



Wiederholung der letzten Vorlesungsstunde:

Chemische Bindungen, starke, schwache Bindungen,
Elektronenpaarbindung, bindende und freie Elektronenpaare, Oktettregel,
Edelgaskonfiguration, Lewis-Formeln, Elektronegativität, Dipolmoment,
Einfach-, Doppel-, Dreifachbindungen

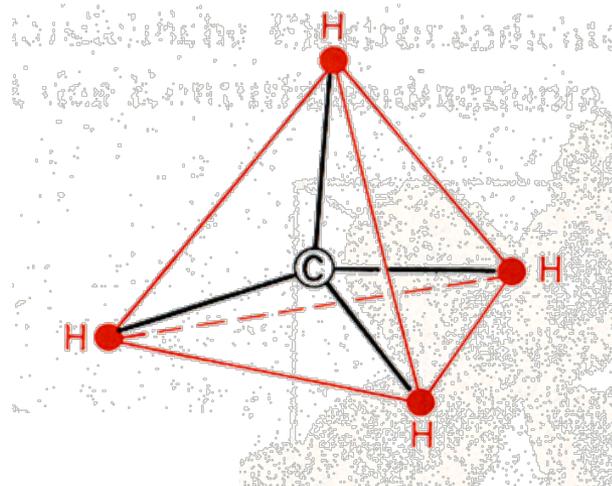
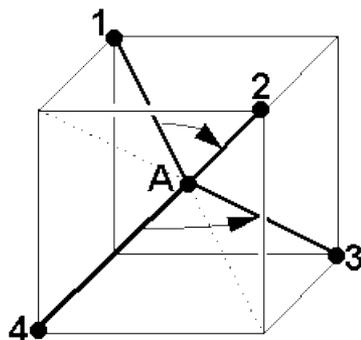
Thema heute: Chemische Bindungen, Teil 3



Hybridisierung

Die Annahme einer energetischen und räumlichen Angleichung unterschiedlicher Atomorbitale in einem Molekül mit gleichen chemischen Bindungen ist unbedingt notwendig zur Erklärung der tatsächlichen Bindungsverhältnisse

CH₄ Methan; gleiche Winkel und gleiche Bindungslängen
Winkel H-C-H: 109,5°
Bindungslänge C-H: 1,09 Å

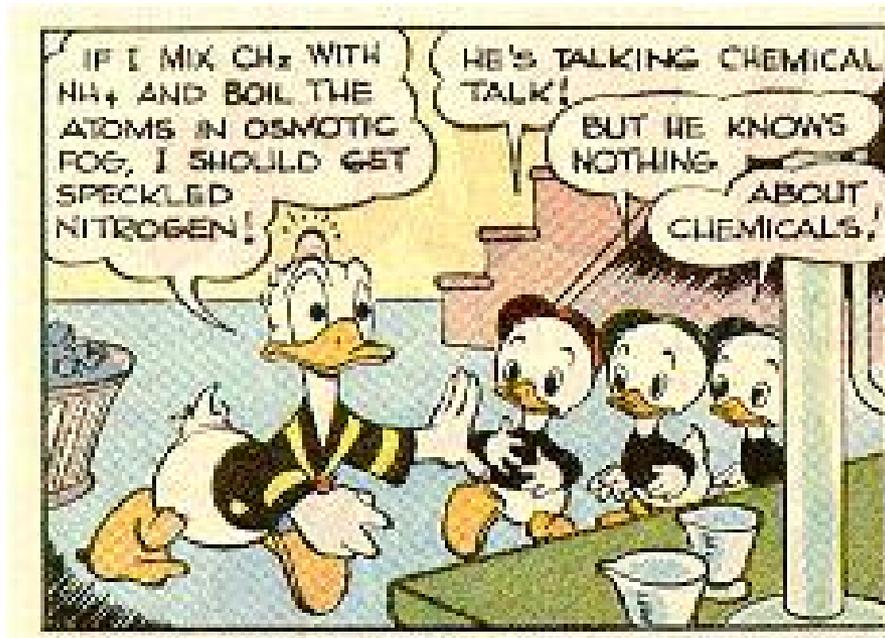




sp^3 -Hybridisierung

Kohlenstoff im Grundzustand: $2s^2 2p^2$

→ CH_2 ?, → nicht stabil !

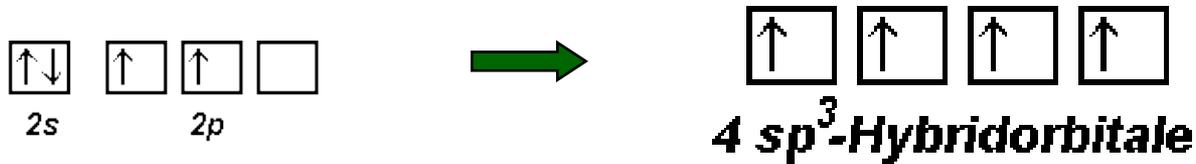




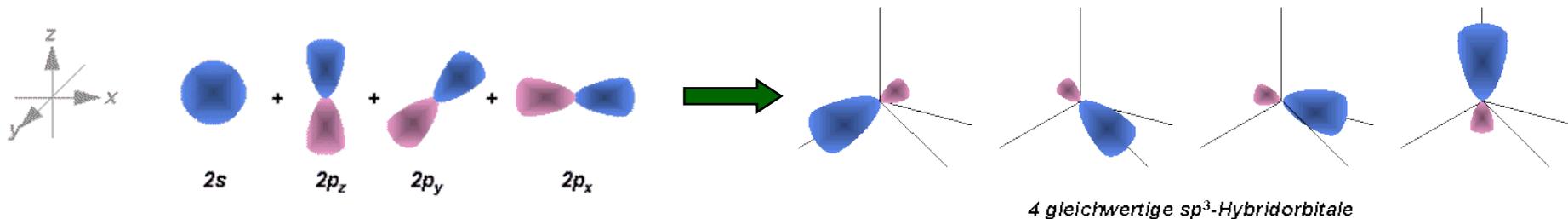
sp^3 -Hybridisierung

Kohlenstoff im Grundzustand: $2s^2 2p^2$

→ CH_2 ?, → nicht stabil !



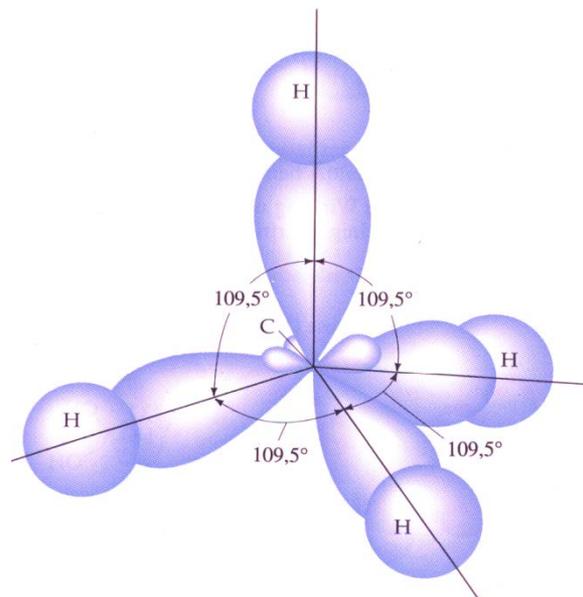
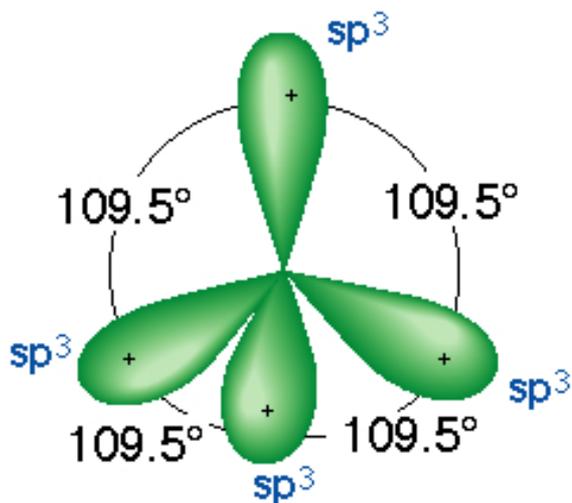
Aus einem s- und drei p-Orbitalen werden vier äquivalente sp^3 -Hybridorbitale konstruiert, die nach den Ecken eines Tetraeders gerichtet sind:



Im Methan überlappen die 4 sp^3 -Hybridorbitale mit den 1s-Orbitalen des Wasserstoffs und bilden 4 Einfachbindungen! Struktur: Tetraeder

Beispiel: CH_4 , 4-Wertigkeit des Kohlenstoffes

Kohlenstoff besitzt 2 s- und 2 p-Elektronen. Im CH_4 Molekül jedoch bilden sich vier gleichwertige Bindungen mit den H-Atomen. Die Bildung des Moleküls erfolgt über den Umweg eines angeregten Zustandes des C-Atoms (Promovierung) und der Bildung von sog. sp^3 -Hybridorbitalen (Hybridisierung) aus einem s und drei p Orbitalen. Der Endzustand ist energetisch günstiger als der Ausgangszustand. Bei der Hybridisierung bilden sich 4 gleichwertige sp^3 Hybridorbitale, die dann mit den s-Orbitalen der 4 Wasserstoffatome Bindungen ausbilden.





Hybridisierung führt zu einer neuen räumlichen Orientierung der Orbitale.
Hybridorbitale besitzen eine Vorzugsrichtung, d.h. größere Ausdehnung in Bindungsrichtung.

Der Hybridzustand ist an einem isolierten Atom nicht nachweisbar!

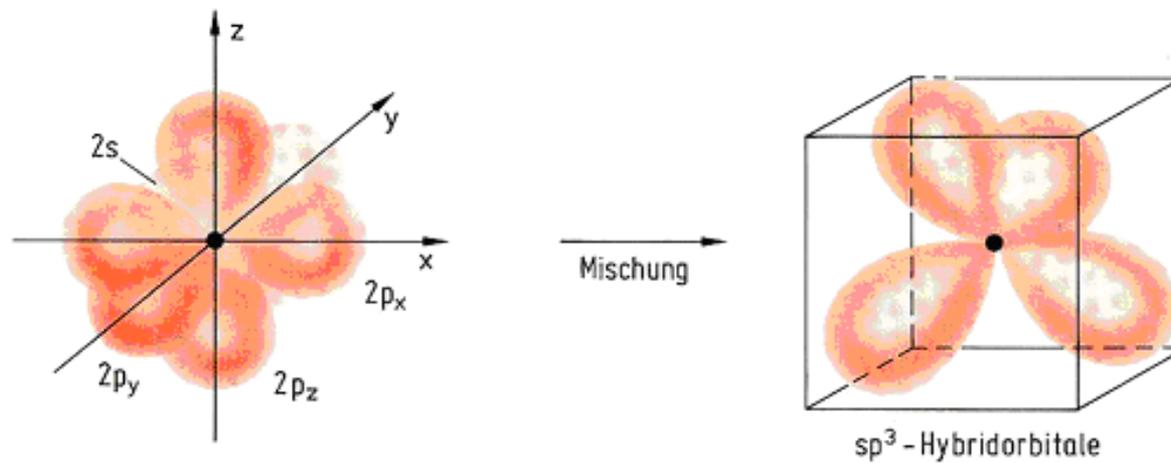
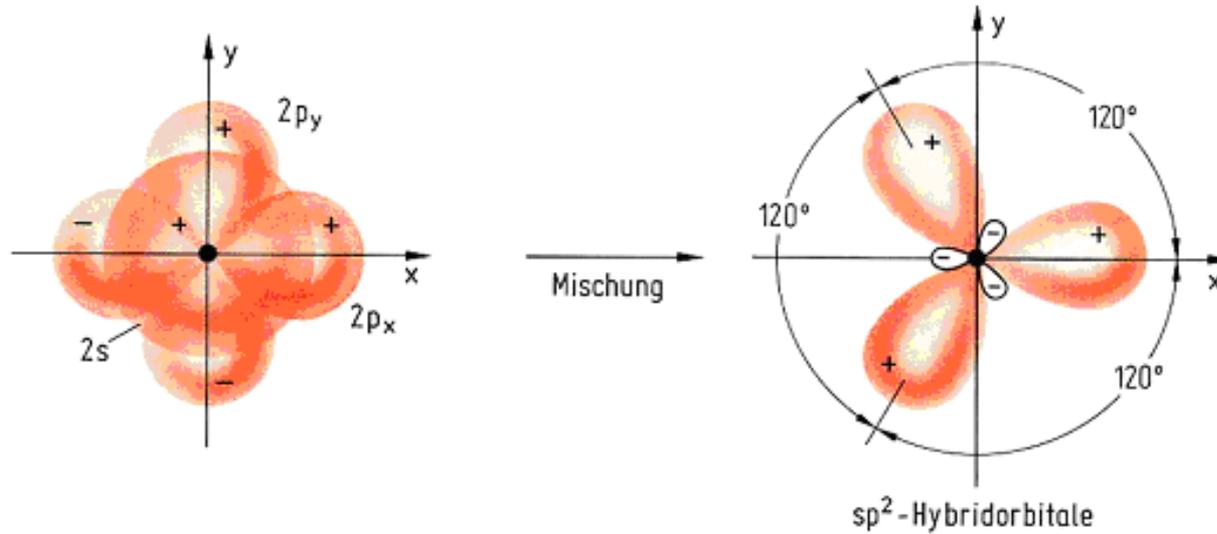
Die Anzahl der Hybridorbitale ist gleich der Anzahl der Atomorbitale, die an der Hybridisierung beteiligt sind. Es kombinieren nur solche Atomorbitale zu Hybridorbitalen, die ähnliche Energien haben

$2s - 2p$

$3s - 3p - 3d$

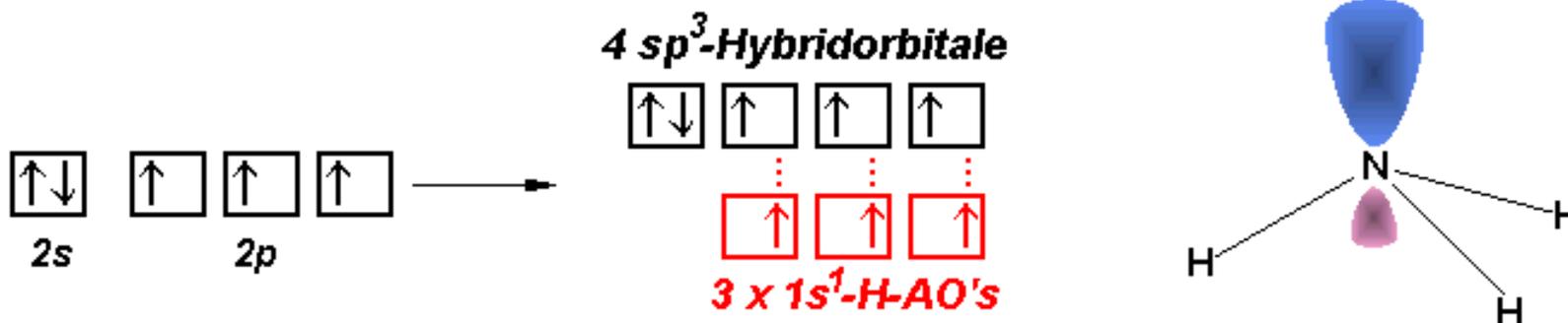
$3d - 4s - 4p$







Beispiel: Ammoniak, NH_3 , sp^3 -Hybridorbitale am N-Atom



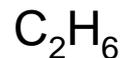
Struktur: trigonale Pyramide, wenn freies Elektronenpaar berücksichtigt wird:
Tetraeder, Winkel H-N-H: 107° .



Einfachbindung - σ -Bindung

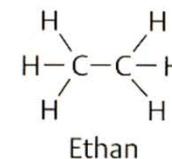
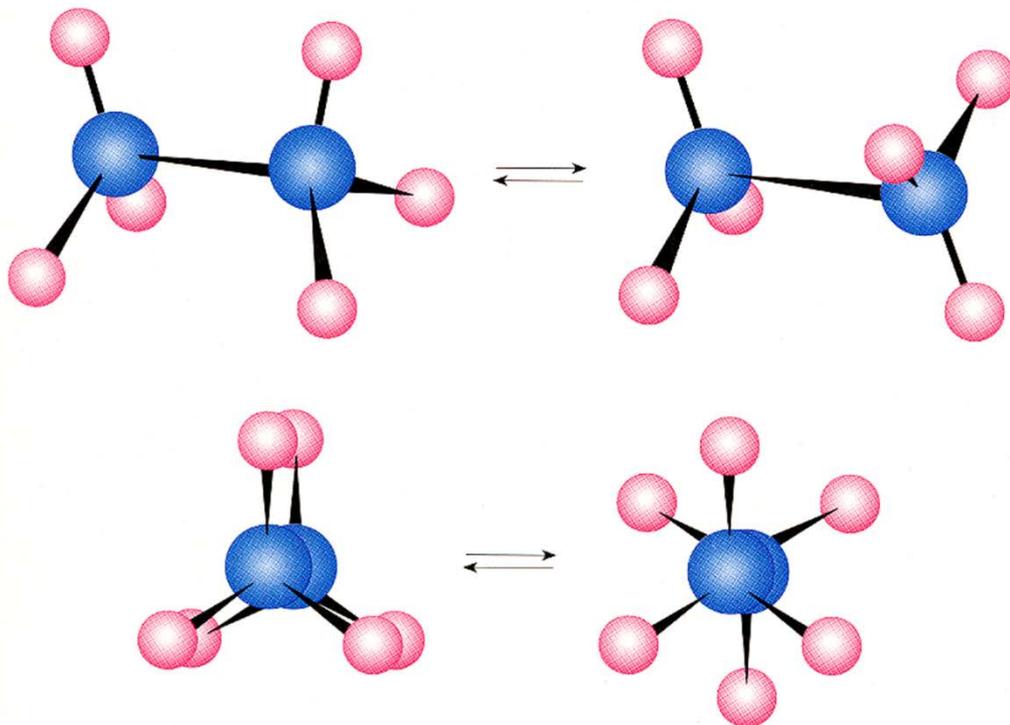
größte Elektronendichte rotationssymmetrisch zur Verbindungsachse

C-H und C-C – Bindungen im Ethan



sp^3 Hybrid

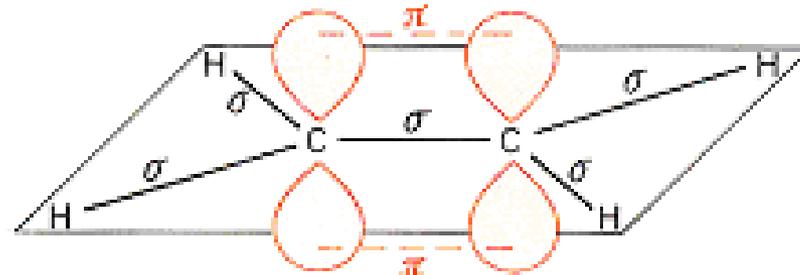
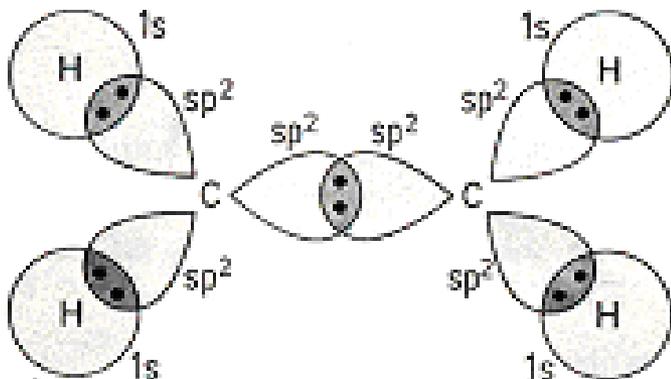
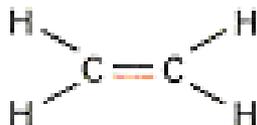
Bindungswinkel $109,5^\circ$



Drehung um die C-C-Bindung im Ethan-Molekül ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$)

Doppelbindung:

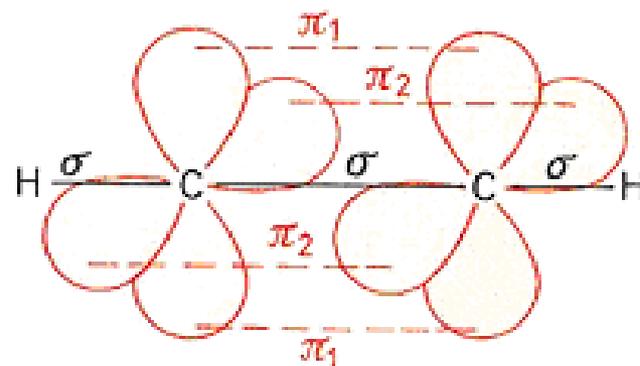
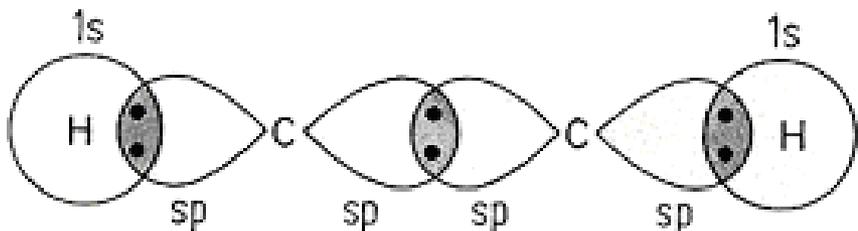
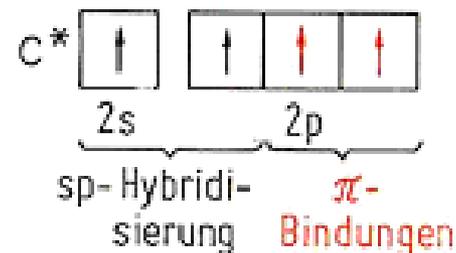
Werden nur 2 der p-Orbitale sowie das s-Orbital hybridisiert, so entstehen insgesamt drei äquivalente **sp²-Hybridorbitale**, die in die Ecken eines gleichseitigen Dreiecks gerichtet sind. Das an der Mischung nicht beteiligte 2p_z-Orbital steht dann senkrecht auf der Dreiecksfläche und kann für eine π-Bindung genutzt werden, Beispiel Ethen C₂H₄:





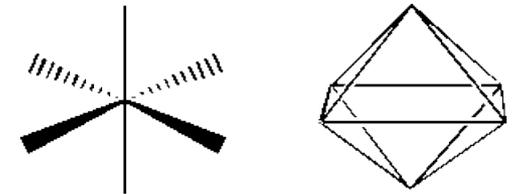
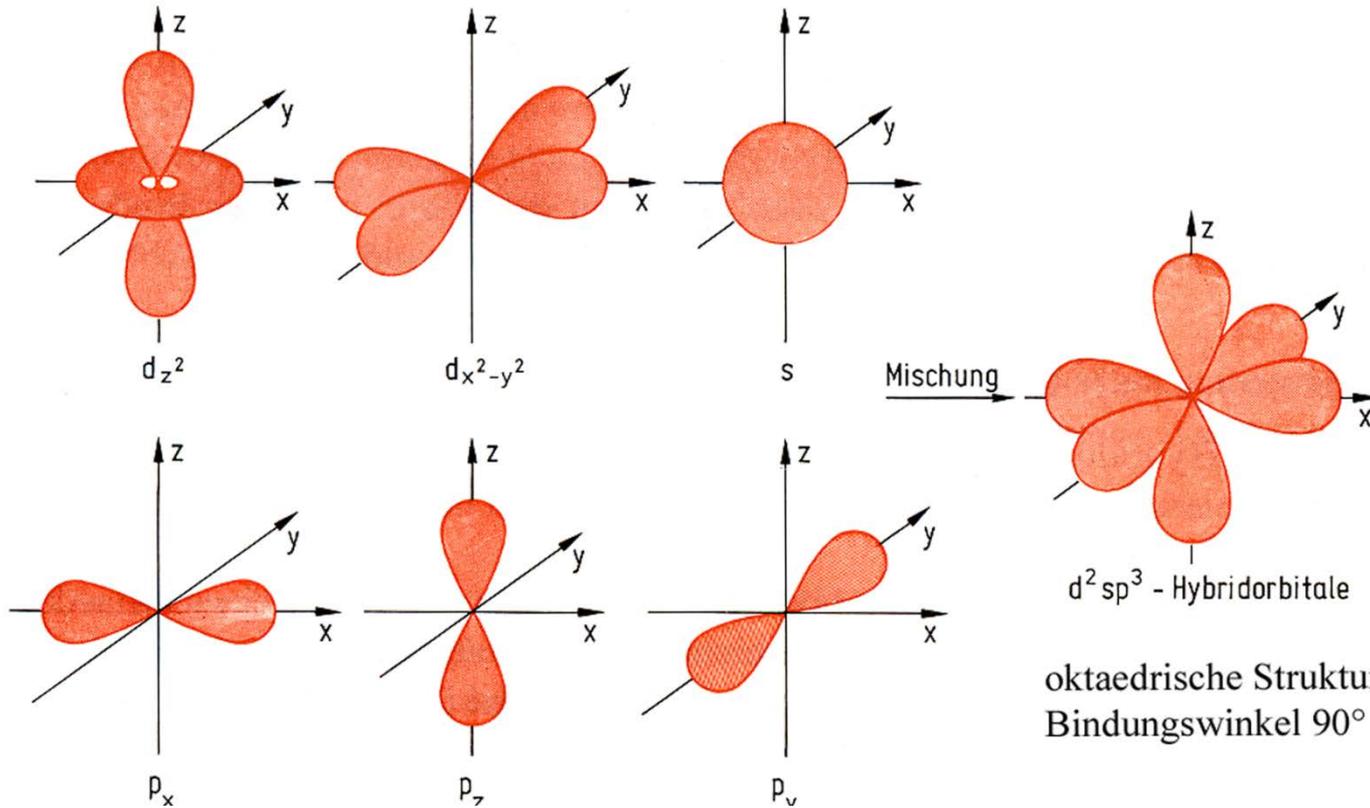
Dreifachbindung:

Entsprechend lassen sich das 2s-Orbital mit z.B. dem 2p_x-Orbital zu zwei linearen **sp-Hybridorbitalen** kombinieren. Die an der Hybridisierung nicht beteiligten 2p_y- und 2p_z-Orbitale stehen dann senkrecht zur Rotationsachse der beiden sp-Hybridorbitale, Beispiel Ethin (Acetylen) C₂H₂:



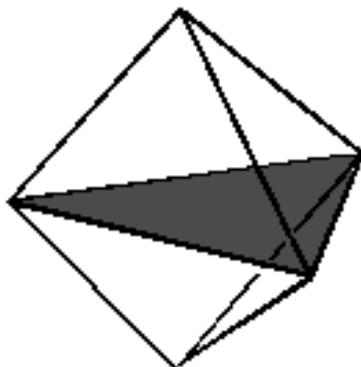
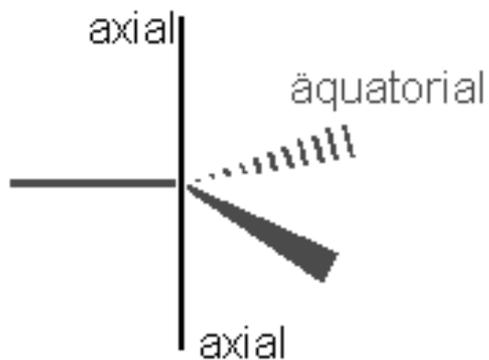


Hybridorbitale lassen sich auch unter Beteiligung von d-Orbitalen bilden: sp^3d^2 .

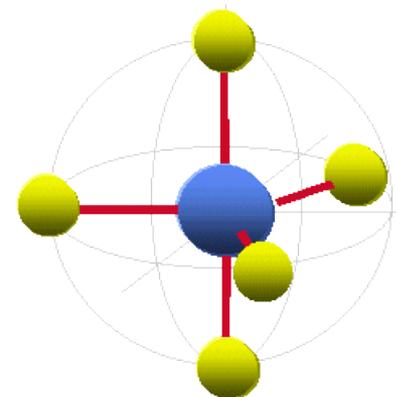




Die Hybridisierung eines d-, eines s- und dreier p-Orbitale führt zu 5 sp^3d -Hybridorbitalen:



Beispiel: PF_5 , trigonal bipyramidal.





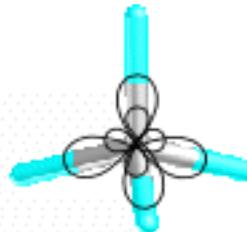
Formel	Elektronenstruktur	Molekülstruktur	Beispiele
sp	AX ₂	linear	BeCl ₂ (g)
sp ²	AX ₃	trigonal eben	BF ₃
	AX ₂ E	<u>gewinkelt</u>	SnCl ₂ (g)
sp ³	AX ₄	tetraedrisch	CH ₄ , NH ₄ ⁺
	AX ₃ E	<u>trigonal-pyramidal</u>	NH ₃
	AX ₂ E ₂	<u>gewinkelt</u>	H ₂ O
sp ³ d	AX ₅	trigonal bipyramidal	PF ₅
	AX ₄ E	<u>verzerrt</u>	SF ₄
	AX ₃ E ₂	<u>T-förmig</u>	ClF ₃
	AX ₂ E ₃	<u>linear</u>	XeF ₂ , I ₃ ⁻ , ICl ₂ ⁻
sp ³ d ²	AX ₆	oktaedrisch	SF ₆ , SiF ₆ ²⁻
	AX ₅ E	<u>quadratisch-pyramidal</u>	IF ₅
	AX ₄ E ₂	<u>quadratisch-planar</u>	XeF ₄ , ICl ₄ ⁻



sp
linear
z.B. HgCl_2



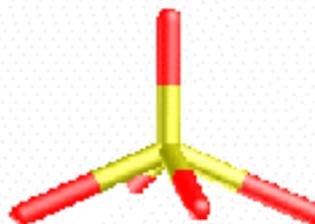
sp²
trigonal planar
z.B. BCl_3



sp³
tetraedrisch
z.B. CCl_4



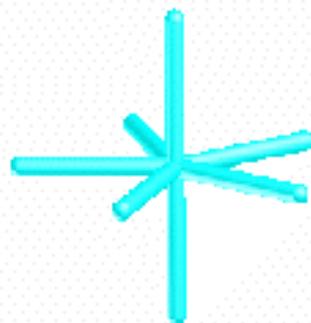
sp³d
trigonal bipyramidal
z.B. PF_5



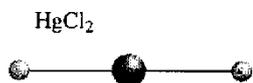
sp³d
tetragonal pyramidal
z.B. $\text{SO}(\text{OH})_4$



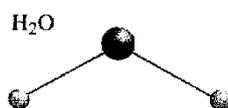
sp^3d^2
oktaedrisch
z.B. SF_6



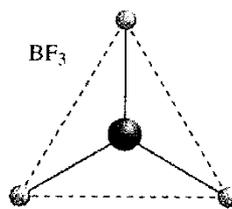
sp^3d^3
pentagonal bipyramidal
z.B. IF_7



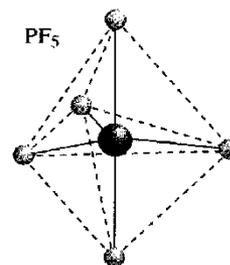
linear



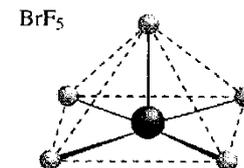
gewinkelt



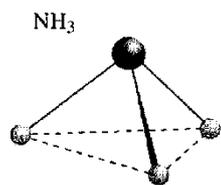
trigonal-planar



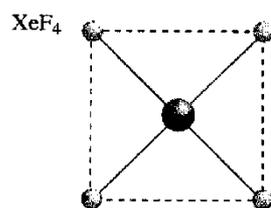
trigonal-bipyramidal



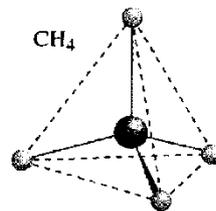
quadratisch-pyramidal



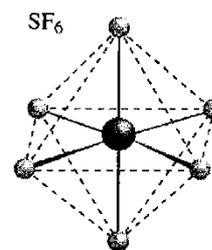
trigonal-pyramidal



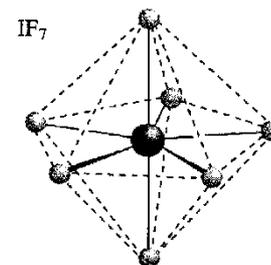
quadratisch-planar



tetraedrisch



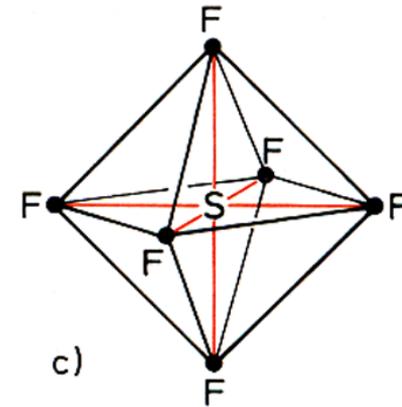
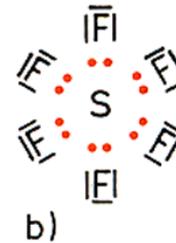
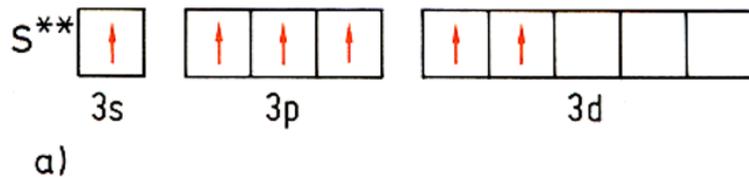
oktaedrisch



pentagonal-bipyramidal



Oktetterweiterung bei Atomen der 3. oder höheren Periode, Beispiel SF_6 :



- Valenzelektronenkonfiguration des angeregten S-Atoms.
- Lewisformel von SF_6 .
- Geometrische Anordnung der Atome im Molekül SF_6 . S bildet mit den sechs F-Atomen sechs σ -Bindungen, die oktaedrisch ausgerichtet sind. Es benutzt dazu die sechs d^2sp^3 -Hybridorbitale, die von den Valenzelektronen des angeregten S-Atoms gebildet werden.



Molekül	PF ₅	SF ₄	ClF ₃
Elektronenkonfiguration	P^* 	S^* 	Cl^*
Lewisformel			
Räumlicher Bau			

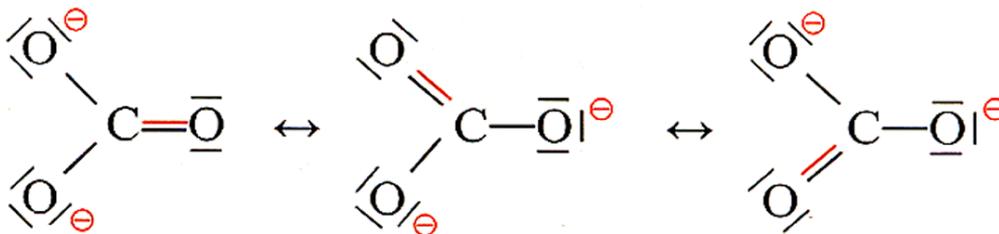


Mesomerie / Resonanz

Besteht für eine chemische Verbindung die Notwendigkeit der Formulierung verschiedener elektronischer Anordnungen hinsichtlich ihrer chemischen Bindung, dann liegt Mesomerie bzw. Resonanz vor.

Grenzformeln beschreiben nichtexistente Grenzzustände. Real ist nur ein Zustand.

Beispiel: Carbonat-Anion:



C-O-Bindungslänge im Carbonat

131 pm

reine C=O Doppelbindung

122 pm

reine C-O Einfachbindung

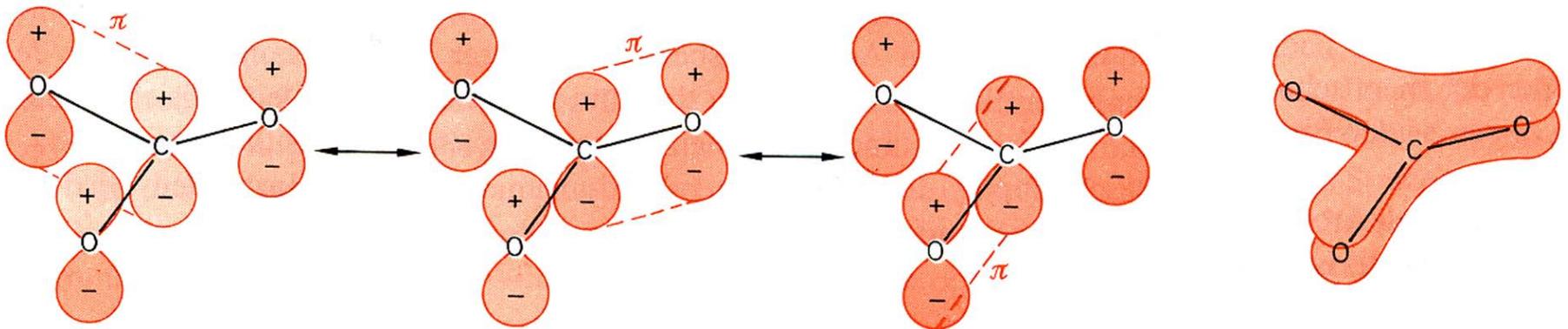
143 pm

Der Mesomeriepfeil \leftrightarrow bedeutet, dass der wahre Zustand zwischen den Grenzformeln liegt.

- Grenzformeln sind energetisch gleichwertig.
- Mesomerie verändert nur die Elektronenverteilung, aber nicht die Struktur.
- Alle Grenzstrukturen haben die gleiche Hybridisierung.



sp^2 Hybridisierung: Bindungswinkel 120° , das Carbonat-Ion



Mesomerie: äquivalente Wechselwirkung der p_z Orbitale des Kohlenstoffs und der Sauerstoffatome



σ -, π -Bindungen am Beispiel vom Distickstoff, N_2 :

