



Arbeitsblätter zum Ausdrucken von [sofatutor.com](http://sofatutor.com)

# Molekülorbitale

Molekülorbitale

? Bitte nicht „verstehen“... ... oder vorstellen!

MO (Hund, Mulliken)

abstrakt, numerisch besser handhabbar

$\hat{H}\psi = E\psi$      $\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$     MO aus AO

O + O → O O „Überlappung“

He<sub>2</sub> → INSTABIL    additiv    subtraktiv

MO bindend    antibindend

- 1 Beschreibe den Aufbau eines MO-Schemas.
- 2 Beschreibe die VB- und die MO-Bindungstheorie.
- 3 Erkläre, warum es keine Helium-Moleküle gibt.
- 4 Bestimme, welche Kombination aus Atomorbitalen zu einem Molekülorbital führt.
- + mit vielen Tipps, Lösungsschlüsseln und Lösungswegen zu allen Aufgaben

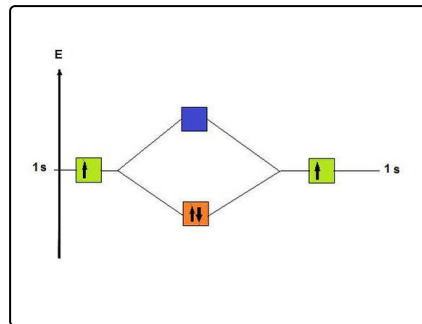


Das komplette Paket, inkl. aller Aufgaben, Tipps, Lösungen und Lösungswege gibt es für alle Abonnenten von [sofatutor.com](http://sofatutor.com)



## Beschreibe den Aufbau eines MO-Schemas.

Verbinde die richtigen Paare.



- grün **A**
- orange **B**
- blau **C**
- orange + blau **D**
- vorliegendes MO von... **E**

- 1**  $H_2$
- 2** Molekülorbital
- 3** Atomorbital
- 4**  $\sigma^*$ -Orbital
- 5**  $HeH^-$
- 6**  $\sigma$ -Orbital



## Unsere Tipps für die Aufgaben

1  
von 4

### Beschreibe den Aufbau eines MO-Schemas.

#### 1. Tipp

Gesucht ist ein Molekül aus einer Kombination von zwei Atomen, die jeweils nur ein Elektron im s-Orbital besitzen.

---



## Lösungen und Lösungswege für die Aufgaben

1  
von 4

### Beschreibe den Aufbau eines MO-Schemas.

**Lösungsschlüssel:** A—3 // B—6 // C—4 // D—2 // E—1

Das MO-Schema setzt sich im Allgemeinen aus drei „Spalten“ zusammen:

- Atomorbital (grün) von A: **AO(A)**; Atomorbital (grün) von B: **AO(B)** und Molekülorbital des Moleküls mit kovalenter Bindung zwischen A und B: MO(A-B)
- Das s-Orbital unterteilt sich in ein antibindendes  $\sigma^*$ - (blau) und ein bindendes  $\sigma$ -Orbital (orange). Bei Anwesenheit von p-Orbitalen steigert sich die Aufspaltung in drei bindende ( $\sigma$  und 2  $\pi$ )- und drei antibindende ( $\sigma^*$  und 2  $\pi^*$ )-Orbitale usw.
- Das Auffüllen der Molekülorbitale unterliegt dem Pauli-Prinzip, d.h. es werden zunächst die Orbitale mit dem kleinsten Energieniveau besetzt. Dabei werden die Orbitale zunächst mit einem Elektron halbvoll besetzt und unter Spinpaarung aufgefüllt, wenn noch Elektronen vorhanden sind.
- Das aufgezeigte MO-Schema ist einem Molekül zuzuordnen, welches sich aus zwei Atomen zusammensetzt, die im 1s-Orbital nur 1 Elektron haben. Dies trifft nur auf die Verbindungen  $H_2$  oder  $HeH^+$  zu.