UNIVERSITÄT ROSTOCK

Vorlesung *Allgemeine Chemie* (CH01)

Für Studierende im B.Sc.-Studiengang Chemie

Prof. Dr. Martin Köckerling
Arbeitsgruppe Anorganische Festkörperchemie

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, Institut für Chemie

Wiederholung der letzten Vorlesungsstunde:

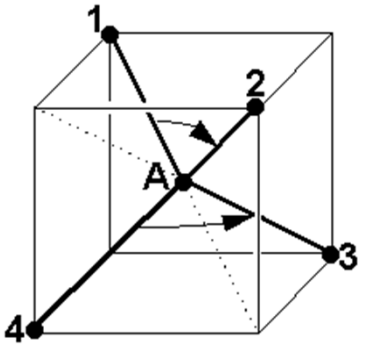
Chemische Bindungen, starke, schwache Bindungen, Elektronenpaarbindung, bindende und freie Elektronenpaare, Oktettregel, Edelgaskonfiguration, Lewis-Formeln, VSEPR-Theorie

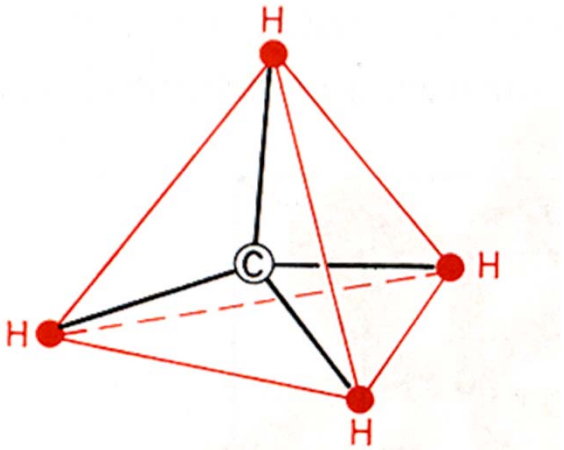
Thema heute: Chemische Bindungen, Hybridisierung

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

CH_4 Methan; gleiche Winkel und
gleiche Bindungslängen
Winkel H-C-H: 109,5°
Bindungslänge C-H: 1,09 Å

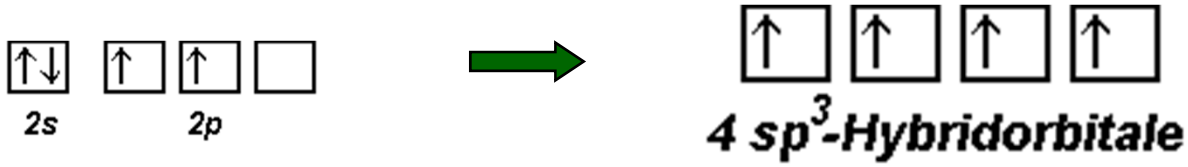




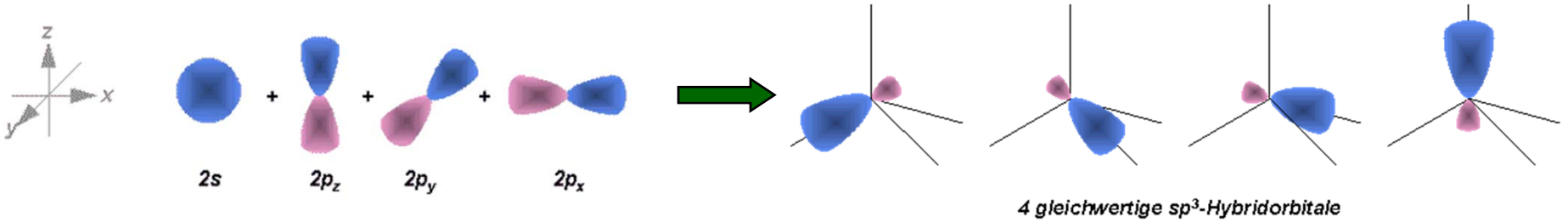
sp^3-Hybridisierung

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

➔ CH_2 ?, ➔ nicht stabil !



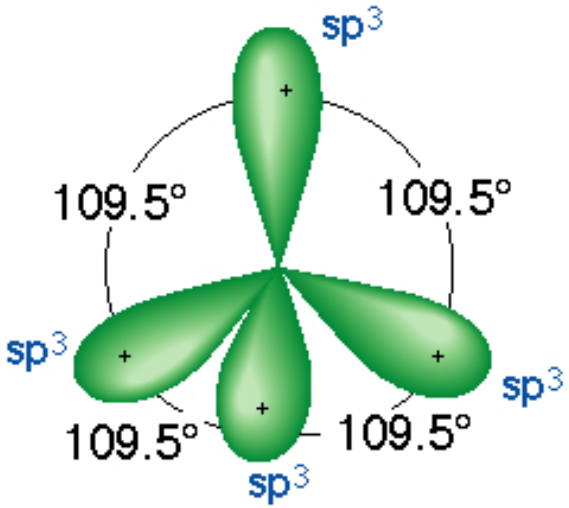
Aus einem s- und drei p-Orbitalen werden vier äquivalente sp^3-Hybridorbitale konstruiert, die nach den Ecken eines Tetraeders gerichtet sind:

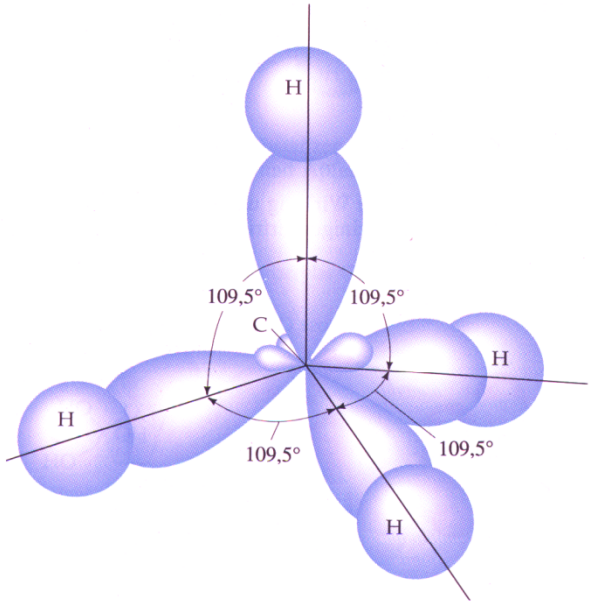


Im Methan überlappen die 4 sp^3-Hybridorbitalen mit den 1s-Orbitalen des Wasserstoffs und bilden 4 Einfachbindungen! Struktur: Tetraeder

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.

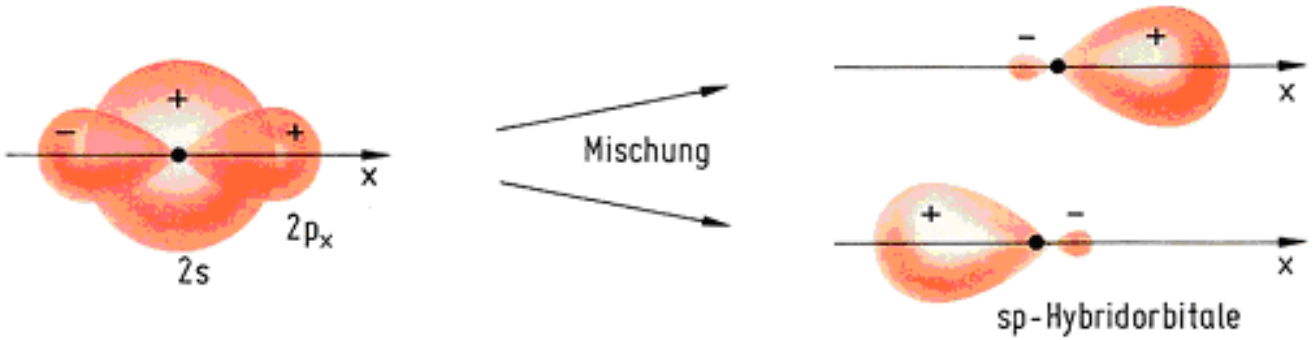


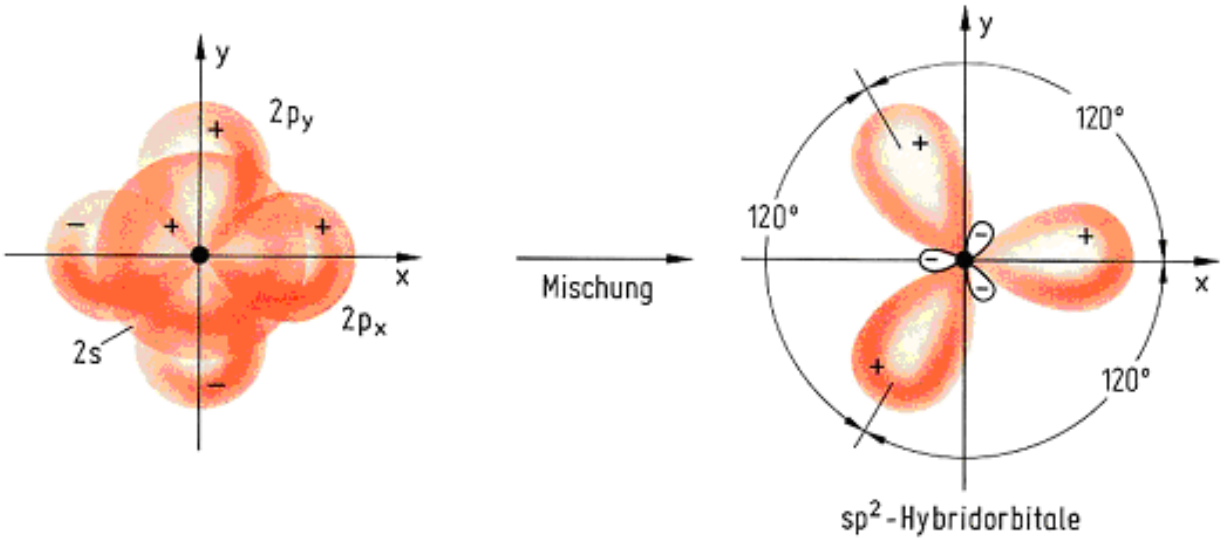


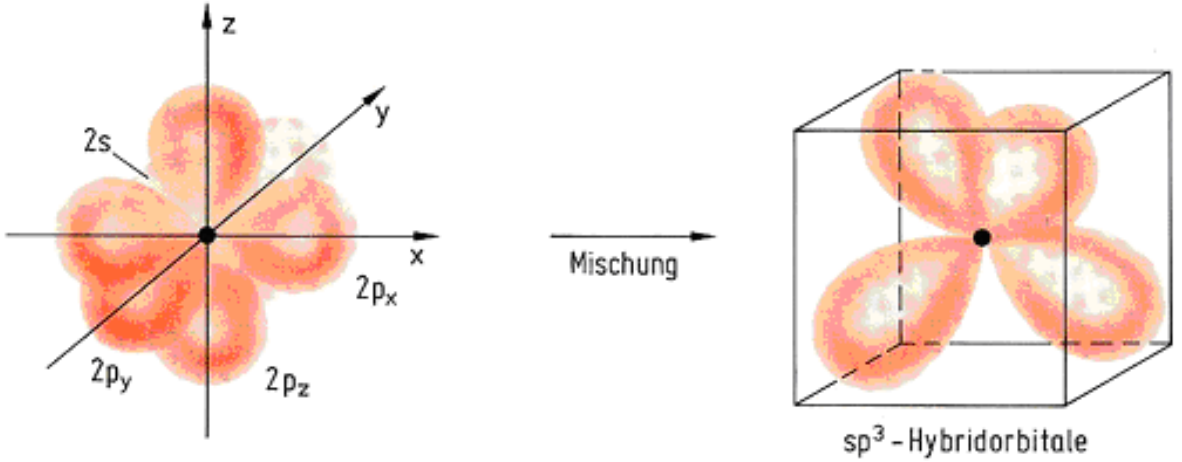
Hybridisierung führt zu einer neuen räumlichen Orientierung der Orbitale.
Hybridorbitale besitzen eine Vorzugsrichtung, d.h. größere Ausdehnung in Bindungsrichtung.
Der Hybridzustand ist an einem isolierten Atom nicht nachweisbar!

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

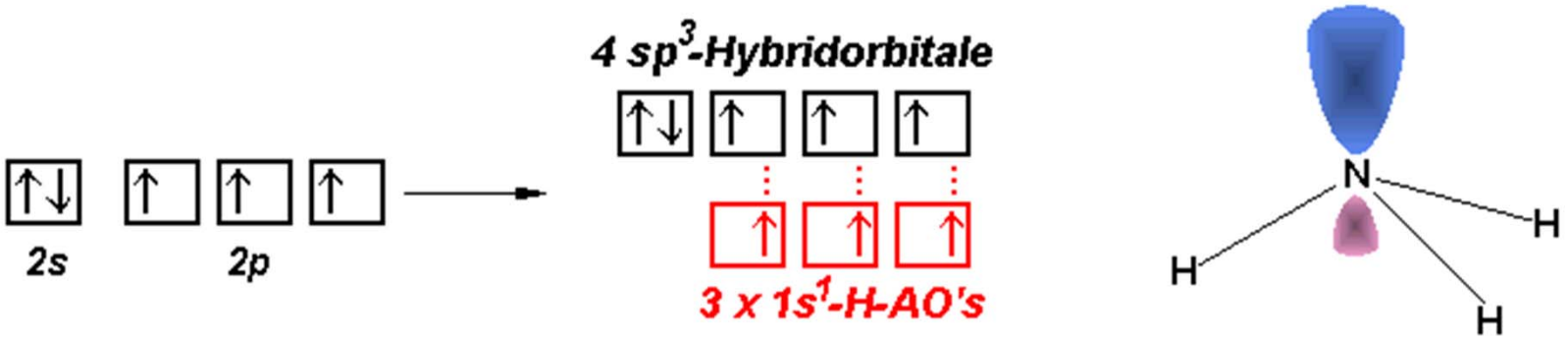
2s – 2p
3s – 3p – 3d
3d – 4s – 4p




y
2p_y
+
−
+
+
x
2p_x
2s
−
Mischung
y
120°
120°
+
−
−
−
+
+
120°
x
sp²-Hybridorbitale


z
2s
y
x
2p_x
2p_y
2p_z
Mischung
sp³-Hybridorbitale

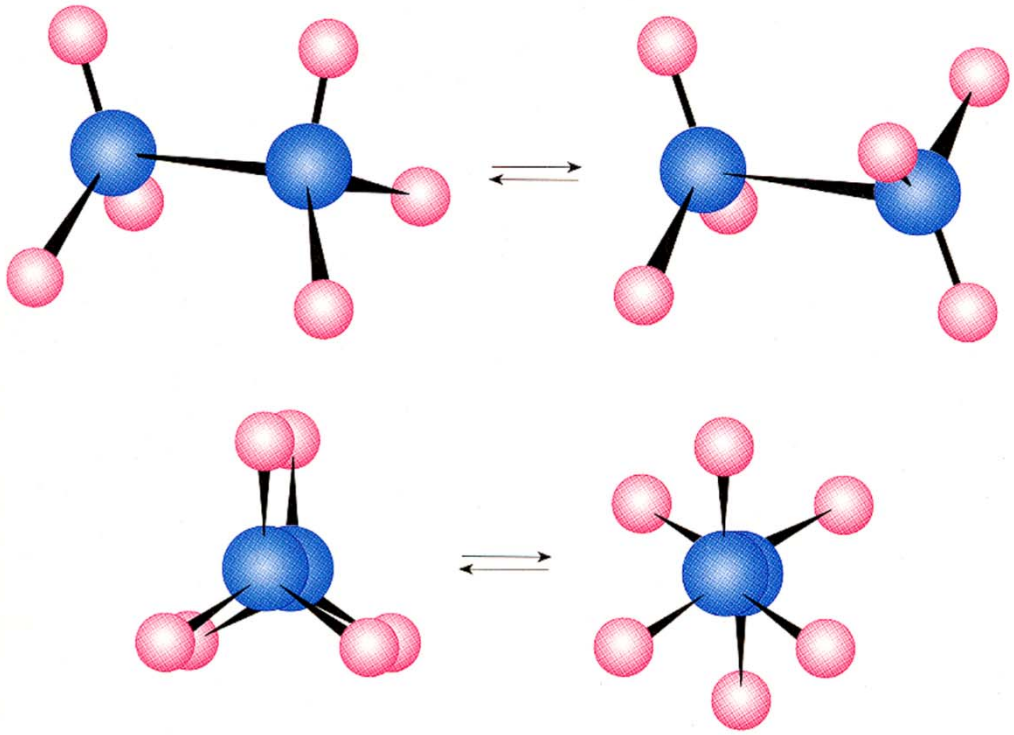
Beispiel: Ammoniak, NH_3, sp^3-Hybridorbitale am N-Atom



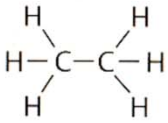
Struktur: trigonale Pyramide, wenn freies Elektronenpaar berücksichtigt wird: Tetraeder, Winkel H-N-H: 107°.

Einfachbindung - σ-Bindung

größte Elektronendichte rotationssymmetrisch zur Verbindungsachse
C-H und C–C – Bindungen im Ethan C_2H_6 sp^3 Hybrid
Bindungswinkel 109,5°



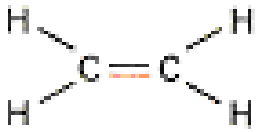
Drehung um die C—C-Bindung im Ethan-Molekül ($H_3C—CH_3$)

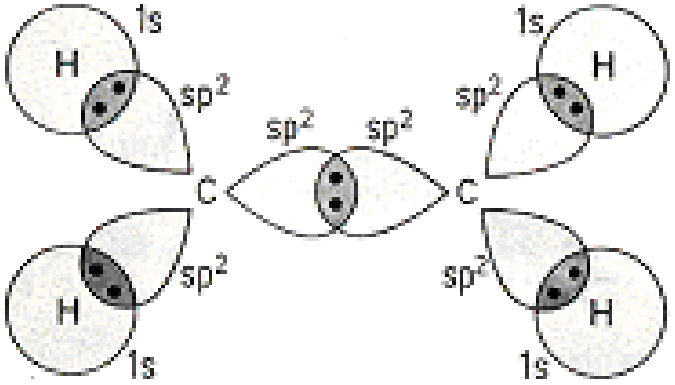


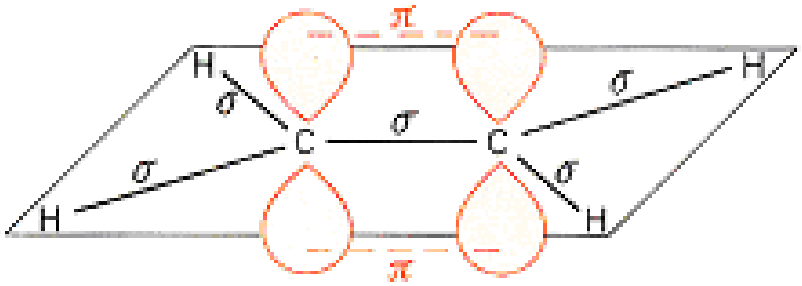
Ethan

Doppelbindung:

Werden nur 2 der p-Orbitale sowie das s-Orbital hybridisiert, so entstehen insgesamt drei äquivalente **sp^2-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 C_2H_4:

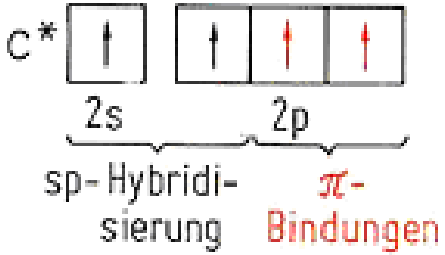


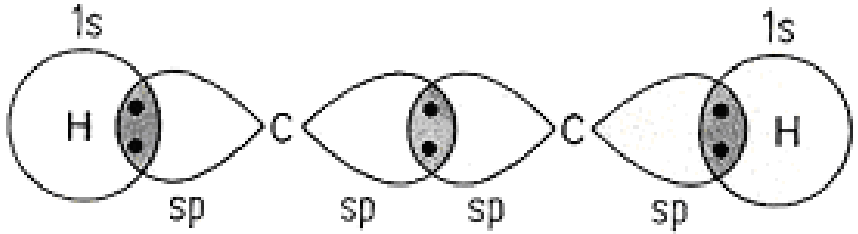


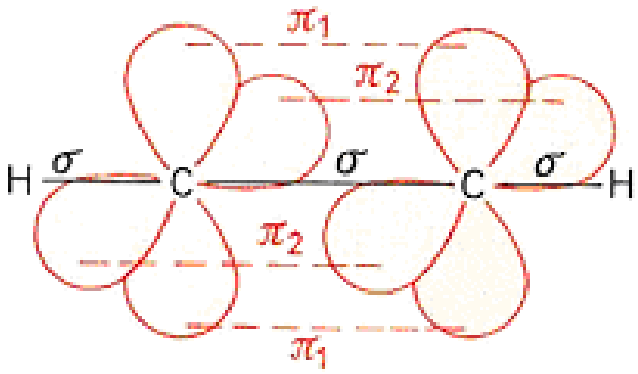


Dreifachbindung:

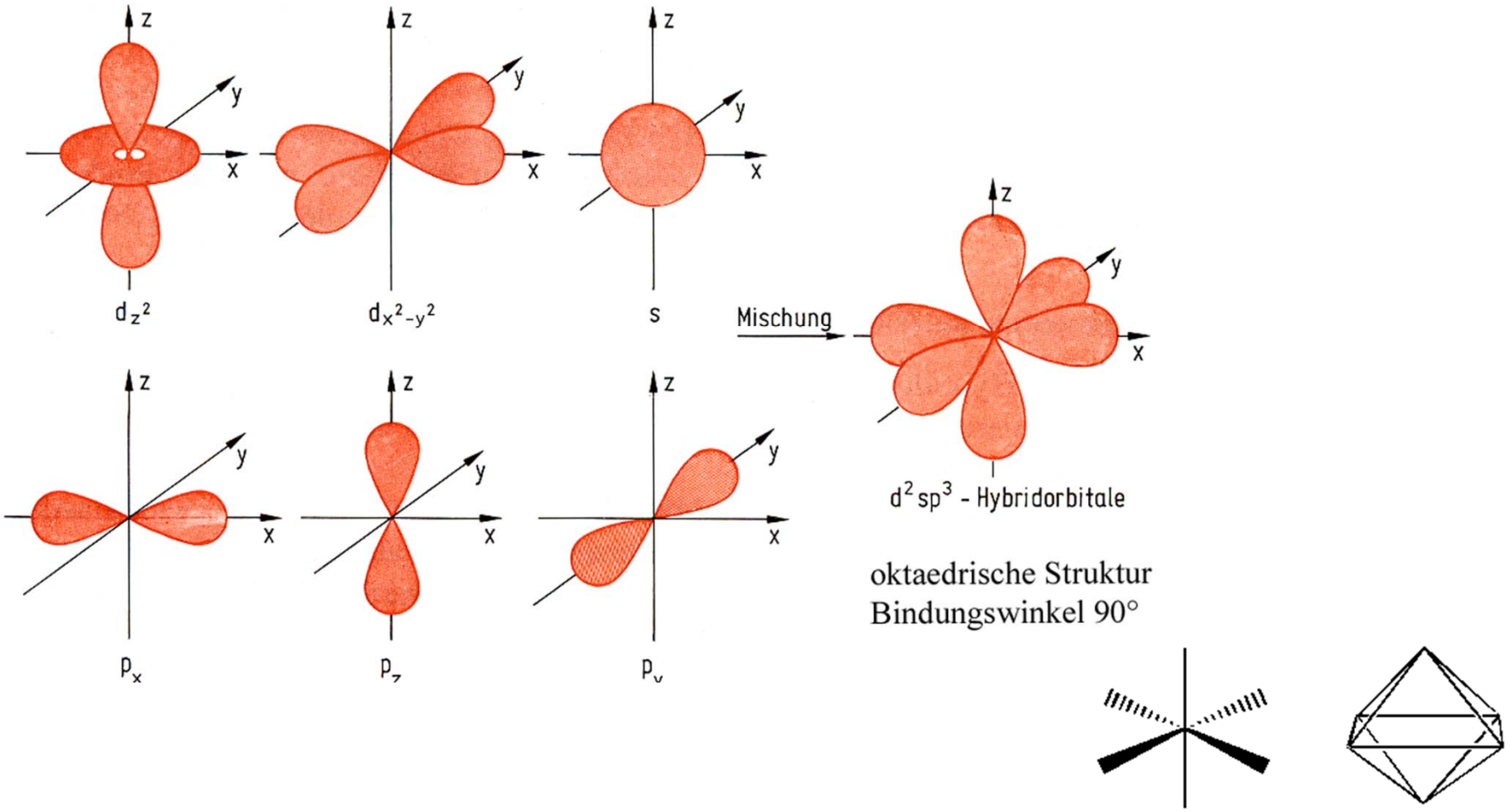
Entsprechend lassen sich das 2s-Orbital mit z.B. dem $2p_x$-Orbital zu zwei linearen **sp-Hybridorbitalen** kombinieren. Die an der Hybridisierung nicht beteiligten $2p_y$- und $2p_z$-Orbitale stehen dann senkrecht zur Rotationsachse der beiden sp-Hybridorbitale, Beispiel Ethin (Acetylen) C_2H_2:



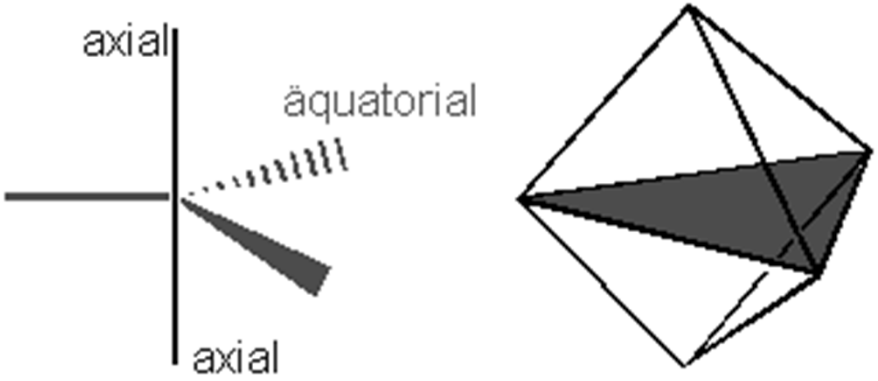




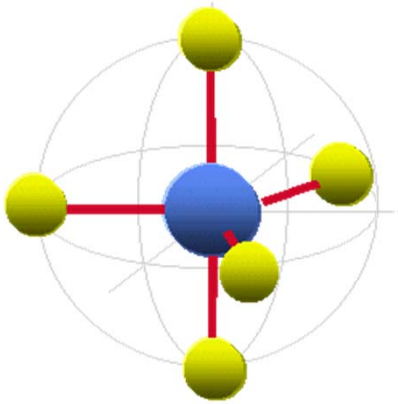
Hybridorbitale lassen sich auch unter Beteiligung von d-Orbitalen bilden: **sp^3d^2**.



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



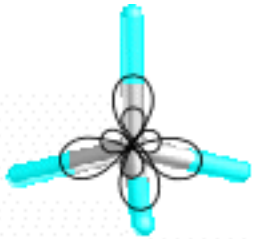
Beispiel: PF_5, trigonal bipyramidal.



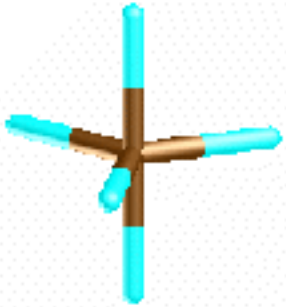
Formel	Elektronenstruktur	Molekülstruktur	Beispiele
sp	AX_2	linear	$BeCl_2$ (g)
sp^2	AX_3	trigonal eben	BF_3
	AX_2E	gewinkelt	$SnCl_2$ (g)
sp^3	AX_4	tetraedrisch	CH_4 , NH_4^+
	AX_3E	trigonal-pyramidal	NH_3
	AX_2E_2	gewinkelt	H_2O
sp^3d	AX_5	trigonal bipyramidal	PF_5
	AX_4E	verzerrt	SF_4
	AX_3E_2	T-förmig	ClF_3
	AX_2E_3	linear	XeF_2 , I_3^- , ICl_2^-
sp^3d^2	AX_6	oktaedrisch	SF_6 , SiF_6^{2-}
	AX_5E	quadratisch-pyramidal	IF_5
	AX_4E_2	quadratisch-planar	XeF_4 , ICl_4^-

sp
linear
z.B. $HgCl_2$

sp^2
trigonal planar
z.B. BCl_3



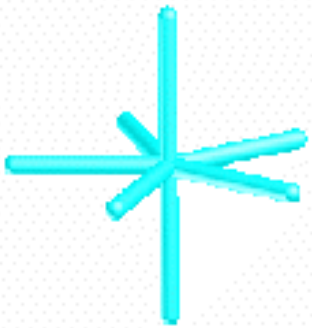
sp^3
tetraedrisch
z.B. CCl_4



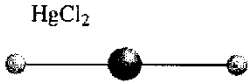
sp^3d
trigonal bipyramidal
z.B. PF_5

sp^3d
tetragonal pyramidal
z.B. $SO(OH)_4$

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

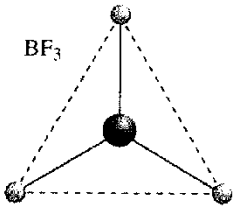


sp^3d^3
pentagonal bipyramidal
z.B. IF_7

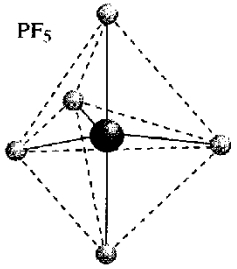


linear

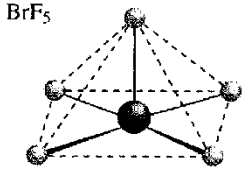
gewinkelt



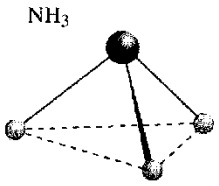
trigonal-planar



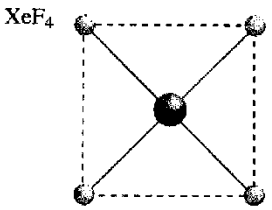
trigonal-bipyramidal



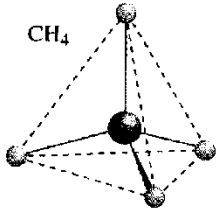
quadratisch-pyramidal



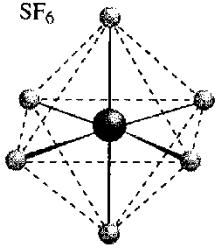
trigonal-pyramidal



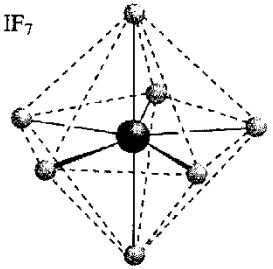
quadratisch-planar



tetraedrisch



oktaedrisch



pentagonal-bipyramidal