

# Zwischenmolekulare Kräfte

## Lernziele

- Sie können die Orientierung von Molekülen zueinander basierend auf den vorherrschenden zwischenmolekularen Kräften nachvollziehen
- Sie lernen erste Schritte im Umgang mit dem Programm AVOGADRO
- Sie vertiefen Ihre Kenntnisse zu den zwischenmolekularen Kräften von Wasser

Anhand von zwischenmolekularen Wechselwirkungen lassen sich viele physikalische Effekte wie Oberflächenspannung oder Viskosität, aber auch die Existenz unterschiedlicher Aggregatzustände erklären.

Zwischenmolekulare Wechselwirkungen sind schwache Wechselwirkungen in Folge elektrostatischer Anziehung. Da diese Kräfte in der Regel deutlich schwächer als chemische Bindungen sind, werden diese Wechselwirkungen – wenn überhaupt – durch eine gestrichelte Linie zwischen den Atomen (Wasserstoffbrücken), beziehungsweise Ladungsschwerpunkten (Dipole) dargestellt.

## Aufgabe 1a

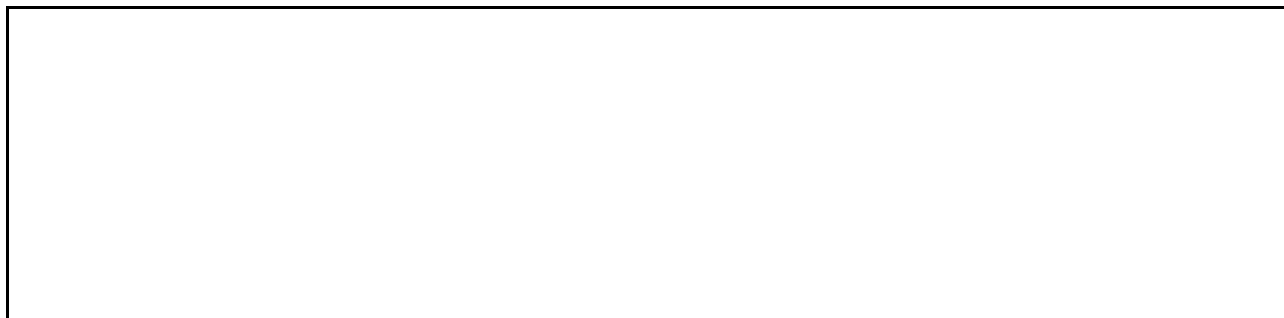
- Zeichnen Sie ein Formaldehydmolekül  $\text{CH}_2\text{O}$  als vollständige Lewis-Formel und bestimmen Sie den Dipol-Vektor in diesem Molekül.
- Wie würde sich vermutlich ein zweites Molekül – basierend auf dem Coulomb-Gesetz – relativ zum ersten Molekül orientieren? Zeichnen Sie die Anordnung dieses zweiten Moleküls ein.

## Aufgabe 1b

- Zeichnen Sie ein Wassermolekül als vollständige Lewis-Formel und bestimmen Sie den Dipol-Vektor in diesem Molekül.
- Wie würde sich vermutlich ein zweites Molekül – basierend auf dem Coulomb-Gesetz – relativ zum ersten Molekül orientieren? Zeichnen Sie die Anordnung dieses zweiten Moleküls ein.

### Aufgabe 1c

- Zeichnen Sie ein Kohlendioxid-Molekül als vollständige Lewis-Formel und bestimmen Sie den Dipol-Vektor in diesem Molekül.
- Wie würde sich vermutlich ein zweites Molekül – basierend auf dem Coulomb-Gesetz – relativ zum ersten Molekül orientieren? Zeichnen Sie die Anordnung dieses zweiten Moleküls ein.



Sie sollen nun mit Hilfe des Programms AVOGADRO überprüfen, ob Ihre Anordnung bei Formaldehyd, beziehungsweise Wasser korrekt ist. <https://two.avogadro.cc/install/index.html>

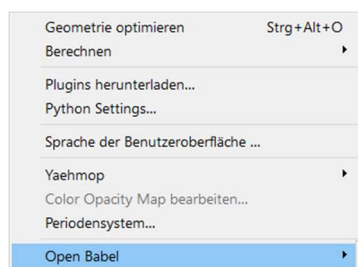
Öffnen Sie das Programm und beachten Sie die folgenden Einstellungen:

Im Tab **Erweiterungen** können die Parameter für die Geometrie-optimierung eingestellt werden

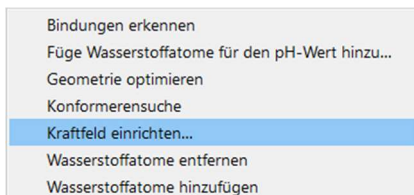
Icon für das Zeichnen-Tool

Icon für das Messgeräte-Tool

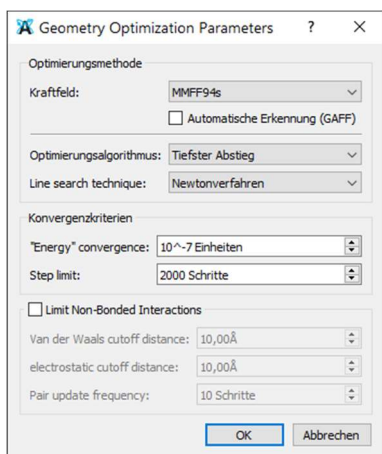
Im Fenster Darstellungsarten sollte zu Beginn nur die Box **Kugel-Stab** ausgewählt sein



Stellen Sie zu Beginn das Kraftfeld für die Geometrie-Optimierung ein. Wählen Sie im Tab **Erweiterungen** den Eintrag **Open Babel** aus.



Wählen Sie dann den Eintrag **Kraftfeld einrichten** aus.



Übernehmen Sie die im Fenster gezeigten Werte:

Kraftfeld **MMFF94s**

Optimierungsalgorithmus: **Tiefster Abstieg**

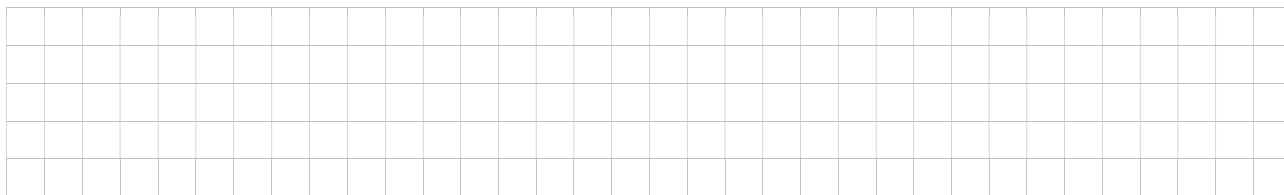
Energy convergence:  **$10^{-7}$  Einheiten**


Step limit: **2000 Schritte**

## Aufgabe 2a

- Öffnen Sie die Datei **Formaldehyd.mol**, indem Sie die Datei in das schwarze Fenster von AVOGADRO ziehen (oder zeichnen Sie das Molekül mit dem Zeichnen-Werkzeug)
- Starten Sie die Geometrie-Optimierung, indem Sie die Tastenkombination **Strg+Alt+O** drücken (bei Mac muss die Geometrie-Optimierung derzeit noch über Open Babel-> Geometrie optimieren durchgeführt werden).
- Wählen Sie das vorhandene Molekül mit **Strg A** aus und duplizieren Sie dieses, indem Sie nacheinander **Strg C** und **Strg V** drücken. Verschieben Sie das kopierte Molekül, indem Sie dieses bei gedrückter Maustaste neben das ursprünglich vorhandene Molekül platzieren.
- Starten Sie die Geometrie-Optimierung, indem Sie die Tastenkombination **Strg+Alt+O** drücken. Sie sehen nun, wie sich die beiden Moleküle entsprechend der elektrostatischen Wechselwirkung zueinander anordnen.
- Wiederholen Sie das Kommando **Strg+Alt+O** bis Sie keine merkliche Änderung in der Anordnung erkennen.


Zeichnen Sie die Anordnung der beiden Moleküle als vollständige Lewis-Formeln. Worauf beruht die Orientierung der Moleküle? Vergleichen Sie das Ergebnis mit Ihrer Anordnung aus **Aufgabe 1a**.

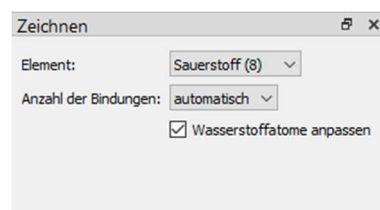


Bestimmen Sie nun den kürzesten Abstand zwischen den beiden Molekülen. Wählen Sie hierfür aus der Menüleiste das Messwerkzeug-Icon  aus und klicken Sie dann nacheinander auf die beiden nächstgelegenen Atome – die Distanz wird unten links in der Einheit Angstrom ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ) angezeigt.

Kürzester Abstand zwischen zwei Molekülen	
---	--


## Aufgabe 2b

- Zeichnen Sie in Avogadro zwei Wasser-Moleküle. Wählen Sie hierfür in der oberen Menüleiste das Icon  aus.
- Wählen Sie bei **Element** die Atomsorte **Sauerstoff** aus
- Klicken Sie nun zwei Mal nahe nebeneinander in das rechte Fenster – es sollten nun zwei Wasser-Moleküle sichtbar sein
- Starten Sie die Geometrie-Optimierung, indem Sie die Tastenkombination **Strg+Alt+O** drücken. Wiederholen die das Kommando **Strg+Alt+O** bis Sie keine weitere merkliche Änderung in der Anordnung erkennen.



Zeichnen Sie die Anordnung der beiden Moleküle als vollständige Lewis-Formeln und vergleichen Sie das Ergebnis mit Ihrer Anordnung aus **Aufgabe 1b**.

Worin besteht ein wesentlicher Unterschied zwischen der Orientierung zweier Formaldehyd-Moleküle und zweier Wasser-Moleküle?

Bestimmen Sie nun den kürzesten Abstand zwischen den beiden Molekülen. Wählen Sie hierfür aus der Menüleiste das Messwerkzeug-Icon  aus und klicken Sie dann nacheinander auf die beiden nächstgelegenen Atome – die Distanz wird unten links in der Einheit Angstrom ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ) angezeigt.

Kürzester Abstand zwischen zwei Molekülen	
---	--

Vergleichen Sie die beiden Abstände bei Formaldehyd und bei Wasser. Was kann man daraus schliessen? Recherchieren Sie hierzu auch die Siedepunkte der beiden Substanzen und lassen Sie diese Werte in Ihre Interpretation mit einfließen.

Siedepunkt Formaldehyd	
Siedepunkt Wasser	


- Aktivieren Sie nun unter **Darstellungsarten** den Eintrag **Enge Kontakte**; in der Folge sehen Sie nun eine sogenannte Wasserstoffbrücke zwischen dem partiell positiven H-Atom und dem partiell negativen O-Atom
- Fügen Sie einige weitere Wassermoleküle im rechten Fenster hinzu und starten Sie immer wieder die Geometrie-Optimierung, indem Sie die Tastenkombination **Strg+Alt+O** drücken. Wiederholen Sie das Kommando **Strg+Alt+O** bis Sie keine weitere merkbare Änderung in der Anordnung erkennen.

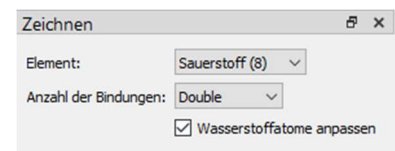


Worauf könnte die Wasserstoff-Brücke beim Sauerstoff-Atom zielen?

Wie viele Wasserstoff-Brücken können Sie maximal an einem Wasser-Molekül beobachten? Platzieren Sie hier für mehrere Wasser-Moleküle möglichst nahe beieinander.

### Aufgabe 2c

- Zeichnen Sie in Avogadro ein Kohlendioxid-Molekül. Wählen Sie hierfür in der oberen Menüleiste das Icon aus.
  - Wählen Sie bei **Element** die  zuerst die Atomsorte **Kohlenstoff** aus und klicken Sie ein Mal in das rechte Fenster – Sie sehen nun ein Methan-Molekül CH<sub>4</sub>.
  - Wählen Sie bei **Element** nun die Atomsorte **Sauerstoff** aus und wählen Sie bei Anzahl der Bindungen Double aus.
- 
- Klicken Sie im rechten Fenster auf das Kohlenstoff-Atom und ziehen Sie bei gedrückter Maustaste die Bindung weg vom C-Atom. Wiederholen Sie diesen Vorgang in die andere Richtung – es sollte nun ein CO<sub>2</sub>-Molekül zu sehen sein (ignorieren Sie mögliche falsche Bindungswinkel / ungleiche Bindungslängen)
  - Wählen Sie das vorhandene Molekül mit **Strg A** aus und duplizieren Sie dieses, indem Sie nacheinander **Strg C** und **Strg V** drücken. Verschieben Sie das kopierte Molekül, indem Sie dieses bei gedrückter Maustaste neben das ursprünglich vorhandene Molekül platzieren.
  - Starten Sie die Geometrie-Optimierung, indem Sie die Tastenkombination **Strg+Alt+O** drücken.



Beschreiben Sie, was Sie erkennen können und geben Sie eine Erklärung für das unterschiedliche Verhalten ab.

Gäbe es keine zwischenmolekularen Kräfte, so müssten alle Stoffe gasförmig sein. Je stärker die zwischenmolekularen Kräfte, desto höher der Siedepunkt und – mit Einschränkungen – der Schmelzpunkt einer Substanz. Im Folgenden sollen die Substanzen Wasser und Fluorwasserstoff (HF) miteinander verglichen werden.

Recherchieren Sie den Schmelzpunkt von Wasser und Fluorwasserstoff.

Schmelzpunkt H <sub>2</sub> O		Schmelzpunkt HF	
-------------------------------	--	-----------------	--

Zeichnen Sie jeweils die vollständige Valenzstrichformel von Wasser, beziehungsweise Fluorwasserstoff und überlegen Sie sich, was der Grund für die unterschiedlichen Schmelzpunkte sein könnte.

<https://www.swisseduc.ch/chemie/molekularium/kristallstrukturen/kristallstrukturen.htm>

<p><b>Fluorwasserstoff</b></p> <p>JSmol bildet keine Wasserstoffbrücken mit Fluor. Um die Wasserstoffbrücken einzuzeichnen, muss man im Reiter ZMWW also die Option "WBR an Auswahl ... [ein/aus]" verwenden.</p> <p><input checked="" type="radio"/> HF (M = 20.01 g mol<sup>-1</sup>) Fluorwasserstoff</p>	<p><b>Wasser</b></p> <p>Wasserstoffbrücken beim Reiter ZMWW einzeichnen</p> <p><input checked="" type="radio"/> H<sub>2</sub>O (M = 18.02 g mol<sup>-1</sup>) Eis Ih (hexagonal) <input type="radio"/> cif-Datei</p> <p><input type="radio"/> Clathrat <input type="radio"/> cif</p> <p><input type="radio"/> Clathrat: Methanhydrat   Ausschnitte <input type="radio"/> A <input type="radio"/> B</p>
--	--

H-Brücken je H <sub>2</sub> O-Molekül		H-Brücken je HF-Molekül	
---------------------------------------	--	-------------------------	--

Lassen Sie sich nun die Wasserstoffbrücken anzeigen. Wählen Sie hierfür den Tab **ZMWW** aus und ändern Sie den Wert für die Länge der Wasserstoffbrücke auf **2.8**. Durch Klicken auf den **Ein/Aus** Button erscheinen nun die H-Brücken in der Kristallstruktur.

Datei Wählen Teilen Layout Kristall Objekte **ZMWW** AO LCAO MO Schwingungen

Wasserstoffbrücken WBR: Automatisch einzeichnen [alle](#) | [an](#)  
[Auswahl](#)  
 Grösse 0.02 | 0.05 | 0.1 | 0.2 || [Strich toggle](#)  
[WBR entfernen](#)  
 WBR an Auswahl: Länge:  Winkel  $\geq$

Partialladungen anzeigen : [Zahlen ein](#) | [aus](#)  
 Fläche: Cutoff 0.02 | 0.1  
   % Resol:   
 %  
 Frame:  Transp:

Formalladungen   
 Den ausgewählten Atomen die Formalladung

Darstellung:    
 Auswahl:  (Carboxylgruppen etc.)

Was ist also der Grund für den unterschiedlichen Schmelzpunkt?