

## Arbeitsblatt: Chemische Bindung (EVA geeignet)

### Moleküle –wie Atome– sind von Hülle aus Elektronen umgeben

Du hast gelernt, dass die Atomkerne von einem Stoff umgeben sind, dessen Elementarportionen Elektronen sind. Auch im Molekül sind die Atomkerne von diesem Stoff umgeben. Er bildet die Hülle des Moleküls so, wie er die Hülle des Atoms bildet.

### Hüllendichte an Kernen maximal, molekülbedeckend, nach außen abfallend

In Abbildung 1 ist die Dichte des Hüllmaterials des  $H_2$ -Moleküls zu sehen. Du siehst, dass die Dichte in der Nähe der Atomkerne maximal wird. Sie erstreckt sich über das gesamte Molekül und verschwindet erst in großer Entfernung vom Molekül.

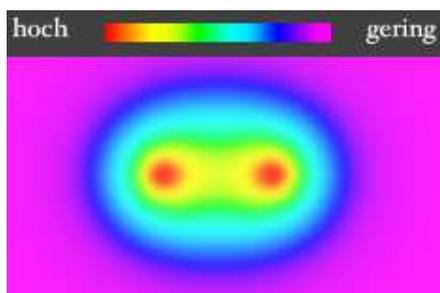


Abbildung 1: Dichte des Hüllmaterials des  $H_2$ -Moleküls

### $H_2$ -Hüllendichte zwischen Kernen größer und am $H_2$ -Rand niedriger als bei einzelnen H-Atomen

Was die beiden Atomkerne des  $H_2$ -Moleküls zusammenhält, kannst Du aus Abbildung 2 erschließen. Dort ist die sogenannte "Differenz-Dichte" gezeichnet. D.h., man hat von der Hüllendichte des  $H_2$ -Moleküls aus Abbildung 1 (jeweils) die (halbe) Hüllendichte der einzelnen H-Atome abgezogen. In Abbildung 2 siehst Du einen roten Bereich zwischen den beiden Atomkernen. In diesem ist die Hüllendichte des Moleküls größer als die Hüllendichte eines einzelnen H-Atoms. In dem blauen Bereich am linken und rechten Rand des Moleküls ist die Hüllendichte niedriger als die Hüllendichte des einzelnen H-Atoms.

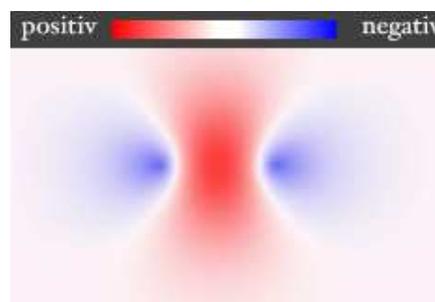


Abbildung 2: Differenz-Dichte des Hüllmaterials des  $H_2$ -Moleküls

### Ladungsverschiebung zw. Kerne bewirkt Zugspannung zw. Kerne → Kern-Bewegung aufeinander zu

Du kannst Dir vorstellen, dass zwischen der (negativen) Ladungsdichte der Hülle und den Kernen ein elektrisches Feld besteht. Aber im Gegensatz zu den einzelnen Atomen ist dieses elektrische Feld nicht kugelsymmetrisch um die Atomkerne verteilt. Die Ladungsverschiebung des Hüllmaterials in den Bereich zwischen den Kernen bewirkt, dass die Zugspannung rechts vom linken Kern größer ist als links vom linken Kern, siehe Abbildung 3. Sie bewirkt auch, dass die Zugspannung links vom rechten Kern größer ist als rechts vom rechten Kern. Gäbe es nur diese Spannungen würden sich die Kerne aufeinander zu bewegen.

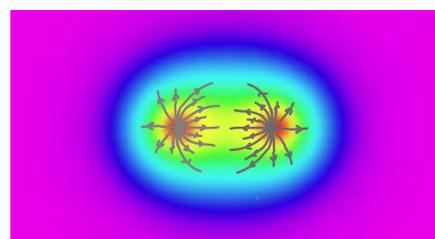


Abbildung 3: Feldlinien des elektrischen Feldes der elektrischen Ladungen im  $H_2$ -Molekül.

### Potenzialkasten: $E \propto \frac{1}{r^2} \Rightarrow$ Hüllmaterial nicht beliebig "quetschbar"

Würden sich die Kerne weiter aufeinander zu bewegen, so würde der Raum zwischen den Kernen immer kleiner. Das Hüllmaterial würde sich damit auf einem immer kleinerem Raum

“zusammenquetschen”. Allerdings hat die Untersuchung des Potenzialkasten-Problems gezeigt, dass sich Quantenobjekte wie die Elektronen der Molekülhülle nicht beliebig “zusammenquetschen” lassen: Je kleiner der Raum ist, in dem man das Quantenobjekt “einsperren möchte”, desto mehr Energie muss man hineinstecken. Deshalb kann das Molekül nicht beliebig klein werden.

**“chemische Bindung” ist Kompromiss  
zw. elektro-statischer Anziehung  
& zur Verfügung stehendem Platz**

Die Ladungsverschiebung bewirkt also eine Anziehung der beiden Kerne und die Quanteneigenschaft, sich nicht beliebig zusammenquetschen zu lassen, wirkt dem entgegen. Im Gleichgewicht dieser beiden Tendenzen befindet sich der Bindungsabstand. Das, was man “chemische Bindung” nennt, kommt also meist dadurch zustande, dass es –im Vergleich zu den Einzel-Atomen– eine Ladungsverschiebung in den Bereich zwischen den Kernen gibt und für das Hüllenmaterial mehr Platz zu Verfügung steht.

1. Aufgabe

- (a) Unterstreichen Sie Wichtiges!
- (b) Tragen Sie für die Teilabschnitte Überschriften ein, die beschreiben, was man in diesem Abschnitt erfährt.
- (c) Notieren Sie Ihre Fragen zum Text.

2. Aufgabe

Im  $H_2$ -Molekül nehmen alle Elektronen beider H-Atome an der Bindung teil. Dies ist bei Verbindungen von Atomen mit mehreren Elektronen im Allgemeinen nicht so. Ein Beispiel dafür ist das  $F_2$ -Molekül. Um die Art der Bindung zu klassifizieren, muss man wissen wie die Molekülorbitale gebildet werden.

So wie die Elektronen in einem Atom Atomorbitale besetzen, so besetzen auch die Elektronen in einem Molekül Molekülorbitale. Abbildung 4 zeigt für das  $F_2$ -Molekül die Dichte des Hüllenmaterials für das an der Bindung beteiligte Molekülorbital zusammen mit der entsprechenden Differenzdichte. Man kann sich vorstellen, dass Molekülorbitale aus Atomorbitalen zusammengesetzt werden.

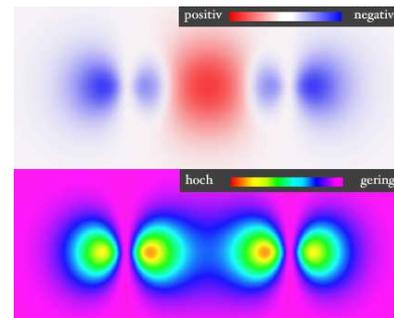


Abbildung 4: Differenz-Dichte (oben) und Dichte des Hüllenmaterials (unten) des  $F_2$ -Moleküls, das an der Bindung beteiligt ist

- (a) Ermitteln Sie die Elektronenkonfiguration eines F-Atoms.
- (b) Bestimmen Sie mit Hilfe von Abbildung 4 und dem Ergebnis von Aufgabe 2a die Atom-Orbitale der F-Atome, die an der Bildung beteiligt sind.

**Quellen:** Die gezeigten Abbildungen und die zugehörigen Filme stammen aus der Staatsexamensarbeit von Johannes Seeger (Universität Karlsruhe (TH) Abteilung für Didaktik der Physik) und sind über den QR-Code



bzw. [http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/software/moleculab/mo\\_start.html](http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/software/moleculab/mo_start.html) abrufbar. In Abbildung 3 habe ich elektrische Feldstärken eingezeichnet.

Text & Aufgabenstellungen von Thomas Beyer (Kritik und Anregungen an liberobeyer@gmx.de)

Lösungsvorschläge:

- 2a** F-Atome haben –im Gegensatz z.B. zu Ag-Atomen– eine *normale* Elektronenkonfiguration:  $1s^2 2s^2 2p^5$
- 2b** Wenn man annimmt, dass die beiden F-Kerne etwa dort sind, wo die Hüllendichte zwischen zwei gelb-orange-Maxima Null wird, so können es nach der Dichteverteilung 2p-Orbitale sein, die das Molekülorbital bilden.  
Das passt zur Elektronenkonfiguration ei-

nes F-Atoms: ein Elektron besetzt alleine ein 2p-Orbital, z.B. das  $2p_x$ -Orbital, wenn die  $x$ -Achse nach rechts zeigt. Die Elektronen in den 1s-Orbitalen bilden eine abgeschlossene Schale (Heliumkonfiguration) und die in den 2s-Orbitalen eine abgeschlossene Unterschale; sie sind also relativ fest an die Atome gebunden. Die  $2p_y$ - und  $2p_z$ -Orbitale sind im isolierten Atom bereits doppelt besetzt und nehmen daher nicht an der Bildung teil.

## Arbeitsblatt: Chemische Bindung

Du hast gelernt, dass die Atomkerne von einem Stoff umgeben sind, dessen Elementarportionen Elektronen sind. Auch im Molekül sind die Atomkerne von diesem Stoff umgeben. Er bildet die Hülle des Moleküls so, wie er die Hülle des Atoms bildet.

In Abbildung 1 ist die Dichte des Hüllmaterials des  $H_2$ -Moleküls zu sehen. Du siehst, dass die Dichte in der Nähe der Atomkerne maximal wird. Sie erstreckt sich über das gesamte Molekül und verschwindet erst in großer Entfernung vom Molekül.

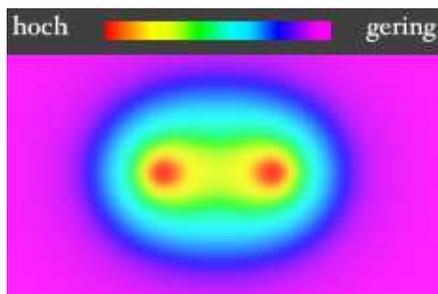


Abbildung 1: Dichte des Hüllmaterials des  $H_2$ -Moleküls

Was die beiden Atomkerne des  $H_2$ -Moleküls zusammenhält, kannst Du aus Abbildung 2 erschließen. Dort ist die sogenannte "Differenz-Dichte" gezeichnet. D.h., man hat von der Hüllendichte des  $H_2$ -Moleküls aus Abbildung 1 (jeweils) die (halbe) Hüllendichte der einzelnen H-Atome abgezogen. In Abbildung 2 siehst Du einen roten Bereich zwischen den beiden Atomkernen. In diesem ist die Hüllendichte des Moleküls größer als die Hüllendichte eines einzelnen H-Atoms. In dem blauen Bereich am linken und rechten Rand des Moleküls ist die Hüllendichte niedriger als die Hüllendichte des einzelnen H-Atoms.

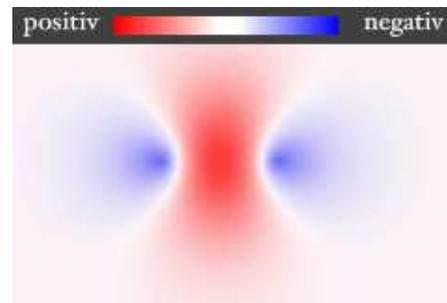


Abbildung 2: Differenz-Dichte des Hüllmaterials des  $H_2$ -Moleküls

Du kannst Dir vorstellen, dass zwischen der (negativen) Ladungsdichte der Hülle und den Kernen ein elektrisches Feld besteht. Aber im Gegensatz zu den einzelnen Atomen ist dieses elektrische Feld nicht kugelsymmetrisch um die Atomkerne verteilt. Die Ladungsverschiebung des Hüllmaterials in den Bereich zwischen den Kernen bewirkt, dass die Zugspannung rechts vom linken Kern größer ist als links vom linken Kern, siehe Abbildung 3. Sie bewirkt auch, dass die Zugspannung links vom rechten Kern größer ist als rechts vom rechten Kern. Gäbe es nur diese Spannungen würden sich die Kerne aufeinander zu bewegen.

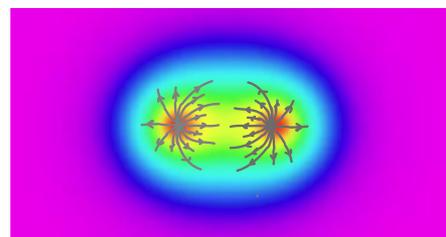


Abbildung 3: Feldlinien des elektrischen Feldes der elektrischen Ladungen im  $H_2$ -Molekül.

Würden sich die Kerne weiter aufeinander zu bewegen, so würde der Raum zwischen den Kernen immer kleiner. Das Hüllmaterial würde sich damit auf einem immer kleinerem Raum

“zusammenquetschen”. Allerdings hat die Untersuchung des Potenzialkasten-Problems gezeigt, dass sich Quantenobjekte wie die Elektronen der Molekülhülle nicht beliebig “zusammenquetschen” lassen: Je kleiner der Raum ist, in dem man das Quantenobjekt “einsperren möchte”, desto mehr Energie muss man hineinstecken. Deshalb kann das Molekül nicht beliebig klein werden.

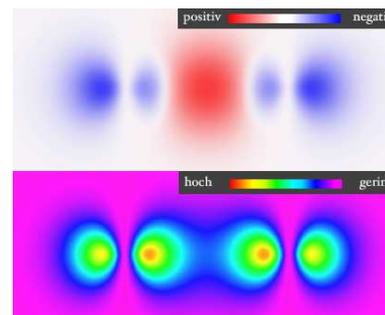


Abbildung 4: Differenz-Dichte (oben) und Dichte des Hüllenmaterials (unten) des  $F_2$ -Moleküls, das an der Bindung beteiligt ist

Die Ladungsverschiebung bewirkt also eine Anziehung der beiden Kerne und die Quanteneigenschaft, sich nicht beliebig zusammenquetschen zu lassen, wirkt dem entgegen. Im Gleichgewicht dieser beiden Tendenzen befindet sich der Bindungsabstand. Das, was man “chemische Bindung” nennt, kommt also meist dadurch zustande, dass es –im Vergleich zu den Einzel-Atomen– eine Ladungsverschiebung in den Bereich zwischen den Kernen gibt und für das Hüllenmaterial mehr Platz zu Verfügung steht.

### 1. Aufgabe

- Unterstreichen Sie Wichtiges!
- Tragen Sie für die Teilabschnitte Überschriften ein, die beschreiben, was man in diesem Abschnitt erfährt.
- Notieren Sie Ihre Fragen zum Text.

### 2. Aufgabe

Im  $H_2$ -Molekül nehmen alle Elektronen beider H-Atome an der Bindung teil. Dies ist bei Verbindungen von Atomen mit mehreren Elektronen im Allgemeinen nicht so. Ein Beispiel dafür ist das  $F_2$ -Molekül. Um die Art der Bindung zu klassifizieren, muss man wissen wie die Molekülorbitale gebildet werden.

So wie die Elektronen in einem Atom Atomorbitale besetzen, so besetzen auch die Elektronen in einem Molekül Molekülorbitale. Abbildung 4 zeigt für das  $F_2$ -Molekül die Dichte des Hüllenmaterials für das an der Bindung beteiligte Molekülorbital zusammen mit der entsprechenden Differenzdichte. Man kann sich vorstellen, dass Molekülorbitale aus Atomorbitalen zusammengesetzt werden.

- Ermitteln Sie die Elektronenkonfiguration eines F-Atoms.
- Bestimmen Sie mit Hilfe von Abbildung 4 und dem Ergebnis von Aufgabe 2a die Atom-Orbitale der F-Atome, die an der Bildung beteiligt sind.

**Quellen:** Die gezeigten Abbildungen und die zugehörigen Filme stammen aus der Staatsexamensarbeit von Johannes Seeger (Universität Karlsruhe (TH) Abteilung für Didaktik der Physik) und sind über den QR-Code



bzw. [http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/software/moleculab/mo\\_start.html](http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/software/moleculab/mo_start.html) abrufbar. In Abbildung 3 habe ich elektrische Feldstärken eingezeichnet.

Text & Aufgabenstellungen von Thomas Beyer (Kritik und Anregungen an liberobeyer@gmx.de)