezustand beschreibt usw. Die aus diesen Orbitalen berechneten Energien und Elektronendichten sind jedoch nicht observabel, d. h. sie lassen sich experimentell nicht erfassen. Kombiniert man alle Orbitale auf geeignete Weise (mathematisch) miteinander, so ist das Ergebnis eine Gesamtwellenfunktion für das betreffende Atom. Die daraus berechnete Gesamtenergie und Gesamtelektronendichte entsprechen nun den experimentellen Werten.

Die Orbitale von Mehrelektronensystemen sind den Wellenfunktionen des Wasserstoff-Atoms sehr ähnlich in Bezug auf Anzahl und Art der Knotenflächen, die räumliche Form sowie die An-

zahl Wellenfunktionen pro Elektronenschale. Man hat deshalb die Bezeichnungen für die Wellenfunktionen vom Wasserstoff-Atom (s, p, d und f) für die Mehrelektronensysteme übernommen. Obwohl die theoretisch gefundenen Orbitalenergien nicht messbar sind, dürften sie doch in etwa den „tatsächlichen“ Werten entsprechen. Ihre energetische Abfolge ist in Abb. 3.2 ersichtlich. Dabei fällt auf, dass die Orbitale eines Hauptenergieniveaus (einer Elektronenschale) nicht alle die gleiche Energie besitzen, wie dies beim Wasserstoff-Atom der Fall ist. Die Orbitale sind nicht entartet (Abschnitt 1.4). Die Anordnung in Abb. 3.1 entspricht der Reihenfolge, in der die Elektronen die Elektronenschalen eines Atoms auffüllen.



Abb. 3.1 Reihenfolge, in welcher die verschiedenen Orbitale mit Elektronen gefüllt werden

Werden nun die Orbitale gemäss dem Pauli-Prinzip (maximal 2 Elektronen pro Orbital mit jeweils umgekehrtem Spin) und der Hundschen Regel (energetisch gleiche Orbitale erhalten zuerst alle je ein Elektron) besetzt, so können sich dabei die Orbitalenergien ändern. Einerseits nimmt mit fortschreitender Protonenzahl die Ladung der Atomkerne zu. Dadurch werden die Elektronen stärker angezogen, ihre Energie verringert sich. Andererseits steigt sie mit Zunahme der Anzahl Elektronen, da diese sich gegenseitig abstossen. Dies hat zur Folge, dass z. B. das nicht besetz-

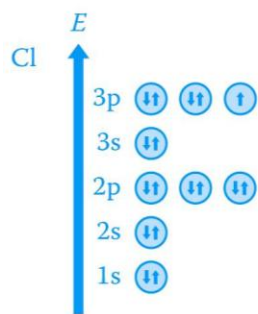
te ψ_{3d} Orbital energiereicher ist als das leere ψ_{4s} Orbital. Deshalb wird das ψ_{4s} -Orbital zuerst mit 2 Elektronen gefüllt. Die beiden zusätzlichen Protonen und Elektronen der Kalium- und Calcium-Atome bewirken jedoch, dass die Energie von ψ_{3d} unter der von ψ_{4s} zu liegen kommt, so dass anschliessend die 3. Schale mit den neu hinzukommenden 10 Elektronen die maximale Zahl von 18 erreicht (Elemente Scandium bis Zink). Darauf folgen die Elemente Gallium bis Krypton, die die ψ_{4p} Orbitale auffüllen. Abb. 3.2 zeigt die Abfolge der besetzten Orbitale von Wasserstoff bis Xenon nach ansteigender Energie der Elektronen.



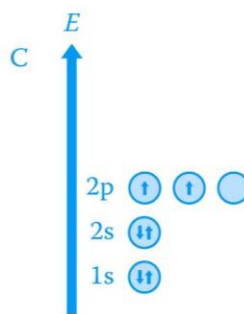
Abb. 3.2 Abfolge der besetzten Atomorbitale von H bis Xe nach ansteigender Energie (die Energie ist nicht massstäblich aufgetragen)

Mithilfe dieser Überlegungen lassen sich die Elektronen für jedes Atom auf die entsprechenden Orbitale verteilen. Der unterschiedliche Spin wird dabei durch einen Pfeil angedeutet, der entweder nach unten oder nach oben weist¹. Die vier folgenden Beispiele zeigen die Vorgehensweise:

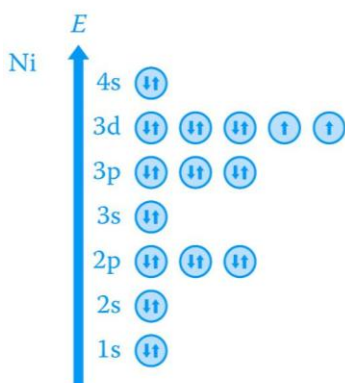
¹ Elektronen besitzen einen Spin. Er beträgt entweder $+\frac{1}{2}$ oder $-\frac{1}{2}$. Man kann sich das Elektron als rotierendes Kügelchen vorstellen, das entweder im Uhrzeigersinn (würde Spin $+\frac{1}{2}$ entsprechen) oder im Gegenuhrzeigersinn (würde Spin $-\frac{1}{2}$ entsprechen) dreht. Man stellt den Spin mit einem Pfeil dar: $\uparrow$ bedeutet



Verteilung der 17 Elektronen eines Chlor-Atoms auf die Orbitale.
Chemische Schreibweise: $_{17}\text{Cl}$



Verteilung der 6 Elektronen eines Kohlenstoff-Atoms auf die Orbitale.
Chemische Schreibweise: $_6\text{C}$



Verteilung der 28 Elektronen eines Nickel-Atoms auf die Orbitale.
Chemische Schreibweise: $_{28}\text{Ni}$



Verteilung der 20 Elektronen eines Calcium-Atoms auf die Orbitale.
Chemische Schreibweise: $_{20}\text{Ca}$

Abb. 3.3 Verteilung der Elektronen in den Atomen der Elemente Chlor, Kohlenstoff, Nickel und Calcium

Auf diese Weise erhält man für jedes Atom die Elektronenkonfiguration. Sie kann auch auf einfachere Weise dargestellt werden, indem nach dem Elementsymbol die Abkürzungen der Orbitale und die Elektronenzahl (mit hochgestellten Ziffern) geschrieben werden. Normalerweise unterscheidet man dabei energetisch gleiche Orbitale wie z. B. $\psi/2p_x$, $\psi/2p_y$, $\psi/2p_z$ nicht.

Vereinfachte Schreibweise der Elektronenkonfiguration:

Cl: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$; C: $1s^2 2s^2 2p^2$; Ni: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$; Ca: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

$+\frac{1}{2}$, $\downarrow$ bedeutet $-\frac{1}{2}$. Ein Orbital kann von zwei Elektronen besetzt werden, die sich in ihrem Spin unterscheiden müssen.

3.3 Von Atom- zu Molekülorbitalen; σ - und π -Bindungen

Bei der Bildung eines Wasserstoff-Moleküls überlagert man modellmässig 2 Atomwellenfunktionen zu 2 Molekülwellenfunktionen mit unterschiedlichen Energien: bindende und antibindende Molekülorbitale (Abschnitte 2.2 und 2.3). Dieser Formalismus lässt sich auch auf Mehrelektronensysteme übertragen. Dabei werden nicht nur s- und s-, sondern auch s- und p-, p- und p- usw. Atomorbitale zu Molekülorbitalen miteinander kombiniert. Die Bildung von Atombindungen ist jedoch an bestimmte Bedingungen geknüpft:

- Die Elektronenwellen, symbolisiert durch die Atomorbitale, müssen sich räumlich soweit einander nähern, dass eine nennenswerte Überlagerung (Interferenz, Überlappung) möglich ist. Dies ist der Grund dafür, dass Elektronen innerer Schalen keine Atombindungen ausbilden.
- Hinsichtlich der Bindungsachse im Molekül müssen die Atomwellenfunktionen gleiche Symmetrie besitzen.
- Eine Überlagerung ist nur dann möglich, wenn die Wellenfunktionen ähnliche Energien aufweisen.
- Bei der Bildung von Molekülorbitalen gelten das Pauli-Prinzip und die Hund'sche Regel.

Kombinationsmöglichkeiten von Atom- zu Molekülorbitalen

Bei den folgenden Beispielen werden zur Darstellung der Atom- und Molekülorbitale jeweils Schnitte durch den geometrischen Ort aller Punkte mit einem bestimmten Funktionswert ψ benutzt (Abschnitte 1.2 und 1.3).

a) $\psi 1s$ - + $\psi 1s$ -Atomorbitale

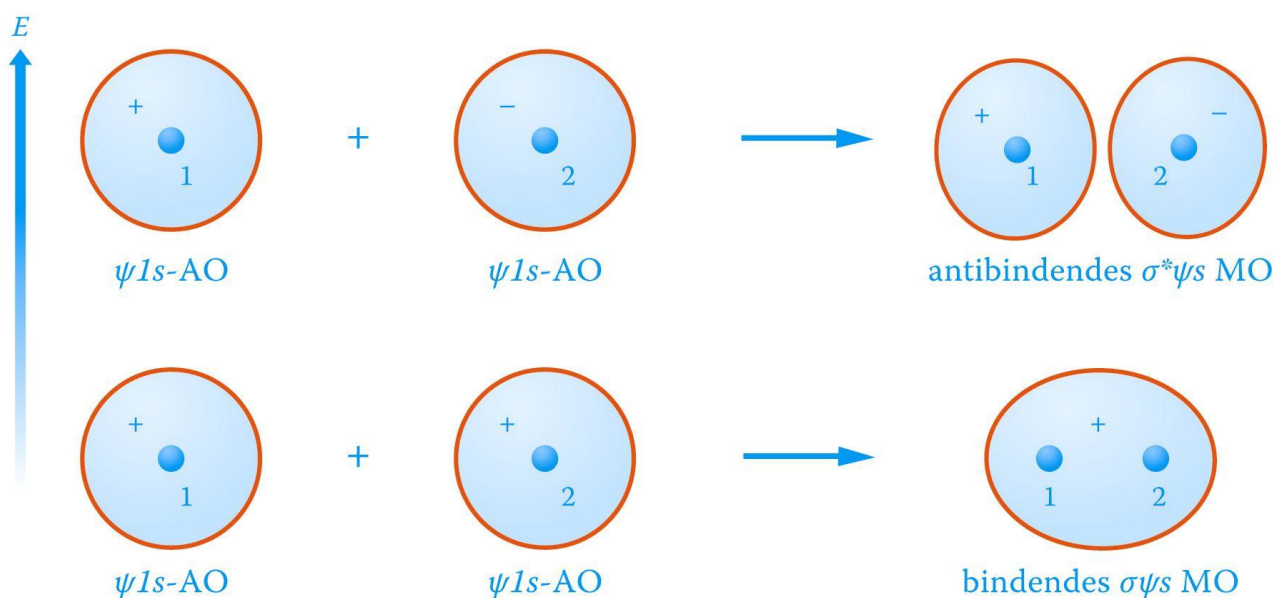


Abb. 3.4 Konstruktive und destruktive Überlagerung von 2 $\psi 1s$ -Atomorbitalen zu $\sigma \psi s$ - und $\sigma^* \psi s$ Molekülorbitalen

Molekülorbitale, die bezüglich der (Atom-) Bindungsachse symmetrisch sind, nennt man σ - (sigma) Orbitale. Sie entstehen aus der Überlagerung von $\psi_s + \psi_s$, $\psi_{p_x} + \psi_{p_x}$ sowie von $\psi_s + \psi_{p_x}$ -Atomorbitalen. Das antibindende Molekülorbital wird mit einem * gekennzeichnet. Dass ein antibindendes $\sigma^* \psi_s$ eine höhere Energie als ein $\sigma \psi_s$ - Molekülorbital besitzt, lässt sich an der Knotenfläche erkennen, die durch die Mitte der Atombindung geht (Abb. 3.4).

b) $\psi_{2p_x} + \psi_{2p_x}$ -Atomorbitale

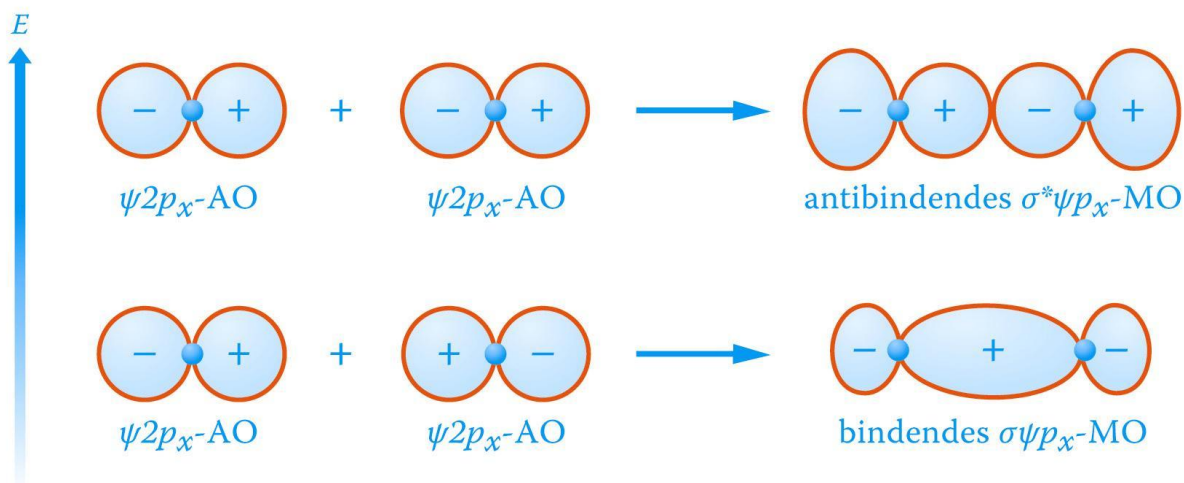


Abb. 3.5 Konstruktive und destruktive Überlagerung von 2 ψ_{2p_x} -Atomorbitalen zu $\sigma \psi_{p_x}$ - und $\sigma^* \psi_{p_x}$ -Molekülorbitalen

c) $\psi_{2p_z} + \psi_{2p_z}$ - und $\psi_{2p_y} + \psi_{2p_y}$ -Atomorbitale

Die beiden ψ_{2p_z} -Atomorbitale besitzen je eine Knotenfläche (Knotenebene), die durch die Atomkerne geht. Die Überlagerung liefert 2 $\pi \psi_{p_z}$ -Molekülorbitale, von denen das antibindende, verglichen mit dem bindenden Molekülorbital, eine zusätzliche Knotenfläche aufweist und damit energiereicher ist.

Die aus zwei ψ_{2p_z} -Atomorbitalen gebildeten Molekülorbitale (Abb. 3.6) unterscheiden sich wiederum, den Energien entsprechend, durch eine zusätzliche Knotenfläche. Ausserdem sind sie nicht symmetrisch zur (Atom-) Bindungsachse. In diesem Fall werden sie als π -(pi) Molekülorbitale bezeichnet. Entsprechendes gilt für die Überlagerung von $\psi_{2p_y} + \psi_{2p_y}$ -Atomorbitalen.

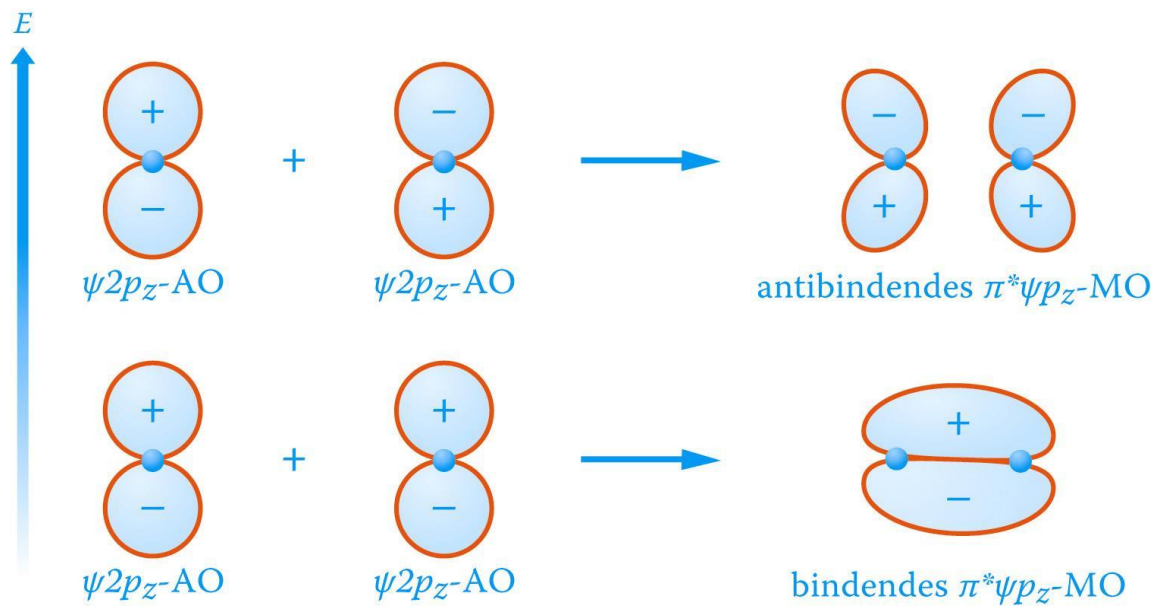


Abb. 3.6 Konstruktive und destruktive Überlagerung von 2 ψ_{2p_z} -Atomorbitalen zu $\pi\psi_{p_z}$ - und $\pi^*\psi_{p_z}$ -Molekülorbitalen

d) ψ_{2s} - + ψ_{2p_x} - und ψ_{2s} - + ψ_{2p_y} -Atomorbitale

Schliesslich führt die Kombination von ψ_{2s} - + ψ_{2p_x} - sowie ψ_{2s} - + ψ_{2p_y} -Atomorbitalen zu jeweils 2 σ -Bindungen:

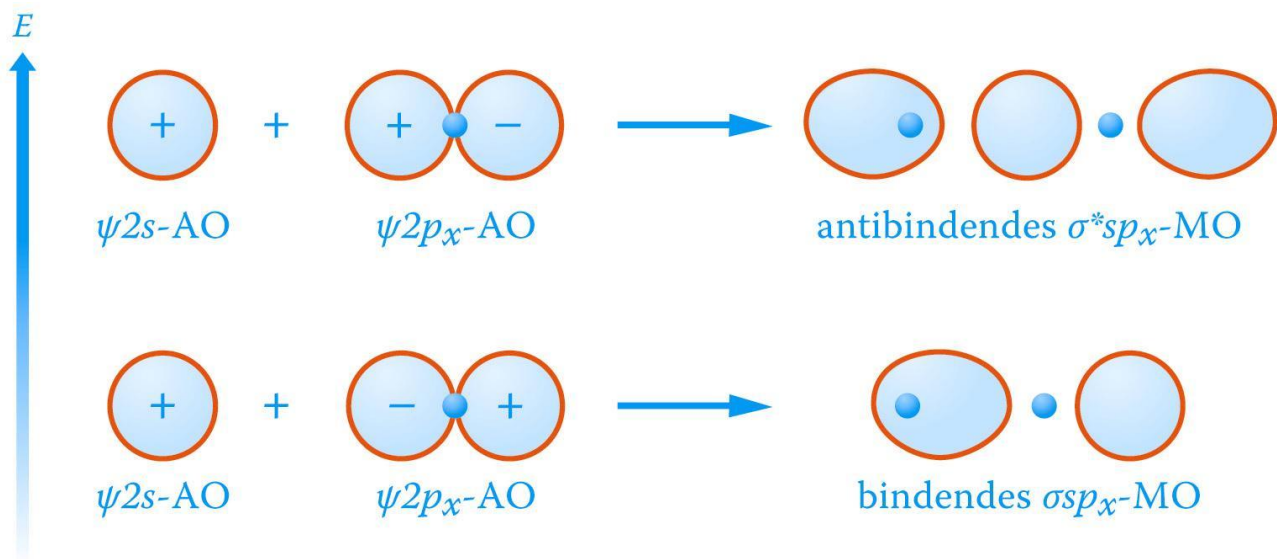


Abb. 3.7 Konstruktive und destruktive Überlagerung von ψ_{2s} - und ψ_{2p_x} -Atomorbitalen zu $\sigma\psi_{sp_x}$ - und σ^*sp_x -Molekülorbitalen

e) ψ_{2s} - + ψ_{2p_z} -Atomorbitale

Da ψ_s - und ψ_{p_z} -Atomorbitale nicht die gleiche Symmetrie aufweisen, können sie keine Molekülorbitale miteinander bilden.

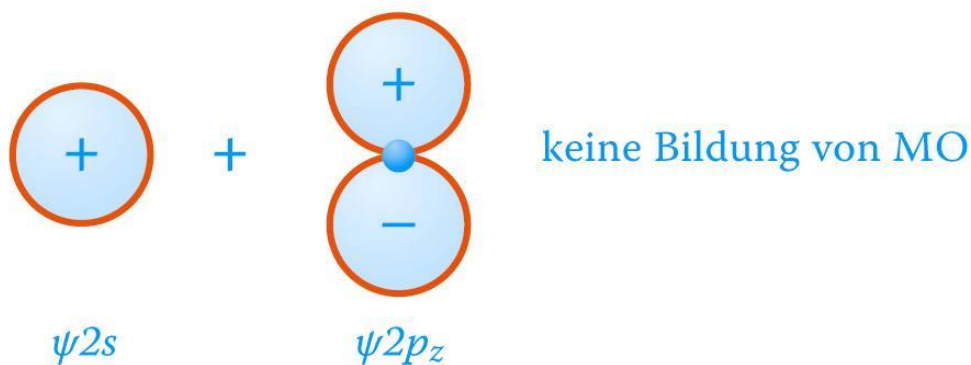


Abb. 3.8 Keine Überlagerung von ψ_{2s} - und ψ_{2p_z} -Atomorbitalen

- Die Überlagerung von $\psi_s + \psi_s$, $\psi_{p_x} + \psi_{p_x}$, $\psi_s + \psi_{p_x}$ sowie $\psi_s + \psi_{p_y}$ -Atomorbitalen ergibt σ -Molekülorbitale, während durch Kombination von $\psi_{p_z} + \psi_{p_z}$ sowie $\psi_{p_y} + \psi_{p_y}$ -Atomorbitalen π -Molekülorbitale gebildet werden.
- σ -Molekülorbitale sind symmetrisch, π -Molekülorbitale nicht symmetrisch bezüglich der Atom-Bindungsachse in einem Molekül.
- Antibindende Molekülorbitale enthalten zusätzliche Knotenflächen gegenüber den entsprechenden bindenden Molekülorbitalen.

3.4 Moleküle der Elemente der 2. Periode

Bei der Bildung von Molekülen aus den Atomen der Elemente der 2. Periode kommt es zu keiner nennenswerten Überlagerung der ψ_{1s} -Elektronenwellen. Die Molekülorbitale entstehen aus den ψ_{2s} - und den ψ_{2p} -Atomorbitalen. Um die Orbitalenergieschemata (Abschnitt 2.3) aufzustellen, müssen verschiedene Punkte beachtet werden:

- a) Die Summe der Atomorbitale entspricht der Anzahl der Molekülorbitale.
- b) Jedes Molekülorbital kann maximal 2 Elektronen beschreiben (Pauli-Prinzip).
- c) Stehen mehrere energetisch gleiche Molekülorbitale zur Verfügung, so werden diese zuerst alle mit je einem Elektron besetzt (Hund'sche Regel).
- d) Bindende und antibindende mit Elektronen besetzte Molekülorbitale heben sich in ihrer bindenden Wirkung gegenseitig auf.
- e) Die Zahl der Elektronenpaare, die effektiv zur Bindung im Molekül beitragen, die Bindungsordnung (BO), berechnet sich folgendermassen:

$$BO = \frac{\text{Elektronen in bindenden MO} - \text{Elektronen in antibindenden MO}}{2}$$

3.4.1 Das Li₂-Molekül

Elektronenkonfiguration der Li-Atome: $1s^2 2s^1$

Orbitalenergieschema:

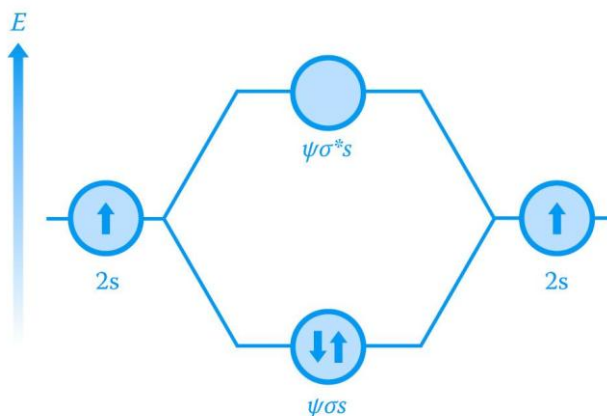


Abb. 3.9 Orbitalenergieschema für das Li₂-Molekül

Das Li₂-Molekül existiert in geringen Konzentrationen im dampfförmigen Lithium. Der Zusammenhalt der beiden Atome erfolgt durch ein Elektronenpaar; BO = 1.

3.4.2 Das Be₂-Molekül

Elektronenkonfiguration der Be-Atome: $1s^2 2s^2$

Orbitalenergieschema:

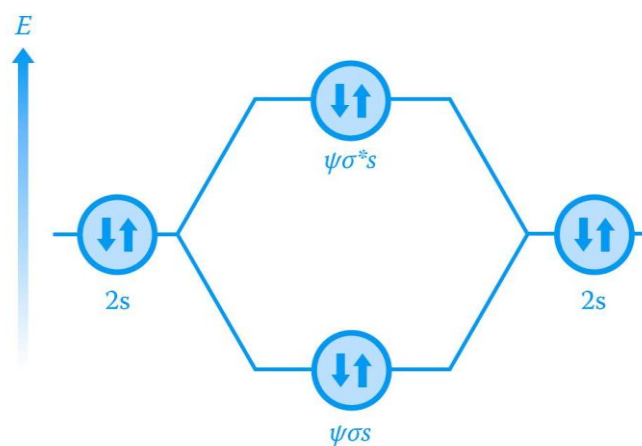


Abb. 3.10 Orbitalenergieschema für das Be₂-Molekül

Da die beiden Molekülorbitale $\psi\sigma s$ und $\psi\sigma^* s$ von jeweils 2 Elektronen besetzt sind, heben sich bindende und antibindende Wirkung gegenseitig auf. Da die Bindungsordnung = 0 ist, existieren Be₂-Moleküle folglich nicht. Experimentelle Untersuchungen haben diese theoretische Vorhersage bestätigt.

3.4.3 Die B₂-, C₂- und N₂-Moleküle

Sind in den Atomen, die sich zu Molekülen zusammenschließen, ψp -Atomorbitale vorhanden, so stehen neben den ψs - noch prinzipiell sechs weitere Molekülorbitale zur Verfügung: $\psi\sigma p_x$, $\psi\sigma^* p_x$, $\psi\pi p_y$, $\psi\pi^* p_y$, $\psi\pi p_z$ und $\psi\pi^* p_z$. Die energetische Abfolge dieser Molekülorbitale hängt u. a. von der Kernladung der betreffenden Atome ab. Deshalb ist die energetische Anordnung der Molekülorbi-

tales für Bor, Kohlenstoff und Stickstoff anders als in den Molekülen der Elemente Sauerstoff, Fluor und Neon.

Das B₂-Molekül

Elektronenkonfiguration der B-Atome: $1s^2 2s^2 2p^1$ $BO = 1$

Orbitalenergieschema:

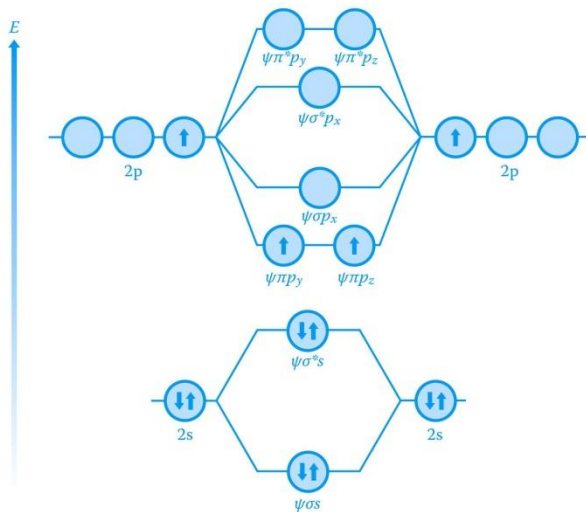


Abb. 3.11 Orbitalenergieschema für das B₂-Molekül

Das C₂-Molekül

Elektronenkonfiguration der C-Atome: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$ $BO = 2$

Orbitalenergieschema:

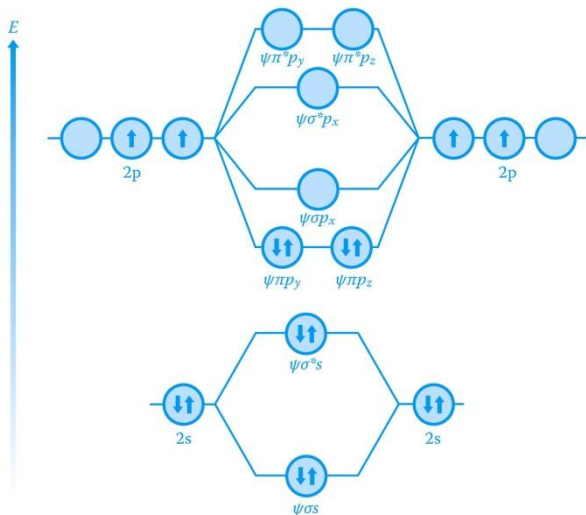


Abb. 3.12 Orbitalenergieschema für das C₂-Molekül

C₂-Moleküle wurden in geringen Spuren im Weltall entdeckt.

Das N₂-Molekül

Elektronenkonfiguration der N-Atome: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ BO = 3

Orbitalenergieschema:

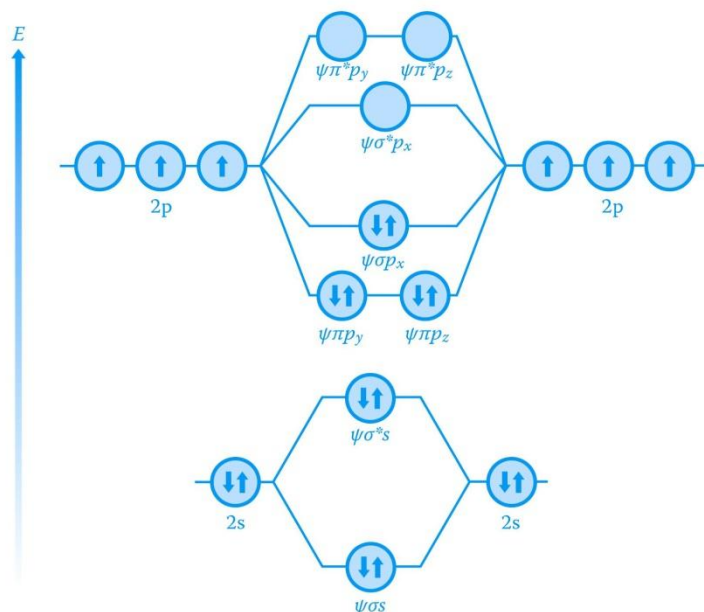


Abb. 3.13 Orbitalenergieschema für das N₂-Molekül

Das Orbitalenergieschema bestätigt die Aussage der Lewis-Formel des N₂-Moleküls ($N \equiv N$). Der Zusammenhalt der beiden Atome beruht auf 3 Elektronenpaaren, die für die ausserordentlich hohe Bindungsenergie verantwortlich sind.

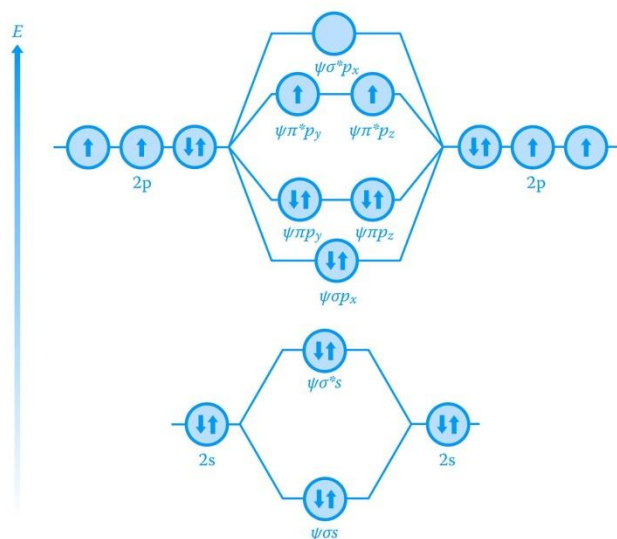
3.4.4 Die O₂-, F₂- und Ne₂-Moleküle

Verglichen mit der energetischen Abfolge bei den Molekülen der Elemente Bor, Kohlenstoff und Stickstoff liegt bei den Elementen Sauerstoff, Fluor und Neon das $\psi\sigma p_x$ -Molekülorbital tiefer als die Molekülorbitale $\psi\pi p_y$ und $\psi\pi p_z$ bzw. das Molekülorbital $\psi\sigma^* p_x$ höher als die Molekülorbitale $\psi\pi^* p_y$ und $\psi\pi^* p_z$.

Das O₂-Molekül

Elektronenkonfiguration der O-Atome: $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$ BO = 2

Energieorbitalschema:

Abb. 3.14 Orbitalenergieschema für das O_2 -Molekül

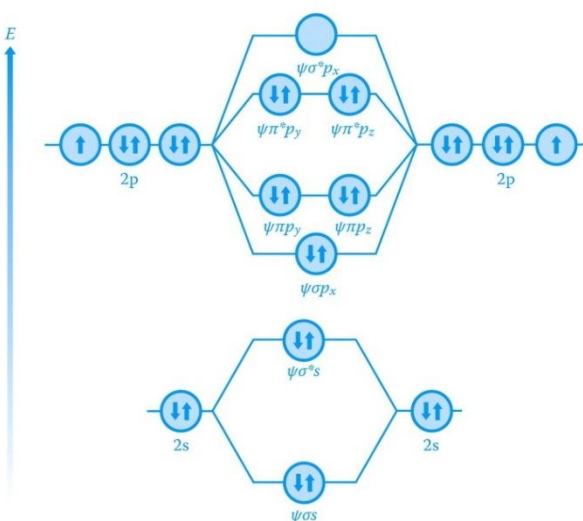
Da die Bindungsordnung $BO = 2$ beträgt, könnte man annehmen, dass das Orbitalenergieschema mit der Lewis-Formel übereinstimmt. Eine genauere Betrachtung zeigt jedoch, dass das Sauerstoff-Molekül ein Diradikal ist. Die Molekülorbitale $\psi\pi^*p_y$ und $\psi\pi^*p_z$ sind nur mit je einem Elektron besetzt. Experimentelle Untersuchungen haben ergeben, dass Sauerstoff eine spezielle Eigenschaft besitzt, den Paramagnetismus (Sauerstoff wird von einem inhomogenen magnetischen Feld angezogen), der auf diesen Radikalcharakter hinweist. Aus der Lewis-Formel des Sauerstoff-Moleküls, die ausschliesslich doppelt besetzte Wolken enthält, ist diese Stoffeigenschaft nicht erkennbar.

Lewis-Formel des Sauerstoff-Moleküls O_2 : $\langle O=O \rangle$

Das F_2 -Molekül

Elektronenkonfiguration der F-Atome: $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$ $BO = 1$

Orbitalenergieschema:

Abb. 3.15 Orbitalenergieschema für das F_2 -Molekül

Das Orbitalenergieschema und die Lewis-Formel liefern die gleiche Modellvorstellung des Fluor-Moleküls. In beiden Fällen gibt es ausschliesslich doppelt besetzte Orbitale bzw. Elektronenwolken und die Bindungsordnung ist 1.

Lewis-Formel des Fluor-Moleküls: $\overline{\text{F}}-\overline{\text{F}}$

Das Ne₂-Molekül

Elektronenkonfiguration der Ne-Atome: $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2$ BO = 0

Orbitalenergieschema:

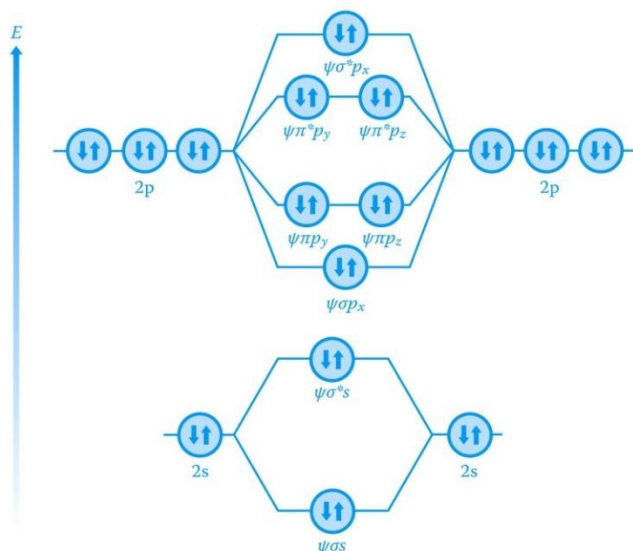


Abb. 3.16 Orbitalenergieschema für das Ne₂-Molekül

Da sich bindende und antibindende Molekülorbitale gegenseitig aufheben, kommt es zu keiner Bindung zwischen zwei Neon-Atomen. Ein Ne₂-Molekül existiert nicht.

3.4.5 Die CO- und NO-Moleküle

Ein Molekül vom Typ AB nennt man ein heteronucleares, zweiatomiges Molekül. Die Elektronenverteilung ist in der Bindung nicht mehr symmetrisch. Das Energiediagramm der Molekülorbitale kann aber analog zu homonuclearen Molekülen erstellt werden. Die Energie der beiden $\psi\pi p$ -Molekülorbitale ($\psi\pi_y$ bzw. $\psi\pi_z$) liegt bei unseren zwei Beispielen höher als die des σp_x -Molekülorbitals.

Das Molekül von Kohlenstoffmonooxid besitzt 10 Valenzelektronen. Die Elektronenanzahl entspricht damit dem N₂-Molekül. Man sagt daher auch, dass das CO-Molekül isoelektronisch mit dem N₂-Molekül ist.

Das CO-Molekül

Elektronenkonfiguration der C-Atome: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$; Elektronenkonfiguration der O-Atome: $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$ BO = 3

Orbitalenergieschema:

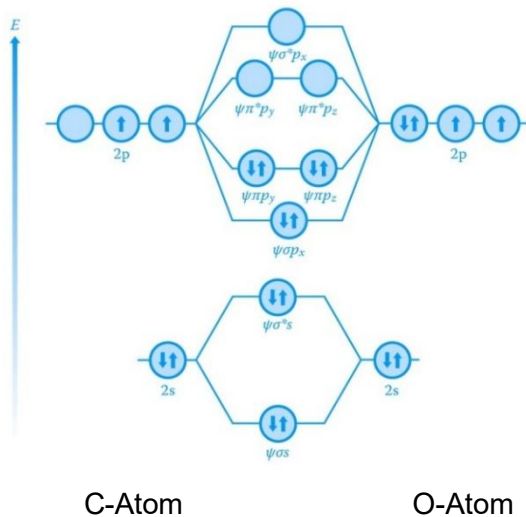


Abb. 3.17 Orbitalenergieschema eines CO-Moleküls

Das Orbitalenergieschema liefert die gleiche Aussage wie die Lewis-Formel des CO-Moleküls. Die bindende Wirkung beruht auf drei Elektronenpaaren und es existieren keine freien einfach besetzten Molekülorbitale.

Lewis-Formel des CO-Moleküls: $|\text{C}\equiv\text{O}|$

Das NO-Molekül

Elektronenkonfiguration der N-Atome: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ Elektronenkonfiguration der O-Atome: $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$ BO = 2.5

Orbitalenergieschema:

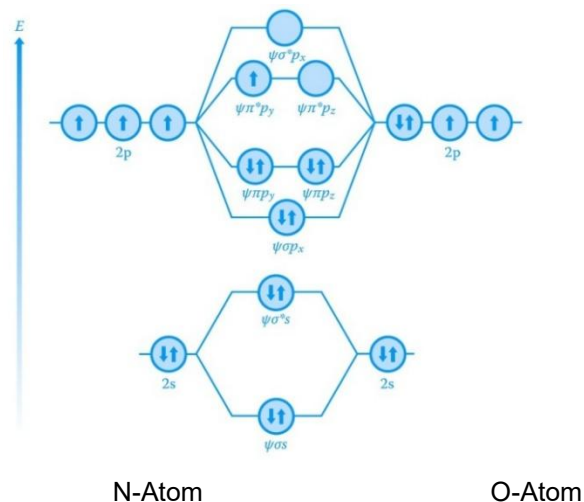


Abb. 3.18 Orbitalenergieschema eines NO-Moleküls

Der Radikalcharakter des Stickstoffmonoxid-Moleküls ist sowohl im Orbitalenergieschema als auch aus der Lewis-Formel ersichtlich. Nach der Lewis-Formel sind jedoch nur 2 Elektronenpaare für die Bindung verantwortlich (Orbitalenergieschema: 2.5).

Lewis-Formel des NO-Moleküls: $\cdot\text{N}=\text{O}\cdot$

3.5 Übungen mit Lösungen zum Kapitel 3

Übungen

A 3.1 Warum existiert kein Ne_2 -Molekül?

A 3.2

- a) Sauerstoff bildet Verbindungen, die folgende Sauerstoff-Ionen enthalten: O_2^+ , z. B. in O_2PtF_6 ; O_2^- , z. B. in KO_2 und O_2^{2-} , z. B. in Na_2O_2 .
- a) Zeichnen Sie die Orbitalenergieschemata für O_2^+ , O_2^- , und O_2^{2-} .
- b) Geben Sie die Bindungsordnung jeder Verbindung an.
- b) Das Anion des Calciumcarbids CaC_2 sollte eigentlich Acetylid-Ion genannt werden. Zeichnen Sie die Orbitalenergieschemata für C_2 und C_2^{2-} und bestimmen Sie die Bindungsordnung.
- c) Es gibt zahlreiche Verbindungen, in denen das Nitrosyl-Ion NO^+ vorkommt (z. B. in $\text{NO}^+\text{HSO}_4^-$ oder $\text{NO}^+\text{ClO}_4^-$). Vergleichen Sie mithilfe der Orbitalenergieschemata die Bindung in NO und NO^+ . Welche Verbindung besitzt die stärkere Bindung und weshalb?

A 3.3

- a) Zeichnen Sie das Orbitalenergieschema von CO .
Vergleichen Sie mit dem NO -Molekül. Welches ist das stabilere Molekül?
- b) Bestimmen Sie die BO von allen behandelten Molekülen des Kapitels 3.
- c) Füllen Sie folgende Tabelle aus.

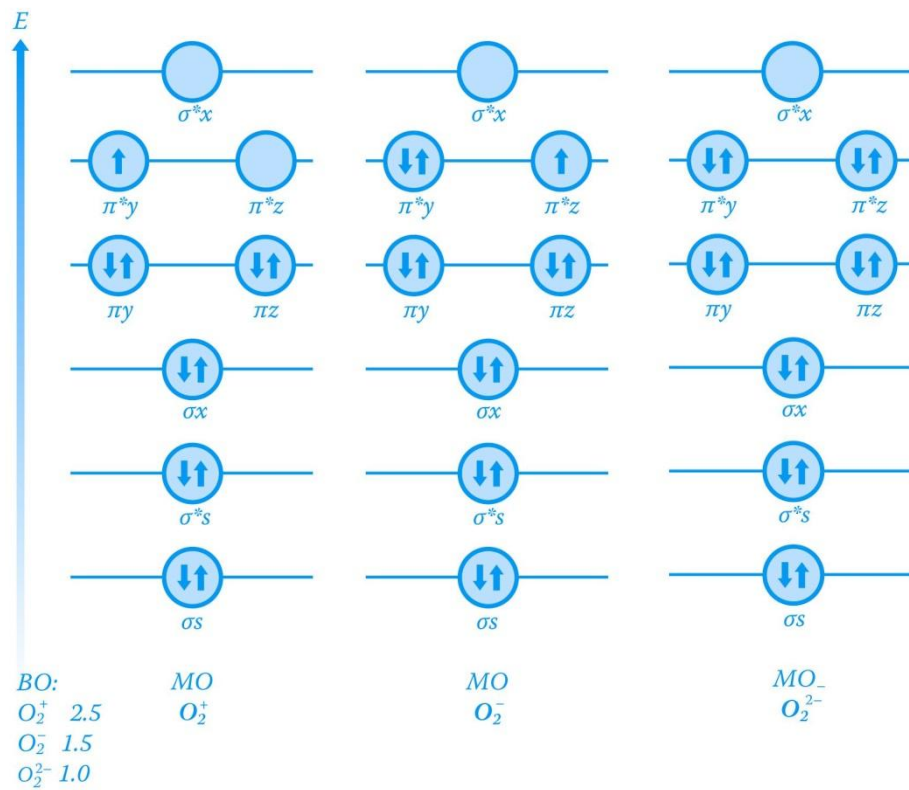
Moleküle	Elektronenzahl in den Molekülorbitalen					
	$\psi/\sigma s$	$\psi/\sigma^* s$	$\psi/\pi p_{y,z}$	$\psi/\sigma p_x$	$\psi/\pi^* p_{y,z}$	$\psi/\sigma^* p_x$
Li_2						
$[\text{Be}_2]$						
B_2						
C_2						
N_2						
O_2						
F_2						
$[\text{Ne}_2]$						
CO						
NO						

Lösungen

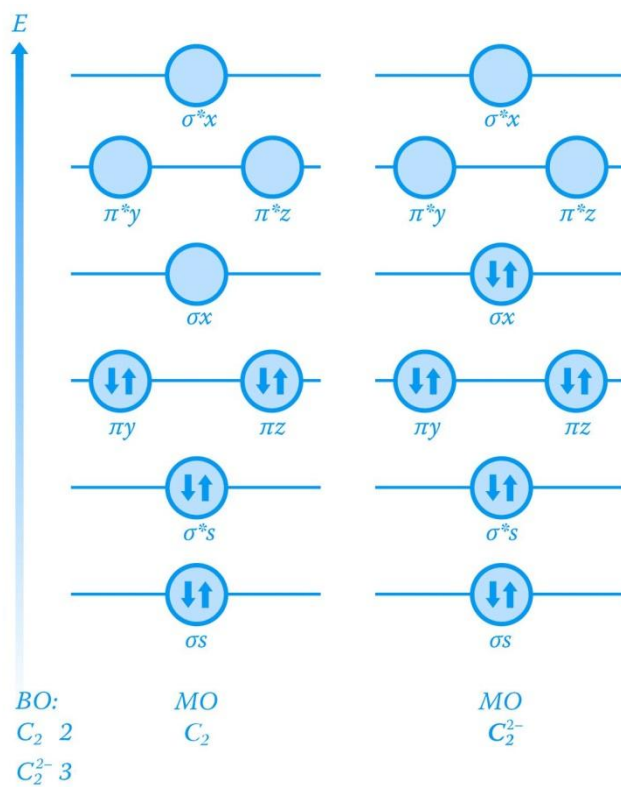
A 3.1 Die Bindungsordnung im Ne_2 beträgt 0.

A 3.2

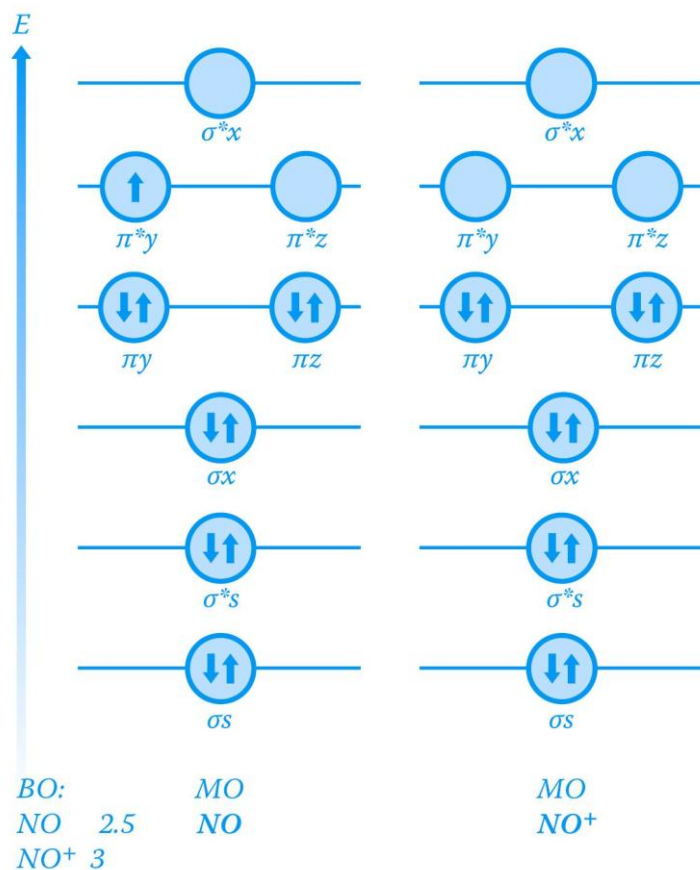
a)



b)

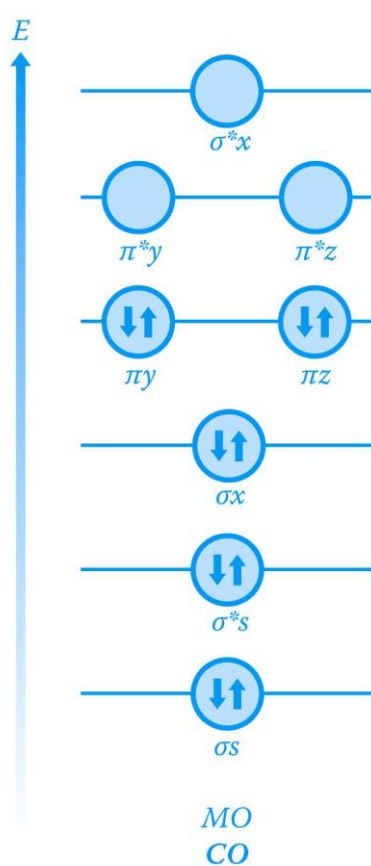


c)



A 3.3

a)



BO: 3; sehr stabil, stabiler als NO

b)	Moleküle der zweiten Periode	Bindungsordnung
	Li ₂	1
	[Be ₂]	0
	B ₂	1
	C ₂	2
	N ₂	3
	O ₂	2
	F ₂	1
	[Ne ₂]	0
	CO	3
	NO	2.5

c)	Moleküle	Elektronenzahl in den Molekülorbitalen					
		ψ/σ_s	ψ/σ^*s	$\psi/\pi p_{y,z}$	$\psi/\sigma p_x$	$\psi/\pi^*p_{y,z}$	ψ/σ^*p_x
	Li ₂	2					
	[Be ₂]	2	2				
	B ₂	2	2	1+1			
	C ₂	2	2	2+2			
	N ₂	2	2	2+2	2		
	O ₂	2	2	2	2+2	1+1	
	F ₂	2	2	2	2+2	2+2	
	[Ne ₂]	2	2	2	2+2	2+2	2
	CO	2	2	2	2+2		
	NO	2	2	2	2+2	1	