**Polare Kovalenzbindungen und Dipol-Moleküle**

## Motivation

Erfahrungsgemäss bereitet die Abschätzung, ob es sich bei einem Molekül um einen Dipol handelt oder nicht, gewisse Schwierigkeiten. Insbesondere durch Vernachlässigung tetraedrischer Strukturelemente kommt es immer wieder zu falschen Ergebnissen bei der Vektoraddition.

## Voraussetzungen

* Coulomb-Gesetz
* Konzept der Elektronegativität
* Regeln zur Darstellung von Valenzstrichformeln
* Unterschied zwischen bindenden und nichtbindenen Elektronenpaaren

## Ablauf

1. Einführung von Polaritätsvektoren und Dipolvektoren anhand einer Phet-Simulation mit Modellen aus zwei und drei Atomen.
2. Vertiefung des Prinzip der Vektoraddition mit Molekularium
3. Anwendung der Konzepte auf reale Moleküle mit Selbstkontrolle via Molview
4. Optional Vertiefung mit etwas grösseren Molekülen

#### Vorteile:

* Einfache und unkomplizierte Simulation einer Vektoraddition
* Effekt von Elektronegativitätsdifferenz und Bindungswinkel unmittelbar erfahrbar
* Möglichkeit der Darstellung mit Elektronendichteverteilung

#### Nachteile:

* Die Phet-Simulation erlaubt Konstellationen, welche unsinnig, beziehungsweise unmöglich sind (zum Beispiel Atome miteinander in Deckung bringen, extreme Bindungswinkel) – darauf sollte hingewiesen werden.

### Hinweise und Einschränkungen

Die Richtung des Polaritäts- beziehungsweise Dipolvektor ist eine Konvention, wobei in der Chemie der Pfeil typischerweise von Plus- zum Minuspol zeigt, in der Physik hingegen die umgekehrte Richtung bevorzugt wird.

Die Ergebnisse, welche Molview liefert, sind mit grosser Vorsicht zu geniessen und es empfiehlt sich, will man andere/weitere Moleküle zum Üben anbieten, die Ergebnisse unbedingt vorher zu überprüfen.

Auf die Darstellung der Polaritätsvektoren mit Molview sollte/muss verzichtet werden, denn im Programm wird nicht der Vektor angezeigt, welcher sich durch isolierte Betrachtung der beiden miteinander verbundenen Atome ergibt, sondern es werden auch die übrigen vorhandenen Atome berücksichtigt. Dies kann dazu führen, dass die Richtung des Vektors umgekehrt zu dem ist, was man aus den reinen DEN-Werten der beiden Atome erwarten würde.

**Polare Kovalenzbindungen und Dipol-Moleküle**

|  |
| --- |
| **Lernziele**   * Sie wissen, unter welchen Umständen eine Kovalenzbindung polar ist. * Sie kennen das Konzept des Polaritätsvektors und können aus der Vektoraddition der Polaritätsvektoren Richtung und den Betrag des resultierenden Dipolvektors abschätzen * Sie kennen Regeln anhand derer Sie bei einfachen Molekülen abschätzen können, ob diese Dipolmoleküle sind, oder nicht |

## Polare und apolare Kovalenzbindungen

Nicht immer wird gleich geteilt, und das gilt auch für Elektronenpaare. Einfach ausgedrückt: Wenn sie mehr Zeit bei einem Atom verbringen als bei dem anderen, sind sie nicht gleichmässig verteilt. Dies ist der Fall, wenn es einen Unterschied in der **Elektronegativität** der gebundenen Atome gibt, da das elektronegativere Atom eine grössere Anziehungskraft auf die gemeinsam genutzten Elektronen ausübt und somit mehr "Besitz" über das Elektronenpaar erlangt. Der Begriff "Elektronegativität" wurde von dem schwedischen Chemiker Jöns Jacob Berzelius im Jahr 1811 eingeführt, allerdings war das Konzept schon vorher bekannt. Eine genaue Skala der Elektronegativität wurde allerdings erst 1932 entwickelt, als der amerikanische Chemiker Linus Pauling Elektronegativitätswerte für die einzelnen Atome vorschlug, welche er anhand der Bindungsenergien von Kovalenzbindungen berechnet hatte – die von ihm ermittelten Werte sind in der untenstehenden Grafik aufgeführt.

J. J. Berzelius (1779-1848)

#### Elektronegativität

Die Elektronegativität eines Elements ist ein Mass für die Fähigkeit seiner Atome, Elektronen in einer kovalenten Bindung anzuziehen. Sie ist mit der Ionisierungsenergie verwandt, da sie ebenfalls ein Mass für die Anziehungskraft zwischen dem Kern und seinen äusseren Elektronen ist. Ein Element mit hoher Elektronegativität hat eine starke Anziehungskraft auf Elektronen, ein Element mit niedriger Elektronegativität eine schwache Anziehungskraft. Die allgemeinen Tendenzen sind die gleichen wie bei der Ionisierungsenergie:

* Die Elektronegativität nimmt über eine Periode hinweg von links nach rechts zu, da die Kernladung zunimmt und die Anziehungskraft zwischen dem Kern und den Bindungselektronen steigt.
* Die Elektronegativität nimmt innerhalb einer Gruppe von oben nach unten ab. Die Bindungselektronen sind immer weiter vom Kern entfernt, so dass die Anziehungskraft geringer ist.
* Das elektronegativste Element steht im Periodensystem oben rechts, das am wenigsten elektronegative Element unten links.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| H  2.2 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | He |
| Li  0.98 | Be  1.57 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | B  2.04 | C  2.55 | N  3.04 | O  3.44 | F  3.98 | Ne |
| Na  0.93 | Mg  1.31 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | Al  1.61 | Si  1.9 | P  2.19 | S  2.58 | Cl  3.16 | Ar |
| K  0.82 | Ca  1 | Sc  1.36 | Ti  1.54 | V  1.63 | Cr  1.66 | Mn  1.55 | Fe  1.83 | Co  1.88 | Ni  1.91 | Cu  1.9 | Zn  1.65 | Ga  1.81 | Ge  2.01 | As  2.18 | Se  2.55 | Br  2.96 | Kr  3.0 |
| Rb  0.82 | Sr  0.95 | Y  1.22 | Zr  1.33 | Nb  1.6 | Mo  2.16 | Tc  1.9 | Ru  2.2 | Rh  2.28 | Pd  2.2 | Ag  1.93 | Cd  1.69 | In  1.78 | Sn  1.96 | Sb  2.05 | Te  2.1 | I  2.66 | Xe  2.6 |
| Cs  0.79 | Ba  0.89 | La  1.1 | Hf  1.3 | Ta  1.5 | W  2.36 | Re  1.9 | Os  2.2 | Ir  2.2 | Pt  2.2 | Au  2.4 | Hg  1.9 | Tl  1.8 | Pb  1.8 | Bi  1.9 | Po  2 | At  2.2 | Rn |
| Fr  0.7 | Ra  0.9 | Ac  1.1 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |

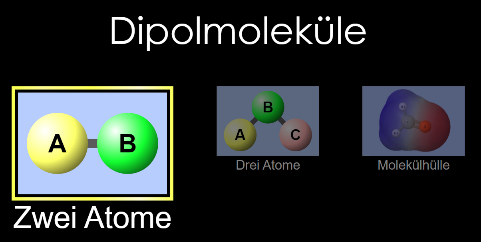
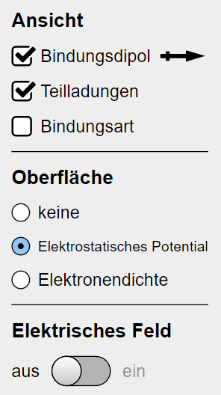
## Dipol-Moleküle

Wenn Atome mit unterschiedlichen Elektronegativitäten eine kovalente Bindung eingehen, entsteht eine unsymmetrische Bindung, da die Elektronen nicht gleichmässig zwischen den beiden Atomen aufgeteilt sind - die Bindung wird als polar bezeichnet. Der Begriff **Dipol** wird häufig verwendet, um darauf hinzuweisen, dass diese Art von Bindung zwei getrennte, entgegengesetzte elektrische Ladungen aufweist. Das elektronegativere Atom - mit dem grösseren Anteil an Elektronen - ist teilweise negativ geworden oder d, und das weniger elektronegative Atom ist teilweise positiv geworden oder d+. Die Eigenschaften einer polaren kovalenten Bindung können auch mit Hilfe eines **Polaritätsvektors** beschrieben werden.

**Aufgabe 1**

In einem ersten Schritt sollten Sie sich mit den Phänomenen polarer Bindungen vertraut machen. Öffnen Sie den folgenden Link:

<https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-polarity/latest/molecule-polarity_de.html>

Wählen Sie zunächst die OptionZwei Atomeund markieren Sie die Kästchen Bindungsdipol und Teilladungen sowie die Schaltfläche Elektrostatisches Potential. Der Bindungsdipol zeigt hierbei den Polaritätsvektor an.

Erkunden Sie die Simulation: Verändern Sie den Wert für die Elektronegativität der beiden Atome mit dem Schieberegler und beobachten Sie die Auswirkung auf Richtung und Länge des Polaritätsvektors. Beantworten Sie die folgenden zwei Fragen:

In welche Richtung zeigt der Polaritätsvektor?

Der Polaritätsvektor zeigt vom partiell positiven Atom hin zum partiell negativen Atom

Wovon hängt die Länge des Polaritätsvektors ab?

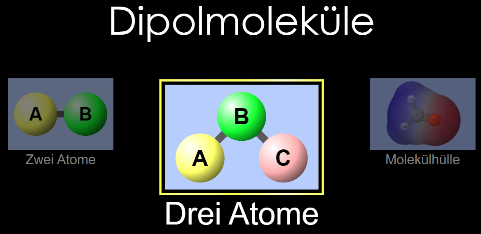
Von der Grösse des Unterschieds der Elektronegativität der beiden Atome

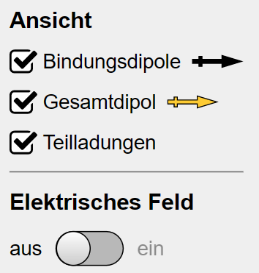
Die einzigen Bindungen, die wirklich unpolar sind, sind Bindungen zwischen denselben Atomen eines Elements, wie die Bindungen in F2, H2 und O2, denn hier ist der Unterschied in der Elektronegativität eindeutig null (auch hier gibt es Ausnahmen, wie man beispielsweise beim Ozon-Molekül O3 sieht). Diese werden manchmal auch als **rein kovalent** bezeichnet. Alle anderen Bindungen weisen einen gewissen Grad an Polarität auf, der allerdings sehr gering sein kann. Die Bindung CH, die in der organischen Chemie allgegenwärtig ist, wird oft als weitgehend unpolar angesehen, obwohl Kohlenstoff tatsächlich etwas elektronegativer ist als Wasserstoff. Als Faustregel gilt, dass Unterschiede von DEN < 0.4 in der Regel vernachlässigt werden können und die jeweiligen Bindungen als im Wesentlichen unpolar angesehen werden können.

Das Vorhandensein polarer Bindungen in einem Molekül hat einen erheblichen Einfluss auf seine Eigenschaften. Die Gesamtpolarität eines Moleküls hängt davon ab, welche polaren Bindungen es enthält und wie diese zueinander ausgerichtet sind, mit anderen Worten, von der Form des Moleküls. Enthält ein Molekül mehr als nur einen Polaritätsvektor, bestimmt die Addition aller dieser Vektoren, ob das gesamte Molekül ein Dipol ist oder nicht.   
Sind die Bindungen von gleicher Polarität (d. h. mit denselben Elementen) und symmetrisch zueinander angeordnet, so sind ihre Ladungstrennungen einander entgegengesetzt und heben sich somit gegenseitig auf. In diesen Fällen ist das Molekül kein Dipol, obwohl es polare Bindungen enthält.

Zusammengefasst: Ein Molekül kann polare Bindungen enthalten, ohne ein Dipol zu sein. Andererseits ist es eine Voraussetzung für ein Dipol-Molekül, polare Bindungen zu enthalten. Das Vorhandensein eines Dipols kann mit einem sehr einfachen Experiment nachgewiesen werden: Flüssigkeitstropfen werden in Gegenwart eines elektrischen Feldes beeinflusst, wenn die Substanz aus Dipol-Molekülen besteht.

**Aufgabe 2**

****Gehen Sie nun zur Simulation mit drei Atomen über und wählen Sie zunächst die OptionBindungsdipole, Gesamtdipol und Teilladungen aus.

Variieren Sie sowohl den Winkel (klicken Sie auf ein Atom und ändern Sie seine Position) als auch den Wert für die Elektronegativität der Atome. Der gelbe Pfeil ergibt sich aus der Vektoraddition der beiden schwarzen Pfeile. Das Lernziel besteht darin, sowohl die Richtung als auch den Betrag des gelben Gesamtdipol-Pfeils zu verstehen.

Beachten Sie, dass in einem realen Molekül der Winkel zwischen den Atomen (ausser in cyclischen Molekülen) selten deutlich kleiner als 100° ist und dass man Atome nicht übereinanderlegen kann.

Finden Sie zwei fundamental unterschiedliche Situationen, welche dazu führen, dass der Gesamtdipolvektor gleich Null ist und beschreiben Sie diese.

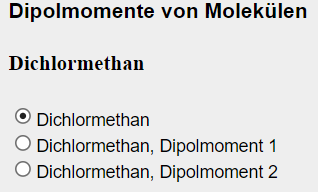
* Elektronegativität aller beteiligter Atome ist gleich
* Elektronegativität von Atom 1 und 3 ist gleich und es handelt sich um ein lineares Molekül

Zeichnen Sie die Lewis-Formel eines realen Moleküls, welches aus lediglich drei Atomen besteht und kein Dipol ist.

* Kohlendioxid
* Schwefelkohlenstoff

Zeichnen Sie die Lewis-Formel eines realen Moleküls, welches aus lediglich drei Atomen besteht und ein besonders starker Dipol ist.

* Wasser
* Cyanwasserstoff

**Vertiefung**

Rufen Sie die folgende Website auf:

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

Betrachten Sie zuerst das Molekül Dichlormethan und Wählen Sie dann nacheinander die Schaltknöpfe Dichlormethan, Dipolmoment 1 und Dichlormethan, Dipolmoment 2 aus. Versuchen Sie, die Vektoraddition zum Gesamtvektor nachzuvollziehen.

Wiederholen Sie das Vorgehen für das Molekül Trichlormethan.

**Aufgabe 3**

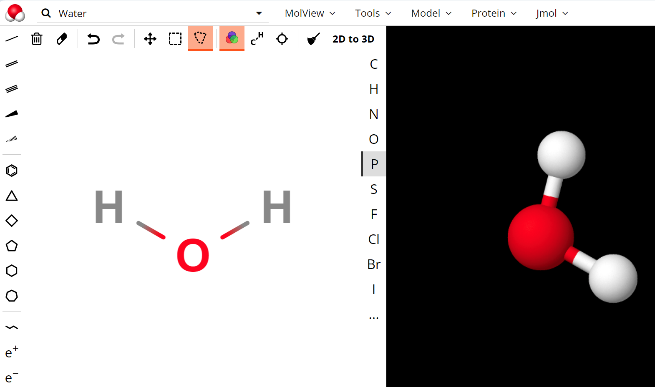
* Zeichnen Sie die vollständige Formel der unten aufgeführten Moleküle in der Keil-Strich-Darstellung.
* Notieren Sie für alle Atome deren Elektronegativität
* Zeichnen Sie für jede Kovalenzbindung einen Polaritätsvektor. Beachten Sie hierbei, dass dessen Länge näherungsweise proportional zur Elektronegativitätsdifferenz ist. Geben Sie ausserdem für jedes Atom an, ob dieses eine eher positive oder negative Teilladung (d+ oder d-) besitzt.
* Ermitteln Sie anhand einer abschätzenden Vektoraddition Richtung und Betrag des Gesamtdipol-Vektors und zeichnen Sie diesen ein. Entscheiden Sie, ob das jeweilige Molekül ein Dipol (stark oder schach) ist, oder nicht

Das Prinzip wird im Folgenden anhand des Wasser-Moleküls als Beispiel demonstriert. Wie man die MEP Oberfläche erzeugt, wird weiter unten erklärt und soll erst im Rahmen der Selbstkontrolle gemacht werden.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Valenzstrichformel und Dipolvektor | MEP Oberfläche | Bemerkungen |
| H2O |  | Die Elektronegativität des Sauerstoffatoms (3.6) ist höher als die des Wasserstoffatoms (2.2). Es gibt zwei Polaritätsvektoren vom Wasserstoff zum Brom mit Länge proportional zu DEN (1.4). Addition dieser beiden Vektoren ergibt den Dipolvektor. Positiver Pol zwischen den H-Atomen, negativer Pol beim O-Atom. |
| HBr  Hydrogen bromide |  | **mittelstarker Dipol** aufgrund mässiger Elektronegativitätsdifferenz |
| CH3F  Fluoromethane |  | **Starker Dipol**, positiver Pol liegt im Zentrum der drei H-Atome |
| CHClO  Formyl chloride |  | **mittelstarker Dipol** da sich die Polaritätsvektoren teilweise aufheben |
| CH2O  Formaldehyde |  | **Starker Dipol**, positiver Pol liegt in der Mitte der zwei H-Atome |
| CF2O  Carbonyl fluoride |  | Nur **schwacher Dipol**, da sich die Polaritätsvektoren nahezu aufheben |

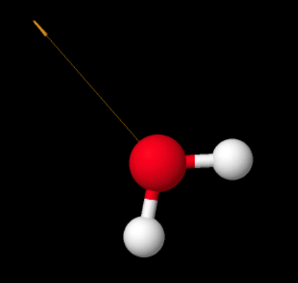
## Überprüfung Ihrer Lösungen

Kontrollieren Sie nun Ihre Lösungen, indem Sie die Website https://molview.org öffnen

Geben Sie im Fenster oben links den Englischen Substanznamen (brauner Name in der Tabelle) ein und drücken Sie Enter - im rechten Fenster ist nun die 3D-Struktur des Moleküls zu sehen (im Beispiel das Molekül Wasser).

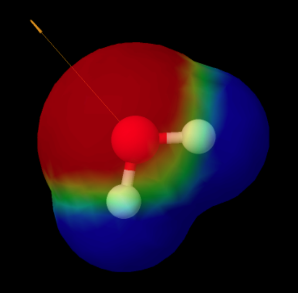


Bevor Sie den Dipolvektor messen, sollten Sie eine Energieminimierung durchführen, um möglichst genaue Resultate zu erhalten: Wählen Sie im Menü den Eintrag Jmol aus und dann das Feld Energy minimization. Es erscheint nun eine Warnung, dass das Ergebnis falsch sein könnte … wählen Sie Don’t show again.

Um den Dipolvektor bestimmen zu können, wählen Sie erneut aus dem Menü den Eintrag Jmol aus. Nun können Sie durch Auswahl des Feldes Overall Dipole das Ergebnis der Vektoraddition anzeigen lassen. Es erscheint wieder eine Warnung, dass das Ergebnis ungenau sein könnte … wählen Sie auch in diesem Fall Don’t show again.

Beachten Sie hierbei, dass der Ursprung des Vektors, welcher dem positiven Schwerpunkt im Molekül entspricht, nicht unbedingt korrekt ist. Der Pfeil zeigt aber richtig an, wo hinsichtlich Orientierung in etwa der positive und negative Schwerpunkt liegen

Insgesamt sind die Ergebnisse, welche man mit dieser Simulation erhält, mit grosser Vorsicht zu geniessen. Hinsichtlich der oben gewählten Beispiele ergeben sich aber sinnvolle Resultate.

Einen guten Eindruck vermittelt die Darstellung des Elektronenpotentials dar, also der Elektronendichteverteilung im Molekül. Wählen Sie erneut aus dem Menü den Eintrag Jmol aus. Nun können Sie durch Auswahl des Feldes MEP surface lucent positive und negative Bereiche auf der Oberfläche des Moleküls anzeigen.

Rot entspricht Bereichen mit hoher Elektronendichte (partiell negativ), blau Bereichen mit tiefer Elektronendichte (partiell positiv).

Nutzen Sie die Ausschneide-Funktion und kopieren Sie eine Abbildung des jeweiligen Moleküls in der MEP-Darstellung in die Tabelle.