

# Bindungskonzepte vermitteln

## Visualisierung von Bindungen und Wechselwirkungen mit wissenschaftlich fundierten Modellen

KLASSENSTUFE: Sek. II

THEMA: Chemische Bindungen

METHODE: Digitale Modelle

2019 markiert das 80-jährige Jubiläum der Veröffentlichung eines der einflussreichsten Bücher in der Geschichte der Chemie, Linus Pauling's „The Nature of the Chemical Bond“ [1]. Interessanterweise ist das Thema des Buches noch immer Gegenstand intensiver Diskussion. Dies gilt sowohl für tiefgehende physikalische Erklärungen chemischer Bindungen (Warum bilden sich diese überhaupt?) [2] als auch für die geeigneten Modelle für

die Analyse molekularer Strukturen (Valence-Bond- oder Molekülorbital-Theorie?) [3]. Für eine Chemielehrkraft wird es noch herausfordernder: Wie vermitteln wir Bindungskonzepte, die für die Schülerinnen und Schüler nicht nur völlig neu und erst einmal fremdartig sind, sondern die scheinbar auch wenig miteinander zu tun haben? [4] In diesem Beitrag wird beschrieben, wie sich mit der Software ODYSSEY Molecular Explorer (**Kasten 1**) neue Perspektiven für die Veranschaulichung der bindenden Kräfte zwischen Atomen, Ionen und Molekülen ergeben.

### Wissenschaftliches Modellieren im Chemieunterricht

Die hier von uns vorgestellten molekularen Modelle können alle mit den Methoden der modernen Computerchemie wissenschaftlich validiert werden. Diese Art von Modellierung hat heutzutage ihren festen Platz in der chemischen Forschung, wo sie hilft Reaktionen und Mechanismen vorherzusagen und generell zum Verständnis chemischer Prozesse beiträgt. Die auf elementaren

physikalischen Gleichungen basierende Modellierung kann jedoch auch im Bildungsbereich sehr hilfreich sein, um das Struktur-Eigenschafts-Denken zu unterstützen. So ist es möglich, nicht nur die Raumstruktur eines Moleküls zu zeigen, sondern – wenn ein quantenmechanisches Modell benutzt wird – auch die Elektronenwolke [5]. Zudem können intermolekulare Wechselwirkungen nicht nur als Momentaufnahmen visualisiert werden, sondern auch dynamisch durch das Lösen von Newton's Gleichungen für eine Reihe von Molekülen, die miteinander in Wechselwirkung stehen [6].

Im Folgenden werden Beispiele vorgestellt, die illustrieren, wie computergestützte Visualisierungen auf der Basis des Programms Odyssey zu einem besseren Verständnis der Wechselwirkungen zwischen Atomen, Ionen und Molekülen beitragen können. Die Beispiele werden jeweils durch Leitfragen eingeleitet, welche im Anschluss geklärt werden.

### Elektronenwolkenmodelle

#### Kovalente Bindungen

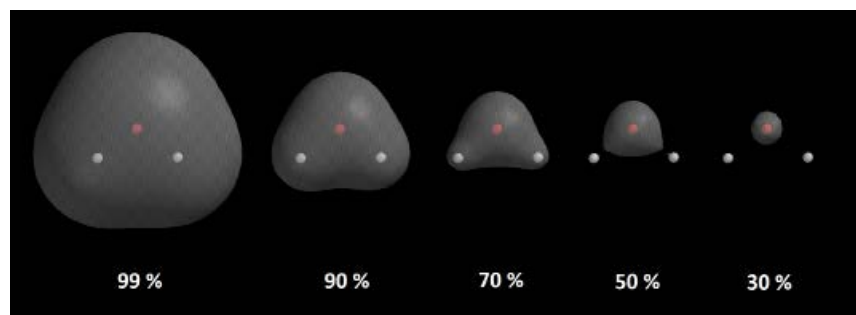
Was bedeuten denn eigentlich die

### ODYSSEY Molecular Explorer / Teilchen und Materie

Wavefunction, Inc., 18401 Von Karman #370, Irvine, CA 92612, USA; sales@wavefun.com  
Abrufbar zu Testzwecken unter <https://www.wavefun.com/demo-request-1>  
Lehrer-Edition: 250 € (1 Computer; permanent);  
Standort-Lizenz: 400 € (≤ 3 Lehrer, ≤ 100 Computer; pro Jahr)

Odyssey ist ein Schwesterprogramm von „Spartan“, einer Software mit der sich quantenmechanische Berechnungen und Modellierungen durchführen lassen. Der wohl wichtigste Unterschied ist, dass in Odyssey Details der Rechnungen und Simulationen vom Programm automatisch gewählt werden und somit „hinter dem Vorhang“ bleiben [7]. Odyssey kommt aus dem amerikanischen Sprachraum, enthält aber auch eine deutschsprachige Komponente, „Teilchen und Materie“. Das Programm ist mit normalen Laptops kompatibel, die das Windows- oder Macintosh-Betriebssystem benutzen.

KASTEN 1



1 | Isooberflächen der Elektronen-Dichte eines Wassermoleküls. Der von einer gegebenen Oberfläche eingeschlossene Bruchteil der gesamten Elektronenhülle ist in Prozent angegeben.

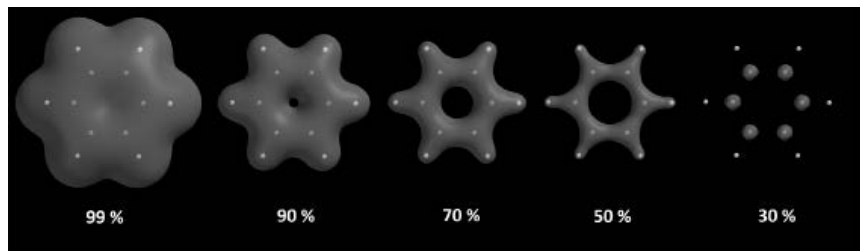
Linien, die die Atome in den Lewis-Strukturen von Molekülen verbinden? Sammeln sich die Elektronen in den kovalenten Bindungen alle an?

**Abbildung 1** zeigt die visualisierte Elektronenhülle eines Wassermoleküls in der Form von Isooberflächen der Elektronendichte: An allen Punkten einer gegebenen Oberfläche hat die Elektronendichte (in Elektronen/ $\text{pm}^3$ ) genau den gleichen Wert.

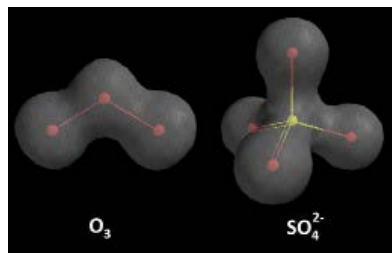
**Abbildung 2** zeigt genau das Gleiche für ein Molekül des Benzols. Die Prozentzahlen zeigen, welcher Anteil der gesamten Elektronenhülle (10 Elektronen für das Wassermolekül und 78 Elektronen für das Molekül des Benzols) von der jeweiligen Isooberfläche eingeschlossen ist. Im Programm können die Oberflächen nacheinander abgefragt werden; hier sind sie der Einfachheit halber nebeneinander gezeigt.

Wenn die Elektronenhülle fast alle Elektronen einschließt (99 % der totalen Dichte), kann man sehen, dass ein Wassermolekül erstaunlich „kugelig“ ist und ein Benzolmolekül eine perfekte sechseckige Gestalt hat. Wenn die Elektronenhülle nur 70 % einschließt, sind die kovalent gebundenen Atome in der Tat durch breite Kanäle der Elektronendichte verbunden. Bemerkenswert sind die Oberflächen, wenn die Elektronenhülle nur 50 % oder 30 % der totalen Dichte einschließt – in diesem Fall ist von der Elektronendichte kaum etwas für die Wasserstoffatome übrig. Dementsprechend sind letztere in der Röntgendiffraktometrie normalerweise nicht zu sehen (die Elektronendichte für den Streuprozess ist insgesamt zu gering).

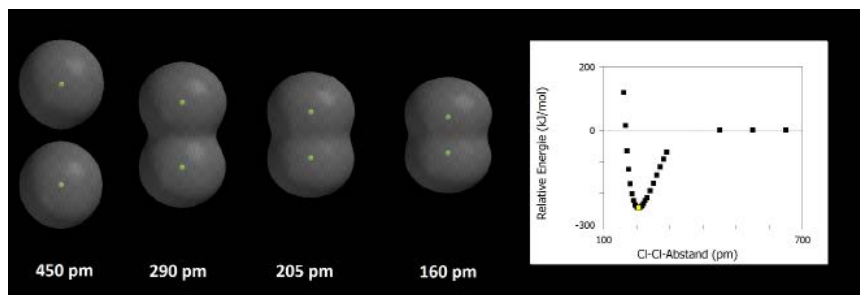
Die Tatsache, dass das Benzolmolekül als ein perfektes Sechseck erscheint, illustriert außerdem, dass die oft gezeigten „Resonanzstrukturen“ des Benzolmoleküls mit zwei verschiedenen Bindungslängen den Sachverhalt nicht angemessen darstellen. **Abbildung 3** zeigt zwei weitere Beispiele, bei denen die tatsächliche Struktur nichts mit einer Fluktuation zwischen zwei Resonanzstrukturen zu tun hat. Sowohl im Ozonmolekül als auch im Sulfation sind alle Bindungen gleichartig, da jede O-O-Bindung und



**2** | Isooberflächen der Elektronen-Dichte eines Benzolmoleküls. Der von einer gegebenen Oberfläche eingeschlossene Bruchteil der gesamten Elektronenhülle ist in Prozent angegeben.



**3** | Isooberflächen der Elektronen-Dichte eines Ozonmoleküls (links) und eines Sulfations (rechts). Ungefähr 80 % der totalen Elektronendichte wird von den beiden Oberflächen eingeschlossen.



**4** | Isooberflächen der Elektronendichte bei der gegenseitigen Annäherung von zwei Chloratomen.

jede S-O-Bindung von der Bindungslänge her gleich ist.

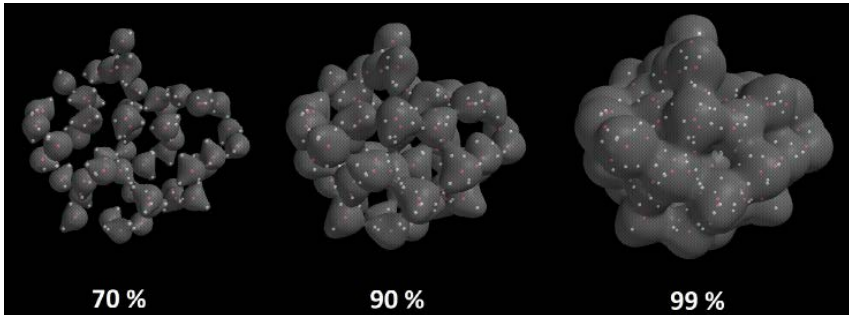
Bilden sich kovalente Bindungen spontan, wenn sich Atome mit einer geeigneten Elektronenkonfiguration annähern? **Abbildung 4** zeigt, wie sich die Elektronenhüllen vereinigen, wenn sich zwei Chloratome genügend nahekommen. Eine häufige Fehlvorstellung ist, dass das so entstandene Molekül nun eine starre Einheit bildet und eine ganz bestimmte Bindungslänge hat. Die beiden Atome können jedoch durchaus auch einen etwas kleineren oder etwas größeren Abstand haben – nur ist die Bindung dann temporär schwächer und das gestörte Gleichgewicht zwischen anziehenden und abstoßenden Kräften, das mit den Seiten der Potentialmulde assoziiert ist, treibt das Molekül zum optimalen Bindungsabstand zurück. Die Konsequenz ist, dass das Molekül vibriert. (**Hinweis:** Dieses einfache

klassische Bild ist nur angebracht, solange kein Wasserstoffatom an der Bindung beteiligt ist und solange die Temperatur hoch genug ist, dass der Effekt der quantenmechanischen Nullpunktsenergie vernachlässigt werden kann.)

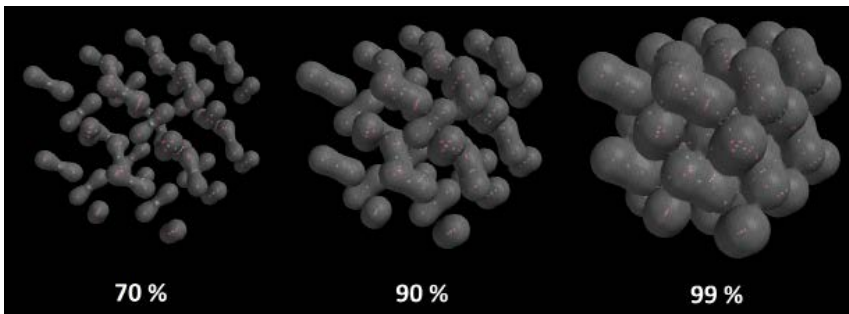
Im Fall des Chlormoleküls beträgt der optimale Bindungsabstand 205 pm. Hier wird das energetische Minimum erreicht. Für kürzere Bindungslängen steigt die Energie wieder an; bei 160 pm ist die relative Energie bereits eindeutig abstoßend.

## Molekülaggregate und intermolekulare Wechselwirkungen

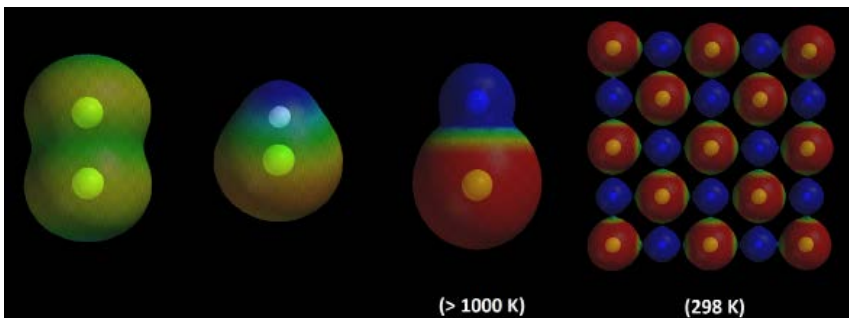
Eine weit verbreitete Fehlvorstellung ist, dass intra- und intermolekulare Kräfte fundamental andere Ursachen haben (vgl. S. 2 ff. in diesem Heft).



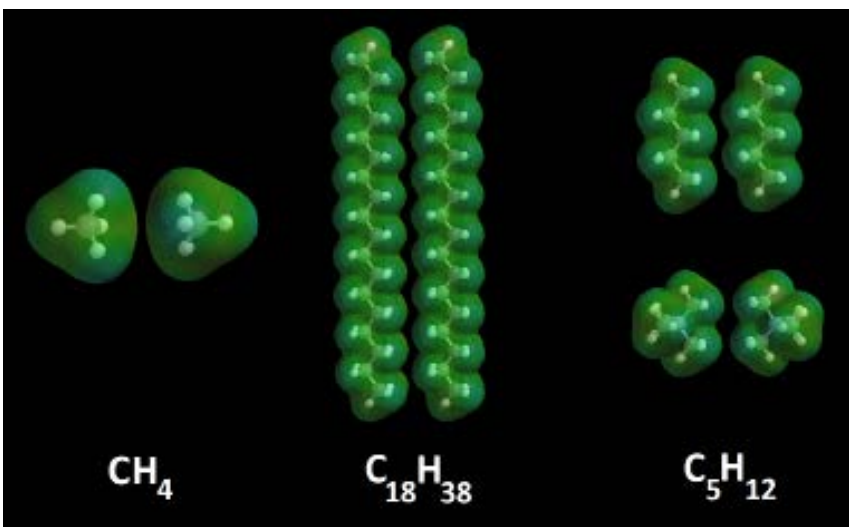
5 | Isooberflächen der Elektronen-Dichte eines Clusters von 50 Wassermolekülen. Der eingeschlossene Bruchteil der gesamten Elektronen-Dichte ist in Prozent angegeben.



6 | Isooberflächen der Elektronen-Dichte eines Nanopartikels von 40 Molekülen in festem Kohlenstoffdioxid. Der eingeschlossene Bruchteil der gesamten Elektronen-Dichte ist in Prozent angegeben.



7 | Isooberflächen der Elektronendichte für die Teilchen in Chlor, Chlorwasserstoff und Natriumchlorid.



8 | Polaritätskarten (= Isooberflächen der Elektronendichte mit Farbcodierung für die effektive Ladung) für die Dimere von Methan, Oktadekan, Pentan und Dimethylpropan („Neopentan“).

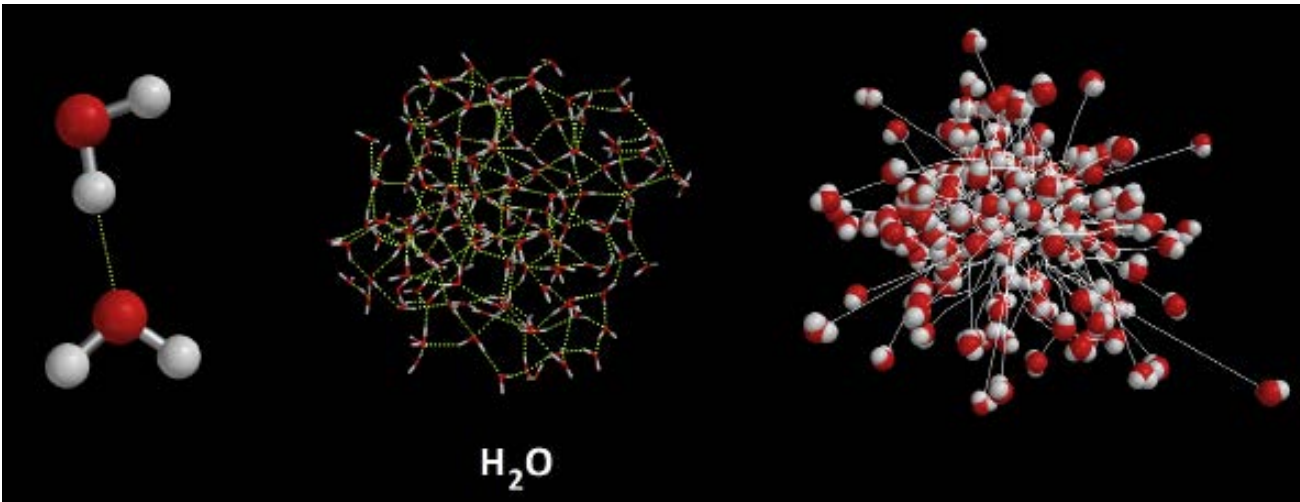
Es ist eine Tatsache, dass beide das Resultat der gleichen fundamentalen Wechselwirkungen sind – nämlich der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen (Coulomb's Gesetz) und des eigenartigen Verhaltens von so extrem leichten Teilchen, wie es die Elektronen sind (Quantenmechanik). *Ist es möglich, Modelle zu zeigen, die die Einheitlichkeit chemischer Bindungskräfte veranschaulichen?*

Abbildung 5 und Abbildung 6 zeigen Isooberflächen für verschiedene Werte der Elektronendichte, diesmal jedoch nicht für ein Molekül, sondern für die 50 Moleküle eines Clusters von Wassermolekülen (Abb. 5) und die 40 Moleküle eines Nanopartikels von festem Trockeneis (Kohlenstoffdioxid, Abb. 6). Man kann sehen, dass die Moleküle voneinander eindeutig getrennt sind, wenn 70 % der totalen Elektronendichte von den individuellen Oberflächen eingeschlossen ist. Wenn der Prozentsatz der eingeschlossenen Elektronendichte auf 90 % ansteigt (für Wassermoleküle) oder 99 % (für Kohlenstoffdioxidmoleküle), bricht – was die Elektronendichte betrifft – die klare Trennung zwischen den Molekülen zusammen. Natürlich sind die intramolekularen Atom-Atom-Abstände unverändert deutlich kleiner als die intermolekularen Abstände (das extrem nützliche Konzept von „Molekülen“ wird von dieser Beobachtung also nicht berührt).

### Von der kovalenten zur ionischen Bindung

In kovalenten Bindungen werden Elektronenpaare gemeinsam genutzt, während in ionischen Bindungen Kationen und Anionen sich, aufgrund der unterschiedlichen Verteilung der Elektronen, gegenseitig anziehen. *Sind diese beiden Arten von chemischen Bindungen wirklich so verschieden?* Abbildung 7 zeigt Isooberflächen der Elektronendichte für das Chloromolekül, für das Hydrogenchloridmolekül und für einen Ausschnitt aus dem Natriumchloridgitter, jedoch sind in diesem Fall die Oberflächen mit dem Wert des sogenannten elektrosta-





9 | Modelle eines Wasser-Molekül-Dimers (links) und eines Clusters (Mitte) von Wasser-Molekülen, Wasserstoffbrücken sind gelb-gestrichelt wiedergegeben; der Cluster „verdampft“, wenn die Temperatur deutlich erhöht wird (rechts, die Linien zeigen die Spuren der sich voneinander entfernenden Teilchen).

tischen Potentials eingefärbt. Dieses beschreibt, wie sich ein Teilchen in Bezug auf die Wechselwirkung mit anderen elektrischen Ladungen verhält. Eine blaue Farbe bedeutet, dass das Teilchen sich an dem jeweiligen Punkt so verhält, als wenn es dort effektiv positiv geladen wäre. Eine rote Farbe beschreibt das gegenteilige Verhalten, also wenn es dort effektiv negativ geladen wäre. Grün ist die neutrale Farbe, es lägen keine elektrostatischen Wechselwirkungen vor. Da die Polarität eines Moleküls mit der Verteilung der Ladung zu tun hat, kann diese Art von Farbcodierung auch als „Polaritätskarte“ bezeichnet werden. Dies ermöglicht es, die Polarität zu veranschaulichen, ohne die Situation auf atomare Teilladungen reduzieren zu müssen.

Die Abbildung deutet an, dass der Fall der polaren kovalenten Bindung (HCl-Moleküle, teilweiser Ladungstransfer) nur eine natürliche Zwischenstufe zwischen den Extremfällen einer reinen kovalenten Bindung (Cl<sub>2</sub>-Moleküle, kein Ladungstransfer) und einer ionischen Bindung wie in Kochsalz-Ionengitter (weitgehender Ladungstransfer) darstellt. Ionische und kovalente Bindungen sind also nur die Extreme eines Kontinuums von Möglichkeiten – die beiden Arten von Erklärungen sind nicht so unzusammenhängend, wie es auf den ersten Blick erscheint.

Für Natriumchlorid sind in **Abbildung 7** zwei Modelle gezeigt (mit etwas verschiedenen Längen- und Farbskalen), da das entsprechende „Molekül“ nur bei sehr hohen Temperaturen in der Gasphase vorliegt. Unter normalen Bedingungen liegen praktisch alle ionischen Verbindungen in Form eines Ionengitters als Festkörper vor.

### London-Dispersionskräfte bei Alkan-Molekülen

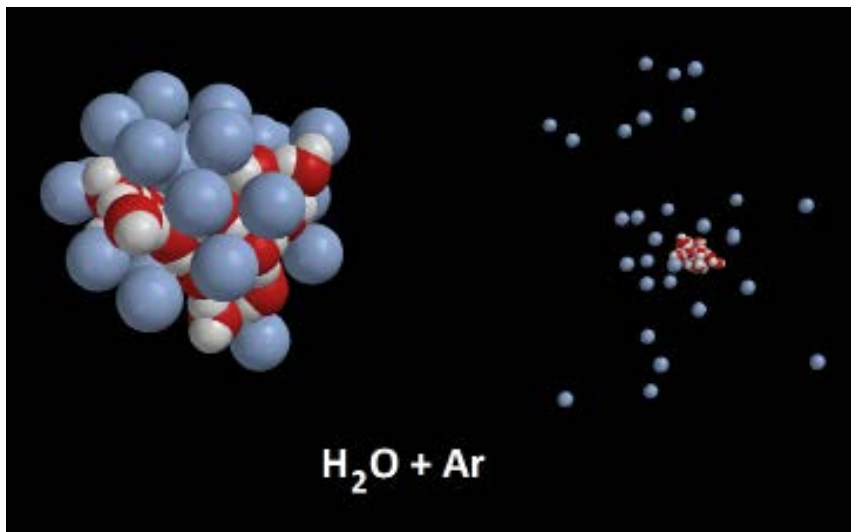
*Kann man veranschaulichen, dass Kohlenwasserstoffe (und auch andere unpolare Verbindungen) in Abhängigkeit von der Größe und der Gestalt der Moleküle in verschiedenen Aggregatzuständen auftreten? **Abbildung 8** zeigt die Isooberflächen der Elektronendichte mit Farbcodierung für die effektive Ladung für die Dimere von Methan, Oktadekan, Pentan und Dimethylpropan („Neopentan“). Da es sich um strikt unpolare Moleküle handelt, sind die Oberflächen aller Moleküle grün. London-Dispersionskräfte haben mit gegenseitiger momentaner Polarisierung zu tun und sind umso stärker, je größer die Kontaktfläche zwischen den wechselwirkenden Molekülen ist. Die Modelle bestätigen, dass dieser Kontakt für Oktadekan (unter Normalbedingungen ein Festkörper) erheblich größer ist als für Methan (unter Normalbedingungen*

ein Gas) [8]. Bei den Isomeren des Pentans sind ebenfalls Unterschiede sichtbar. Während Pentan unter Normalbedingungen eine Flüssigkeit ist, ist Dimethylpropan ein Gas (Siedetemperatur von 10 °C) – ein Unterschied, der mit den verschiedenen Kontaktflächen der beiden Dimere im Einklang steht.

### Klassische dynamische Modelle

Wasserstoffbrücken sind nicht nur in der Chemie, sondern auch in der Biologie von enormer Bedeutung. **Abbildung 9** zeigt Modelle eines Dimers und eines Clusters von Wasser-Molekülen. Die Veranschaulichung der Wasserstoffbrücken ist besonders für das Clustermodell sehr eindrucksvoll, weil während der dynamischen Simulation verfolgt werden kann, wie das Netzwerk einer konstanten Fluktuation unterliegt. Wenn die Temperatur des Clusters stark erhöht wird (auf mehrere 100 oder sogar 1000 °C, um den Verdampfungsprozess zu beschleunigen), kann wiederum verfolgt werden, wie mit genügend kinetischer Energie intermolekulare Wechselwirkungen überwunden werden können, die Teilchen entfernen sich voneinander.

**Abbildung 10** zeigt das Modell eines Clusters, der eine „erzwungene“ Mischung von Wasser-Molekülen



10 | Clustermodell einer erzwungenen Mischung von Wassermolekülen und Argonatomen (links).

und Argon-Atomen darstellt. Eine dynamische Simulation bei Raumtemperatur führt zu einer Trennung der Komponenten und macht damit klar, dass sich die Stärke von Wasserstoffbrücken von der Stärke von London-Dispersionskräften drastisch unterscheidet.

## Zusammenfassung

Erfahrene Chemielehrkräfte setzen seit jeher verschiedene Modelle ein, um Sachverhalte auch auf der Ebene der Teilchen zu veranschaulichen. Beispielhaft genannt seien Realmodelle mit Zellstoffkugeln und Funktionsmodelle mit Magneten [9]. Komplementär zu solchen traditionellen Techniken erlaubt die moderne Computergrafik nun auch die Veranschaulichung von Molekül- und Gitterstrukturen, die nicht nur willkürlichen Zeichnungen entsprechen, sondern auf wissenschaftlich fundierte Modelle zurückgehen. Dies schließt häufig sogar die Elektronenwolken ein, die ja für das Verhalten chemischer Systeme so zentral sind. Mit Programmen wie Odyssey lassen sich Simulationen durchführen, bei denen sich das Verhalten von Strukturen bei gegebenen Bedingungen (Druck, Temperatur, Lösungsmittel usw.) untersuchen lassen. Durch das Anzeigen und häufig auch durch

das Variieren von Parametern auf Stoff- und Teilchenebene (z. B. Temperatur oder Teilchenzahl) und durch die Ausgabe von Diagrammen (z. B. Darstellung der Bindungslänge als Funktion der relativen Energie) können sich die Lernenden spielerisch an die chemischen Inhalte herantasten und die „Teilchenwelt“ aktiv untersuchen [10]. Während andere interaktive Lehrprogramme sich einer mehr cartoonartigen Visualisierung bedienen [11], stellt Odyssey – im übertragenen Sinn – eine Art „gigantisches Mikroskop“ dar, welches erlaubt, am Computerbildschirm nachzuvollziehen, was auf der molekularen Ebene passiert, wenn wissenschaftlich gründlich fundierte Modelle benutzt werden. Die Software repräsentiert die fundamentalen physikalischen Prinzipien (Coulomb's Gesetz für elektrostatische Wechselwirkungen, elementare Energiefunktionen für sterische Wechselwirkungen, Newton's Gleichungen für die klassische Dynamik und die Schrödinger-Gleichung für die Quantenmechanik) und der Computer löst dann das sich ergebende numerische Problem. Die Modellierungen in Bezug auf den Chemieunterricht sind also nicht der Input des Programms, sondern das Resultat – ein zentraler Unterschied von den *ad hoc* Animationen chemischer Prozesse, die in vielen Quellen verfügbar sind.

## Literatur

- [1] Pauling, L.: The Nature of the Chemical Bond. Cornell University Press, Ithaca, NY 1939. Ins Deutsche übersetzt von Noller, H.: Die Natur der Chemischen Bindung. Verlag Chemie, Weinheim 1962
- [2] Bacskey, G. B., Reimers, J. R. und Nordholm, S.: The Mechanism of Covalent Bonding. In: J. Chem. Educ. 74 (1997) Nr. 12, S. 1494–1502
- [3] Talanquer, V. und Pollard, J.: Let's teach how we think instead of what we know. In: Chem. Educ. Res. Pract. 11 (2010) S. 43–52
- [4] Tan, K.-C.D.; Treagust, D.F.: Evaluating students' understanding of chemical bonding. In: School Science Review 81 (1999) Nr. 294, S. 75–83
- [5] Shusterman, G.P.; Shusterman, A.J.: Teaching Chemistry with Electron Density Models. In: J. Chem. Educ. 74 (1997) S. 771–776. Shusterman, A.J. und Hoistad, L.M.: Teaching Chemistry with Density Models. 2. Can Atomic Charges Adequately Explain Electrostatic Potential Maps? In: Chem. Educator 6 (2001) S. 36–40
- [6] Schnitker, J.: Molecular-Level Simulations as a Chemistry Teaching Tool. In: Ellison, M.D. und Schoolcraft, T.A. (Hrsg.), Advances in Teaching Physical Chemistry. American Chemical Society, Washington, D. C. 2008, S. 207–219
- [7] Schnitker, J.: Das Unsichtbare sichtbar machen. In: MNU Journal 69 (2016) Nr. 6, S. 392–399
- [8] Sieve, B.; Graulich, N.; Caspari, I.; Bittorf, R.: Chemische Vorgänge als Prozesse erfassen. In: UC 28 (2017) Nr. 160, S. 2–7
- [9] Herdt, C.: Modelle. In: Chemie? – Aber sicher! Experimente kennen und können. Lehrerbildung Dillingen, Akademiebericht Nr. 475, 4. Auflage 2014, Kap. 4
- [10] Geelan, D.; Mukherjee, M.; Mahaffy, P.: Scientific Visualizations for Developing Students' Understanding of Concepts in Chemistry: Some Findings and Some Lessons Learned. In: Teaching Science 60 (2004) S. 30–38
- [11] PhET – Physics Education Technology. University of Colorado, Boulder, CO. Abrufbar unter: <https://phet.colorado.edu>