



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.

## Aufgabe 2

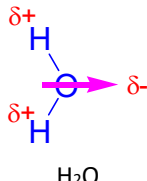
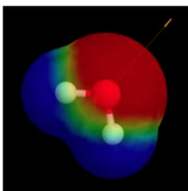


- ☒ Dichlormethan
- ☐ Dichlormethan, Dipolmoment 1
- ☐ Dichlormethan, Dipolmoment 2

### Aufgabe 3

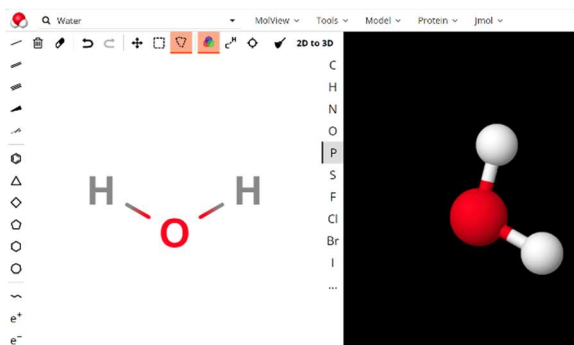
- Zeichnen Sie die vollständige Formel der unten aufgeführten Moleküle in der Keil-Strich-Darstellung.
- Notieren Sie für alle Atome deren Elektronegativität
- Zeichnen Sie für jede Kovalenzbindung einen Polaritätsvektor. Beachten Sie hierbei, dass dessen Länge näherungsweise proportional zur Elektronegativitätsdifferenz ist. Geben Sie ausserdem für jedes Atom an, ob dieses eine eher positive oder negative Teilladung ( $\delta+$  oder  $\delta-$ ) 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 schwach) 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.**

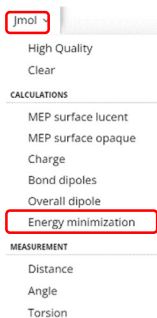
Valenzstrichformel und Dipolvektor	MEP surface	Bemerkungen
 <p>H<sub>2</sub>O</p>		<p>Die Elektronegativität des Sauerstoffatoms (3.44) ist höher als die des Wasserstoffatoms (2.2). Es gibt zwei Polaritätsvektoren vom Wasserstoff zum Brom mit Länge proportional zu <math>\Delta EN</math> (1.24). Addition dieser beiden Vektoren ergibt den Dipolvektor. Positiver Pol zwischen den H-Atomen, negativer Pol beim O-Atom; <b>starker Dipol</b></p>
<p>HBr Hydrogenbromide</p>		
<p>CH<sub>3</sub>F Fluoromethane</p>		
<p>CHClO Formyl chloride</p>		
<p>CH<sub>2</sub>O Formaldehyde</p>		
<p>CF<sub>2</sub>O Carbonyl fluoride</p>		

## Überprüfung Ihrer Lösungen

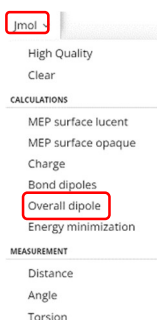
Kontrollieren Sie nun Ihre Lösungen, indem Sie die Website <https://molview.org> öffnen



Geben Sie im Fenster oben links den Englischen Substanznamen (blauer 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).

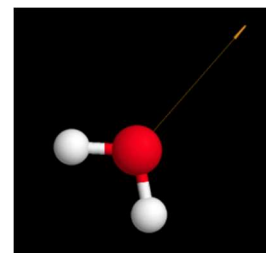


Bevor Sie den Dipolvektor messen, sollten Sie eine Energieminimierung durchführen, um möglichst genaue Resultate zu erhalten: Wählen Sie im Menü den Eintrag **Jmol** aus und dann das Feld **Energy minimization**. Es erscheint nun eine Warnung, dass das Ergebnis falsch sein könnte ... wählen Sie **Don't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

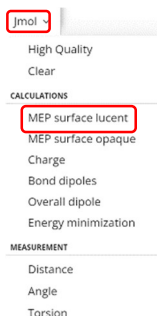


Um den Dipolvektor bestimmen zu können, wählen Sie erneut aus dem Menü den Eintrag **Jmol** aus. Nun können Sie durch Auswahl des Feldes **Overall Dipole** das Ergebnis der Vektoraddition anzeigen lassen. Es erscheint wieder eine Warnung, dass das Ergebnis ungenau sein könnte ... wählen Sie auch in diesem 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 molekularen 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.

