

1. Entwicklung und Aussagen des MO-Schemas von O₂

Auch nach der MO-Theorie entstehen Bindungen durch Überlappung von Atomorbitalen. Anders als bei der Valenzbindungstheorie muss man aber hier nicht von einer Hybridisierung ausgehen, sondern kann die Atomorbitale direkt miteinander kombinieren.

1.1 Veranschaulichen Sie diese Überlappungen für das O₂-Molekül graphisch.

σ-Bindungstypen

Kennzeichen:

.....

.....

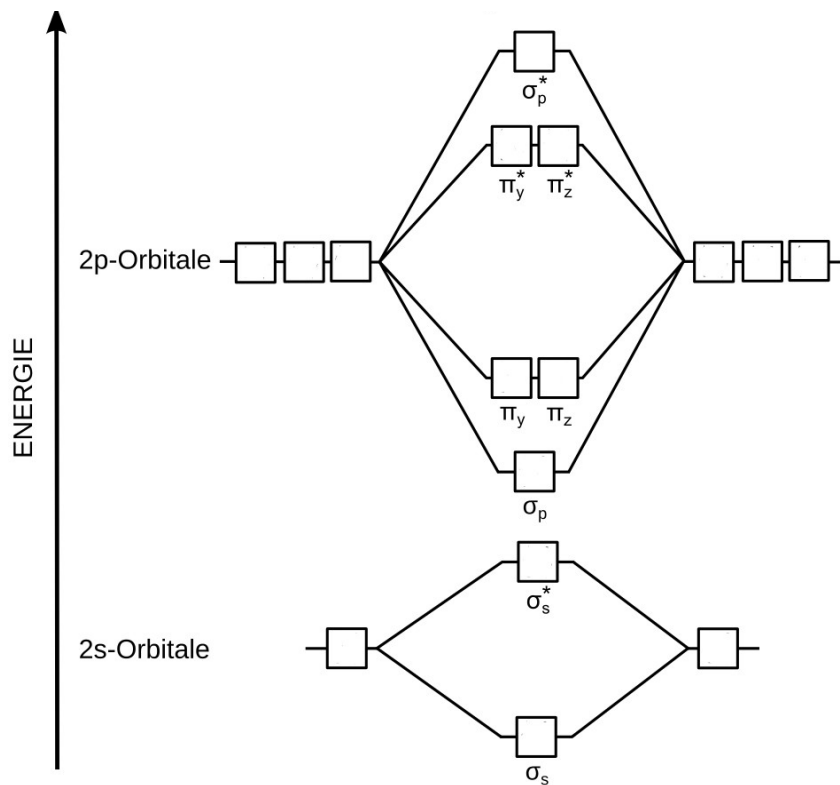
π-Bindungstypen

Kennzeichen:

.....

Herleitung des MO-Schemas

Bei der Kombination von zwei Atomorbitalen, entstehen zwei Molekülorbitale. Dabei kommt es mathematisch zur Energetischen Aufspaltung. Es entsteht eine **bindendes** und ein **antibindendes** Molekülorbital. Je stärker die Wechselwirkung der Orbitale ist, desto höher die Aufspaltung.



1.2 Vervollständigen Sie das MO-Schema des Sauerstoffs im Grundzustand.

1.3 Berechnen Sie die Bindungsordnung und vergleichen Sie mit der typischen Valenzstrichformel.




Abb. 2.1: MO-Schema des Sauerstoffs im Grundzustand. Q: wikicommons. A: Muskid. verändert.

1.4 Der wahre Bindungszustand lässt sich mit einer einfachen Valenzstrichformel nicht angeben. Beschreiben Sie die Widersprüche zwischen der Valenzstrichformel und den Aussagen des MO-Schemas.

2. Elektronenarrangements und Energieniveaus von Singulett- und Triplett-Sauerstoff

Beide angeregte Zustände sind Singulett-Zustände. Beim 1. angeregten Zustand ist ein π^* -Orbital doppelt besetzt.

2.1 Befüllen Sie die Orbitale mit Elektronen und geben Sie den fehlenden Magnetismus an.

Lebensdauer in Lösung	Energie (kJ/mol)	Orbitalbesetzung der anti-bindenden π^* -Orbitale	Magnetismus
10^{-8} s	158	 2. angeregter Zustand	diamagnetisch
10^{-4} s	95	 1. angeregter Zustand	paramagnetisch (aufgrund anderer Ursache, nicht aufgrund von Elektronenspins)
		 elektronischer Grundzustand	

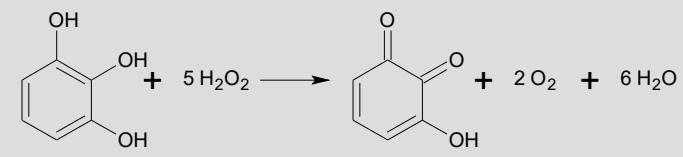
Bei einigen chemischen Reaktionen, bei denen Sauerstoff anfällt, entsteht dieser zuerst in Form von Singulett-Sauerstoff ($^1\text{O}_2$). Dazu gehören insbesondere Reaktionen, bei denen aus der Peroxogruppe (...-O-O-...) O_2 abgespalten wird. Bei diesen Reaktionen kann man ein orange-rotes Leuchten beobachten, das auf die Desaktivierung in den Triplett-Zustand zurückzuführen ist.

Zur Rückkehr in den Grundzustand tauschen zwei Singulett-Sauerstoffmoleküle untereinander Elektronen aus! Für diese Reaktion ist deshalb keine Spinumkehr nötig. Die Energieabgabe erfolgt in Form von Licht:

Rkt.gl:

Energie pro mol O_2 -Paare:

Die Halbwertszeit von Singulett-Zuständen hängt stark von dem sie umgebenden Medium ab und beträgt im günstigsten Fall wenige Sekunden, meist jedoch nur Sekundenbruchteile. Dabei ist der Singulett-Sauerstoff deutlich reaktiver als der Triplett-Sauerstoff.

<p style="text-align: center;"><u>Versuchsanleitung</u></p> <p><u>Durchführung:</u> Sicherheitsvorschriften einhalten. <u>Abzug!</u> Formaldehyd: Stark giftige Dämpfe! Wasserstoffperoxid: Stark ätzend! Heftige Reaktion!</p> <p>Folgende Lösungen bereitstellen, z.B. in Erlenmeyerkölbchen.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Lsg. A: 1 g Pyrogallol in 10 mL H_2O lösen. • Lsg. B: 10 mL Formaldehydlsg. (w = 35 - 40%) • Lsg. C: 5 g Kaliumcarbonat in 10 mL H_2O lösen • Lsg. D: 15 mL Wasserstoffperoxid (w = 30%) <p>In einen großen 500 mL-Erlenmeyerkolben im Abzug in dieser Reihenfolge mischen: Lsg. A + Lsg. B + Lsg. C.</p>	<p>Dann Raum <u>abdunkeln</u> und <u>Auge an Dunkelheit gewöhnen</u>. Anschließend Lsg. D hinzugeben und mischen. Vorsicht: Heftige Reaktion!</p> <p>Beobachtung:</p> <p>.....</p> <p>Erklärung: Es fällt Singulett-Sauerstoff an, der im Verlauf von ca. 30 Sekunden zu Triplett-Sauerstoff unter Lichtabgabe desaktiviert.</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p style="text-align: center;">Zeigen Sie, dass die Elektronenbilanz ausgeglichen ist!</p>
---	--

2.2 Berechnen Sie die Wellenlänge des emittierten Lichts, wenn 1 Paar Singulett-Sauerstoffmoleküle aus dem 1. angeregten Zustand in den Grundzustand zurückkehren. Welche Farbe müsste das Leuchten demnach haben?

[Literaturwert: 630 nm]