

1. Entwicklung und Aussagen des MO-Schemas von O<sub>2</sub>

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 O<sub>2</sub>-Molekül graphisch.

**σ-Bindungstypen**

Kennzeichen: .....

.....

.....

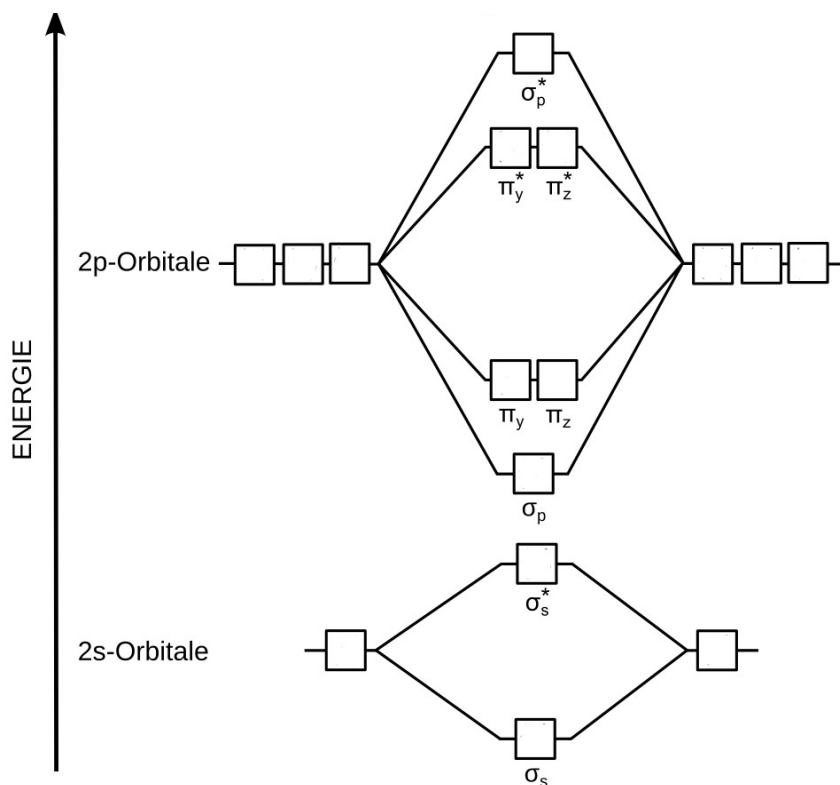
**π-Bindungstypen**

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. Quelle: Wikimedia Commons. Autor: 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. Elektronenanordnungen und Energieniveaus von Singulett- und Triplett-Sauerstoff

Beide angeregte Zustände sind Singulett-Zustände. Beim 1. angeregten Zustand ist ein  $\pi^*$ -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 $\pi^*$ -Orbitale	Magnetismus
$10^{-9}\text{s}$	155	 2. angeregter Zustand	<b>diamagnetisch</b>
$10^{-4}\text{s}$	92	 1. angeregter Zustand	<b>paramagnetisch</b> (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-...)  $\text{O}_2$  abgespalten wird. Bei diesen Reaktionen kann man ein orange-rotes Leuchten beobachten, dass 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:

Die Halbwertszeit von Singulettzuständen 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.

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