

Übungsstunde 3

0.0 Meme

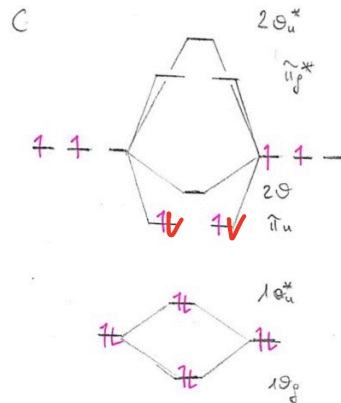


1.0 Prüfungsaufgabe

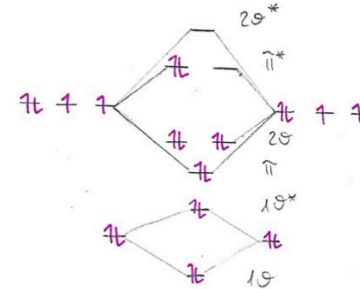
- Zeichnen Sie die MO-Schemata für die Moleküle C₂ und O₂ (Singulett-Sauerstoff)
- Bestimme die Bindungsordnung und das magnetische Verhalten beider Teilchen.

c) π -Schema

C₂



¹O₂ (Singulett-Sauerstoff)



d)

Bindungsordnung
para/diamagnetisch

C₂
~~2~~
paramag.

¹O₂ (Singulett)
2
diamag.

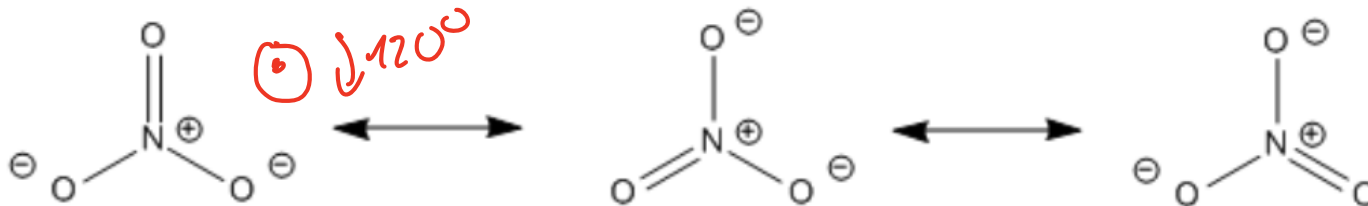
2.0 Nachbesprechung

2.1 Mesomere und Symmetrien des Nitrat-Ion



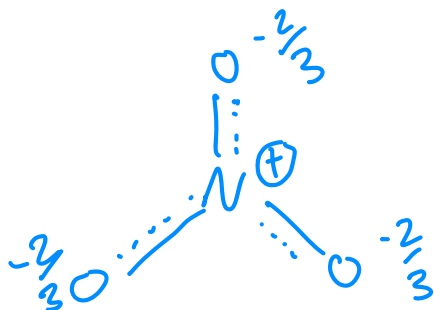
- Wo ist die C_3 -Achse, und was sind die anderen Symmetrie-Elemente

1.



• $E, C_3, 3 \sigma_v, \sigma_h, 3 C_2, S_6$

der



2.2 Unterschied Zwischen ungepaarter Elektronen und Nichtbindende Elektronen

- Ungepaarte Elektronen sind Elektronen die im MO- alleine sind, also zum Spin des beitragen.
- Nichtbindende Elektronen sind Elektronen, die an keiner Bindung beteiligt sind, diese befinden sich in lone pairs

2.3 Symmetrie Elemente an BF₃ zu BCLF₂

- hier findet ihr eine super visualisierung der Symmetrie Elemente sowie der Punktgruppen:
 - <https://symotter.org/gallery>
- σ_h , σ_v oder doch σ_d ?

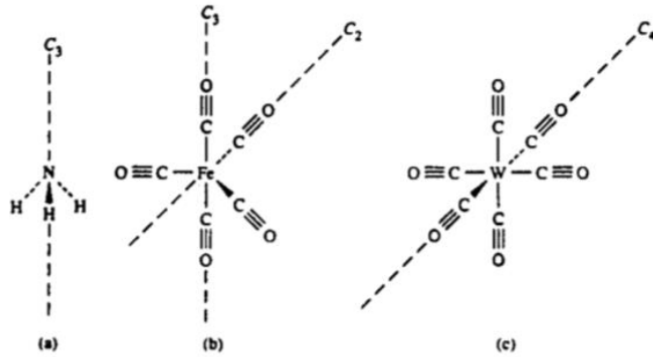
7. BF₃: $E, C_3, C_2 (3\times), \sigma_h, \sigma_v (3\times), S_3$
- a) verliert $C_3, 2\times C_2, \sigma_h, 1\times \sigma_v, S_3$
 - b) verliert $C_2, 2\times \sigma_v$
 - c) kein

2.3.1 Zusammenfassung Symmetrie Elemente

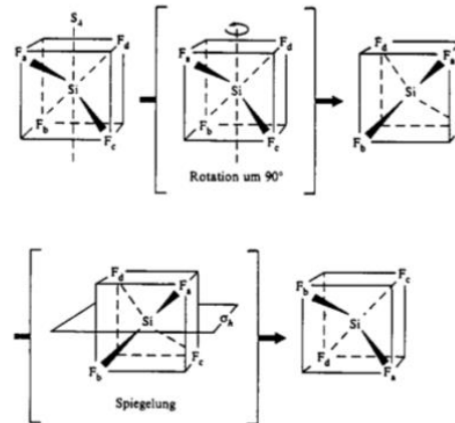
- Spiegelebene (σ): Spiegelung an einer Spiegelebene.
 - σ_h : senkrecht zur höchsten Drehachse
 - σ_v : enthält die höchste Drehachse
 - σ_d : ist weder noch, irgendwas dazwischen
- Inversionszentrum (i): Symmetrisch im Bezug auf das Inversionszentrum, Punktsymmetrisch
- n-zählige Drehachse (C_n): Drehung um $\frac{360^\circ}{n}$ mit $n \in [2, 3, 4, 5, 6]$
- Identität (E): "Macht nichts" ↳ weil es keine Zug
- Drehspiegelachse (S_n): Drehung um $\frac{360^\circ}{n}$ gefolgt von einer Spiegelung an eine Ebene senkrecht zur Drehachse
- Manche Operationen sind gleich, z.B. $S_1 = \sigma$

2.3.2 Bsp

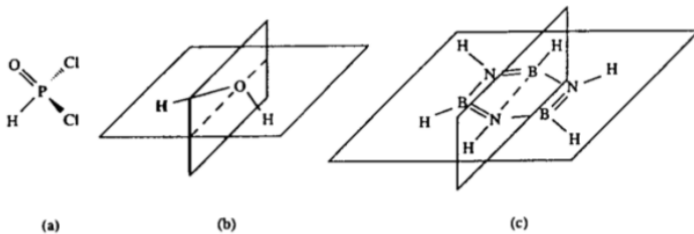
Drehachse (C_n)



Dreh Spiegelung (S_n)



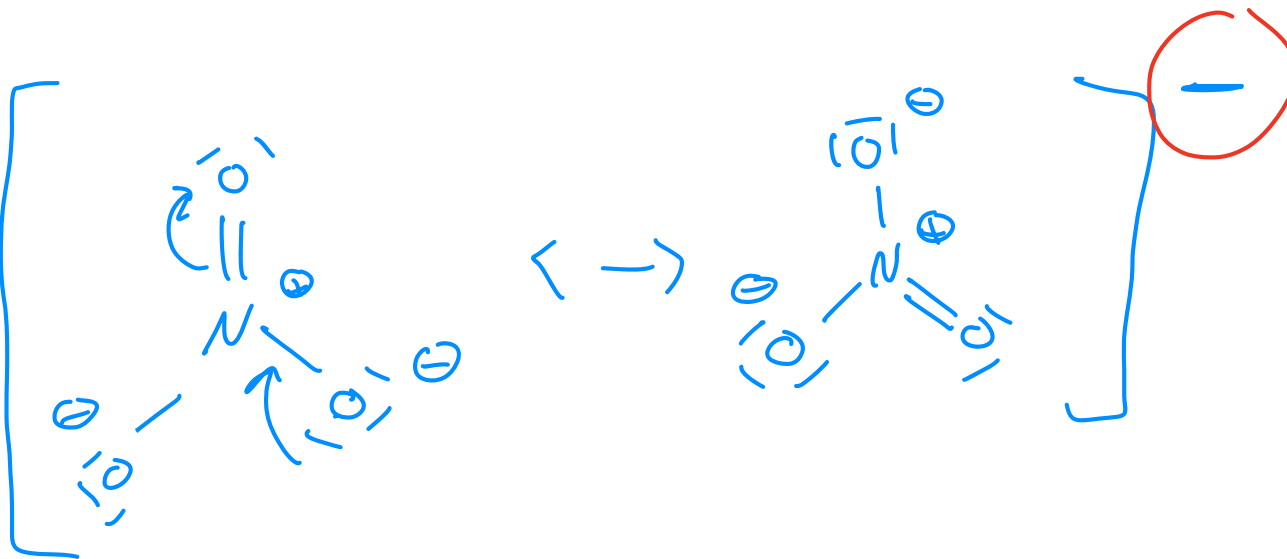
Die Spiegelebene (σ)



2.4 Komplexladung und Resonanz am Nitrat-Ion



- Wie mache ich es richtig?



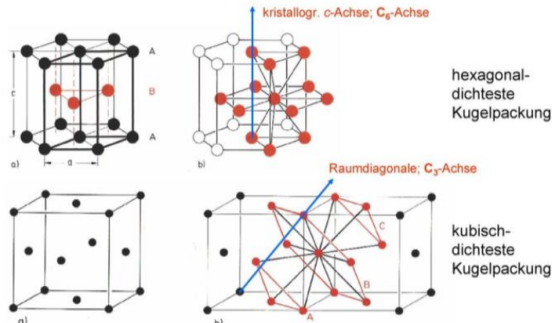
3.0 Kugelpackungen

3.1 Eine Einführung

- Ihr müsst die Gitter beim Namen kennen, dafür empfehle ich das Anki auf meiner Homepage
- Meist bekommt ihr ein Bild des Gitters und müsst dazu die KZ eines Elements im Gitter angeben
- Ausserdem: Inhalt berechnen, Oktaeder/Tetraederlücken bestimmen, Packungsdichte berechnen
- Koordinationszahl: Anzahl Atome mit dem gleichen kleinsten Abstand zum Zentralatom

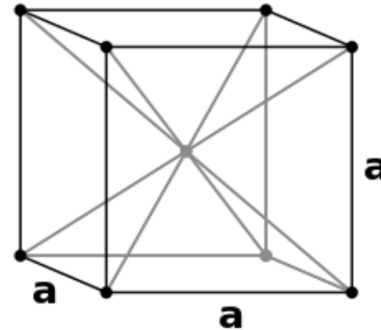
3.1.1

Kubisch Flächenzentriert,
hexagonal dichteste Packung &
kubisch dichteste Packung



Koordinationszahl = 12

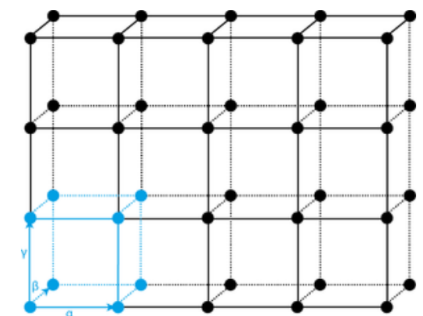
Kubisch Innenzentriert &
Kubisch raumzentriert



Koordinationszahl = 8

8+6 ist auch ok

Kubisch primitiv

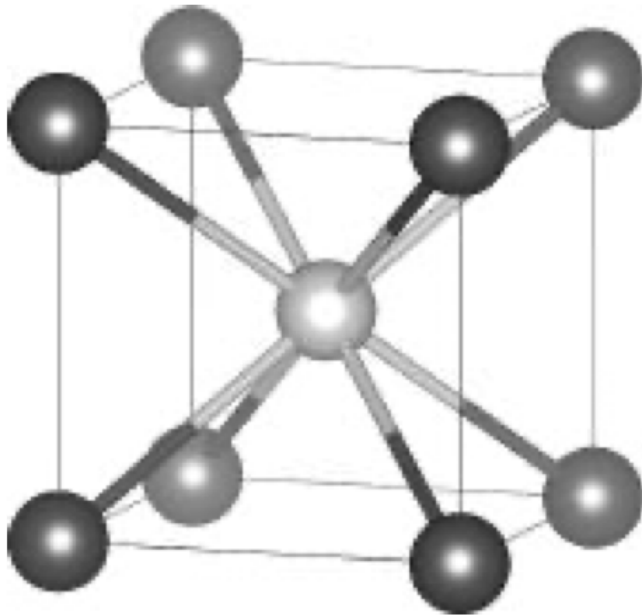


Koordinationszahl = 6

Fehler in Zsf. Markus Böcker!

3.2 Elementarzelle

- Ist die kleinste sich wiederholende Einheit, aus der man das Gitter erzeugen kann.
- Bezieht sich nur auf **Atome in der Zelle**



3.2 Vorhersagen der Packung

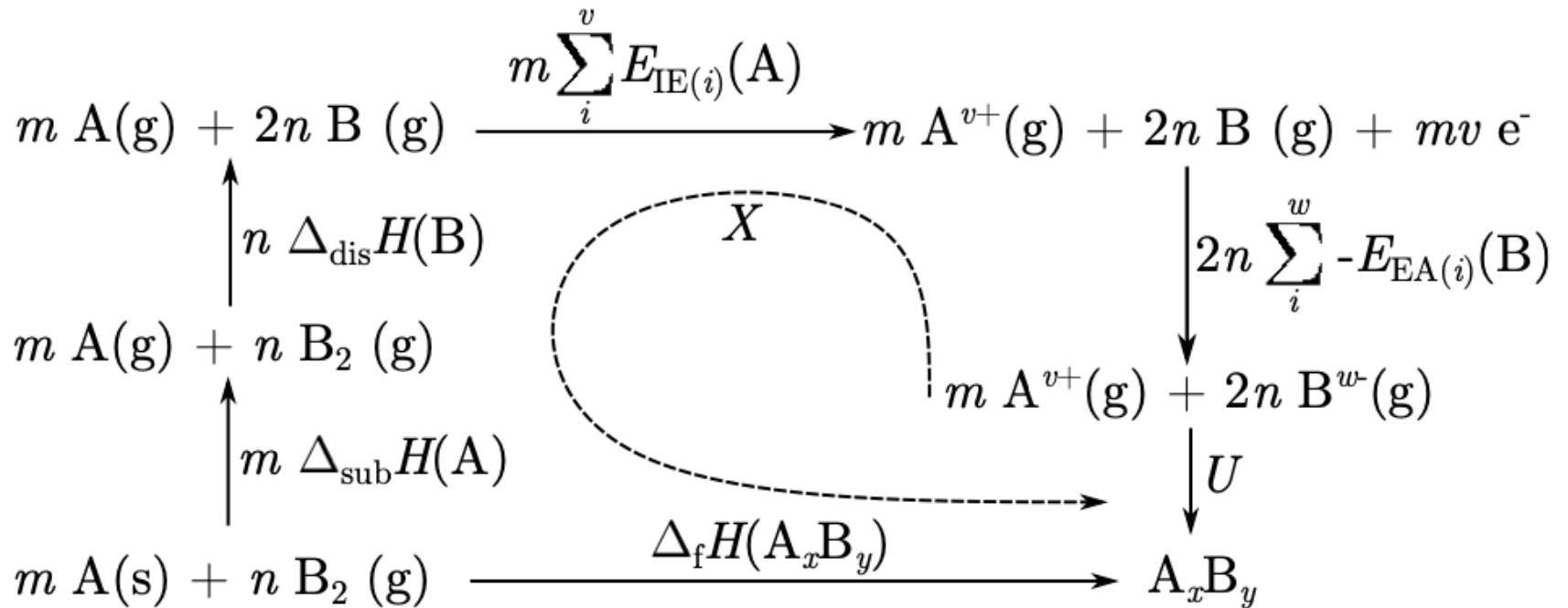
- $\frac{r_{Kation}}{r_{anion}}$ Abhängig von diesem Verhältnis sind bestimmte Gitter energetisch besser für die Struktur
- CsCl / CaF₂ > 0.73
- NaCl / TiO₂: 0.73-0.41
- ZnS (Zinkblende & Wurzit): 0.41-0.23
- SiO₂: hat kein Radien Verhältnis

3.3 Kräfte im Gitter

- Coulomb Energie $E_C = AN_A \frac{Z^+ Z^- e^2}{4\pi\epsilon_0 d_0}$
 - A: Madelung Konstante, N_A Avogadro Konstante, Z^+, Z^- Ladungen der Ionen
 - e Elementarladung, d_0 Abstand zwei entgegengesetzt geladener Ionen
- London'sche Dispersionsenergie E_D : Energie aus anziehenden Van-der-Waals-Kräften
- Repulsive Wechselwirkung $E_R = \frac{B}{d_0^n}$
 - Stoffspezifische Konstante B und Born-Exponent n müssen gegeben sein
- Nullpunktsenergie E_0 : Die aus dem quantenmechanischen Harmonischen Oszillator abgeleitete Nullpunktsenergie ist bei ionischen Verbindungen vernachlässigbar.
- Gitterenergie $U = E_C + E_D + E_R + E_0 \approx E_C + E_R$

3.4 Haber-Born-Kreisprozess

$$U = X = 2n \sum_i^w E_{EA(i)}(B) - m \sum_i^v E_{IE(i)}(A) - n \Delta_{\text{dis}}H(B) - m \Delta_{\text{sub}}H(A) + \Delta_f H(A_x B_y)$$



3.4.1 Bsp

- Bestimme die Gitterenergie für ein Mol NaCl, via Born-Haber-Kreisprozess

Nützliche Werte und Konstanten [2, 8]:

Avogadro-Konstante	N_A	=	$6.022\ 14 \times 10^{23}\ \text{mol}^{-1}$
Madelung-Konstante	A	=	1.748
Elektrische Feldkonstante	ϵ_0	=	$8.854\ 18 \times 10^{-12}\ \text{C}^2\text{N}^{-1}\text{m}^{-2}$
Elementarladung	e	=	$1.602\ 17 \times 10^{-19}\ \text{C}$
Gleichgewichtsabstand	d_0	=	2.8201 Å
1. Ionisierungsenergie Na	$E_{\text{IE}(1),\text{Na}}$	=	5.139 08 eV
2. Ionisierungsenergie Na	$E_{\text{IE}(2),\text{Na}}$	=	47.2864 eV
1. Ionisierungsenergie Cl	$E_{\text{IE}(1),\text{Cl}}$	=	12.967 64 eV
2. Ionisierungsenergie Cl	$E_{\text{IE}(2),\text{Cl}}$	=	23.814 eV
Elektronenaffinität Na	$E_{\text{EA},\text{Na}}$	=	0.547 926 eV
Elektronenaffinität Cl	$E_{\text{EA},\text{Cl}}$	=	3.612 72 eV
Dissoziationsenthalpie Cl ₂	$\Delta_{\text{dis}}H(\text{Cl}_2)$	=	242 kJ mol ⁻¹
Sublimationsenthalpie Na	$\Delta_{\text{sub}}H(\text{Na})$	=	109 kJ mol ⁻¹
Standardbildungsenthalpie NaCl	$\Delta_{\text{f}}H(\text{NaCl})$	=	-410.9 kJ mol ⁻¹

b) Bestimmen Sie die Gitterenergie für ein Mol NaCl via Born-Haber-Kreisprozess

Lösung

Werte die wir tatsächlich brauchen:

1. Ionisierungsenergie Na	$E_{IE(1),Na}$	=	495 843.7 J mol ⁻¹
Elektronenaffinität Cl	$E_{EA,Cl}$	=	348 573 J mol ⁻¹
Dissoziationsenthalpie Cl ₂	$\Delta_{dis}H(Cl_2)$	=	242 000 J mol ⁻¹
Sublimationsenthalpie Na	$\Delta_{sub}H(Na)$	=	109 000 J mol ⁻¹
Standardbildungsenthalpie NaCl	$\Delta_fH(NaCl)$	=	-410 900 J mol ⁻¹

Kreisprozess:

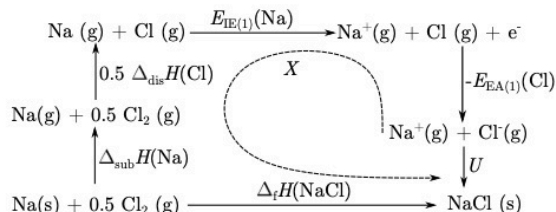


Abbildung 2: Born-Haber-Kreisprozess für NaCl

$$U = X = E_{EA,Cl} - E_{IE(1),Na} - \frac{1}{2} \Delta_{dis}H(Cl_2) - \Delta_{sub}H(Na) + \Delta_fH(NaCl) = -788 170.7 \text{ J mol}^{-1}$$

c) Erklären Sie die Differenz

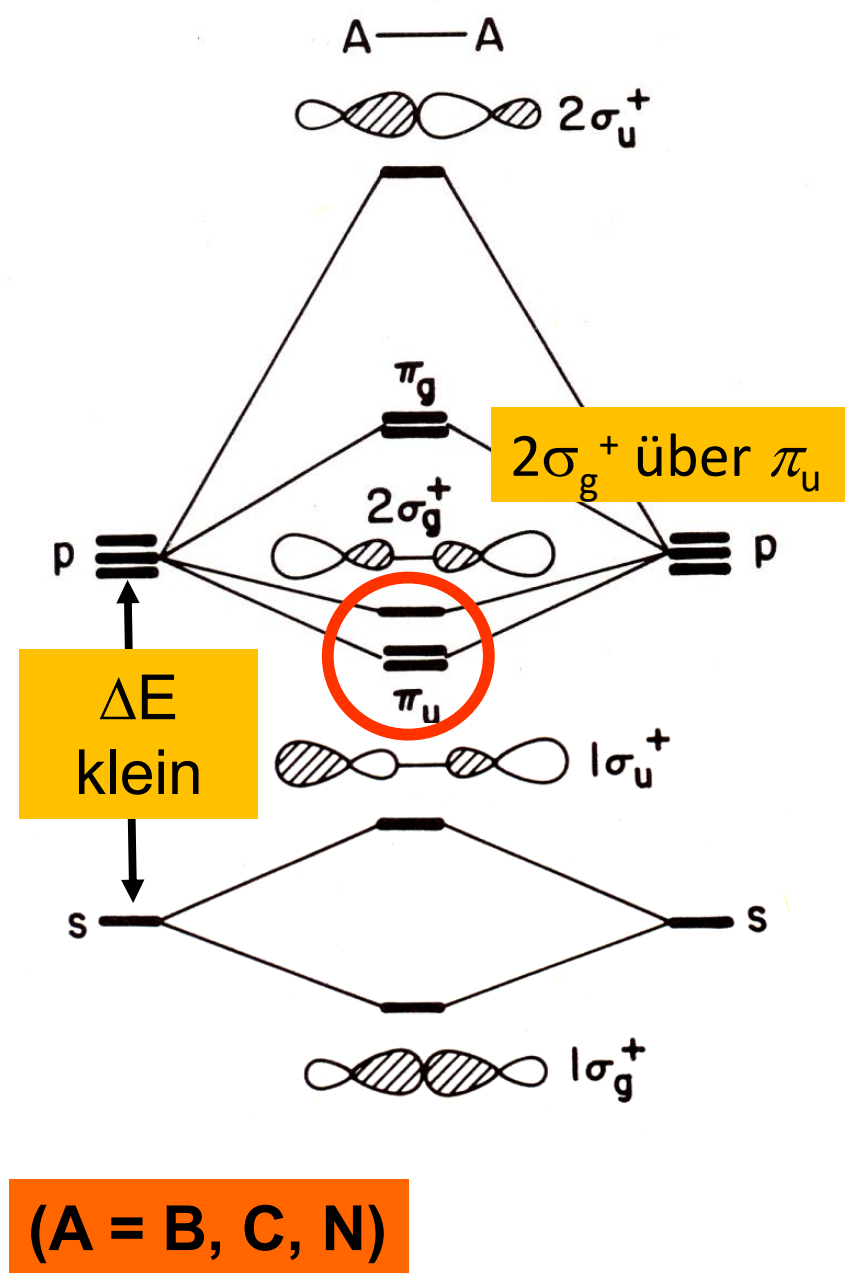
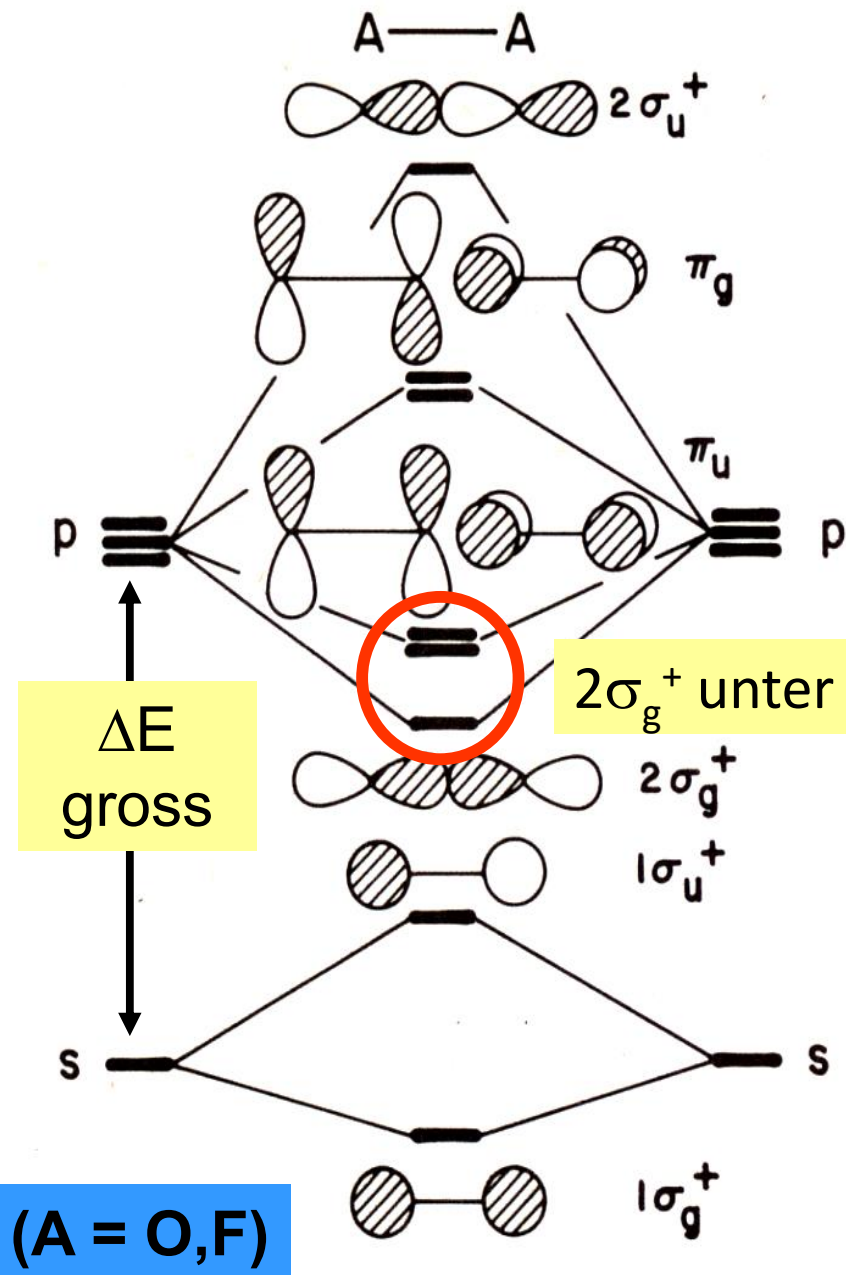
Lösung:

Der berechnete Wert für die Coulomb Energie E_C ist energetisch günstiger als der berechnete Wert für die Gitterenergie U im Gesamten. Diese Differenz entsteht, da U sich aus mehreren Größen zusammensetzt, von denen die Repulsive Wechselwirkung E_R wichtig ist. Diese stammt aus der Abstossung der Elektronenhüllen, die die Struktur energetisch ungünstiger macht, und verringert E_R deshalb den Betrag der Gitterenergie.

4.0 Molekülorbitale Rückblick

- Diamagnetisch: keine ungepaarten Elektronen
- Paramagnetisch: mindest 1 ungepaartes Elektronen
- Bindungsordnung: Je höher die BO, desto kürzer die Bindung
 - $((\#e \text{ Bindend}) - (\#e \text{ nicht-Bindend}))/2 = \text{BO}$
- Gesamtspin $S = \frac{1}{2} \cdot \text{Anzahl Elektronen}$
- Spinmultiplizität = $2S + 1$
- Bezeichnung 1 = singulett, 2 = dublett, 3 = triplett, 4 = quartet usw.

Zweiatomige Moleküle: MO Diagramme im Vergleich



5.0 Tipps Serie 5

- Wiederum Zusammenfassung von Markus Böcker verwenden
- Born-Haber-Kreisprozess