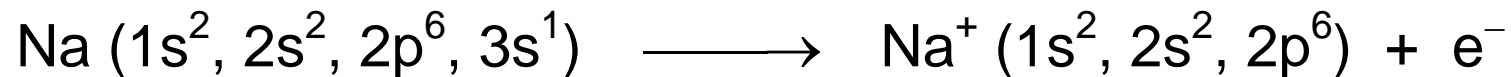


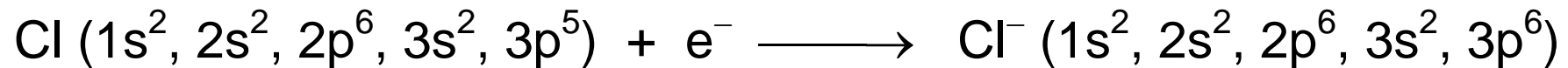
## Bindungstheorie

**Elektronenoktett durch Übertragung von Elektronen:  
Ionenbindung (MM Kap.7)**

NaCl: (Elektronegativität: Na 0.9 Cl 3.1)

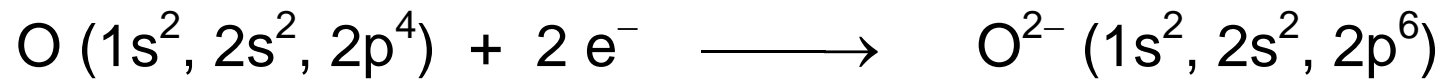
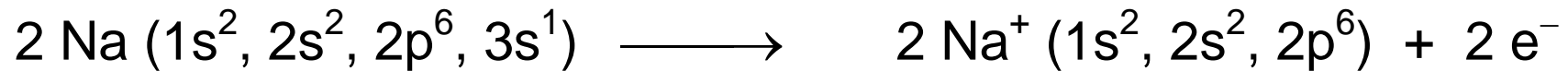


Neon-Konfiguration

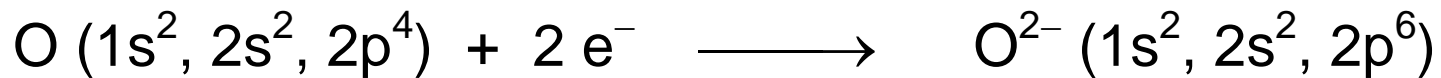
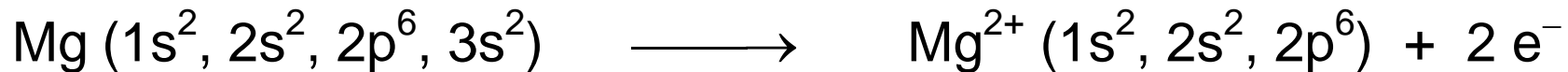


Argon-Konfiguration

Na<sub>2</sub>O (EN: Na 0.9 O 3.5)

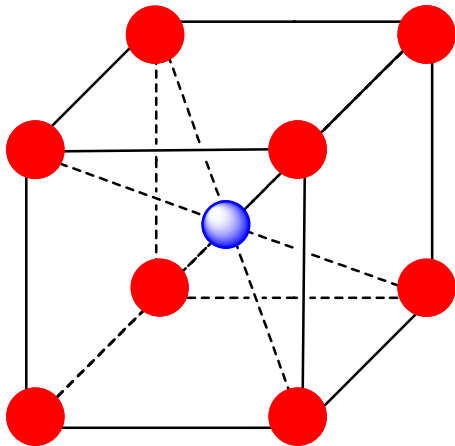


MgO (EN: Mg 1.2 O 3.5)

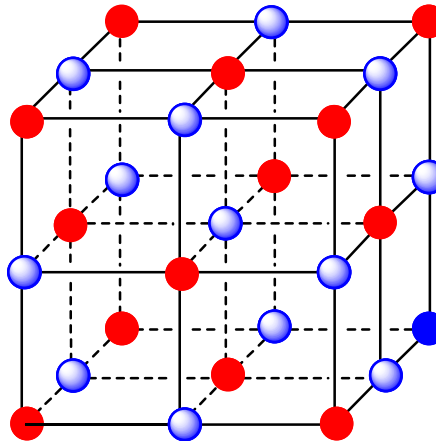


Ionische Verbindungen erfordern eine EN-Differenz > 1.5

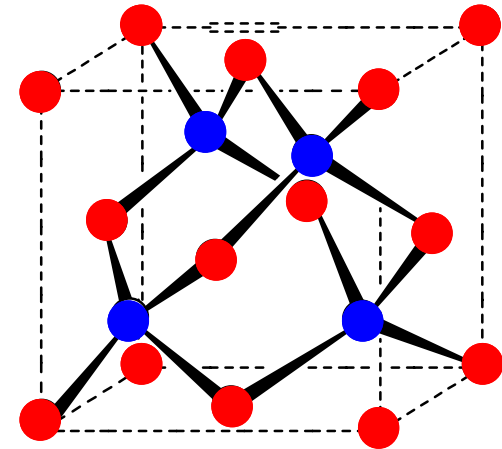
## Kristallgitter der Salze des AB-Typs



CsCl - Gitter  
KZ: 8  
Radienverhältnis  $> 0.732$

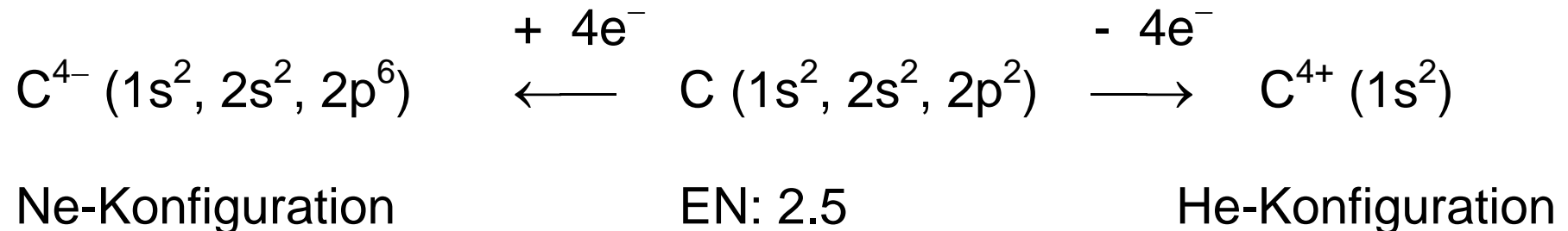


NaCl - Gitter  
KZ: 6  
Radienverhältnis:  
 $0.414 < x < 0.732$



ZnS - Gitter  
KZ: 4  
Radienverhältnis:  
 $0.225 < x < 0.414$

## Elektronenoktett durch „gemeinsame“ Elektronen: Die kovalente Bindung (MM Kap.8, 9)



$C^{4+} (1s^2)$ : Ionisierungsenergie  $\approx 14280$  kJ/mol

Unter normalen Bedingungen existieren keine  $C^{4+}$  - Ionen.

$C^{4-}$  - Ionen werden nur mit sehr elektropositiven Kationen gebildet (z.B. Alkalimetalle).

## **Kovalente Bindung**

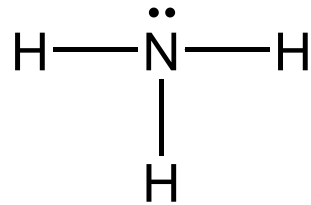
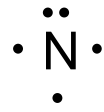
Bindung, die durch gemeinsame Elektronen zwischen zwei Atomen bewirkt wird. Bei einer Einfachbindung ist ein gemeinsames Elektronenpaar vorhanden.

Bei einer Doppel- oder Dreifachbindung sind es zwei bzw. drei gemeinsame Elektronenpaare.

## Oktettregel

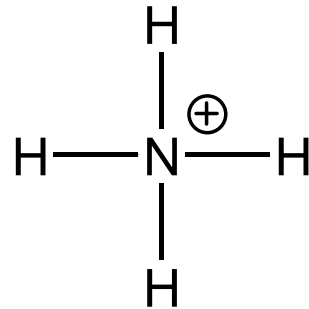
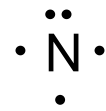
Nichtmetalle (ausser Wasserstoff) gehen so viele kovalente Bindungen ein, bis sie die acht Elektronen (Oktett) der folgenden Edelgaskonfiguration um sich haben. Das sind in der Regel **8-N kovalente Bindungen** (N = Hauptgruppennummer). Elemente der zweiten Periode können das Oktett in keinem Fall überschreiten, da sie nur s- und p-Valenzorbitale besitzen. Bei Elementen höherer Perioden ist hingegen eine Oktettaufweitung möglich.

3 H ·



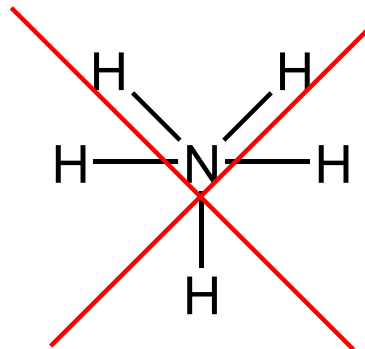
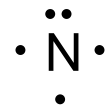
8 Valenzelektronen

4 H ·



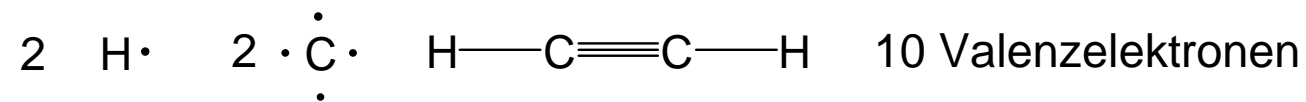
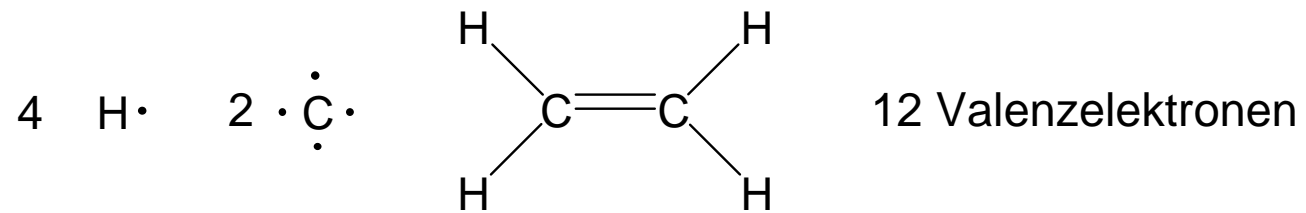
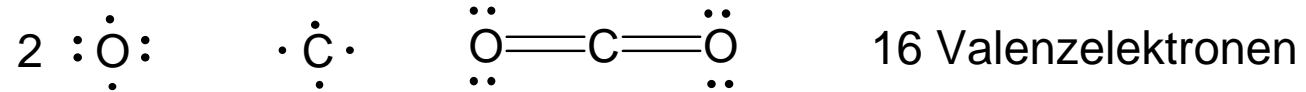
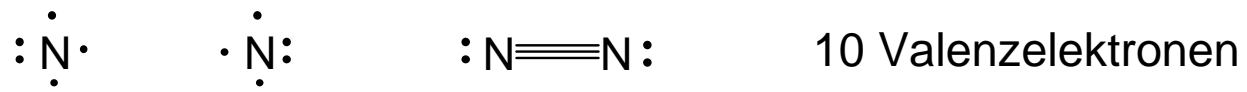
8 Valenzelektronen

5 H ·

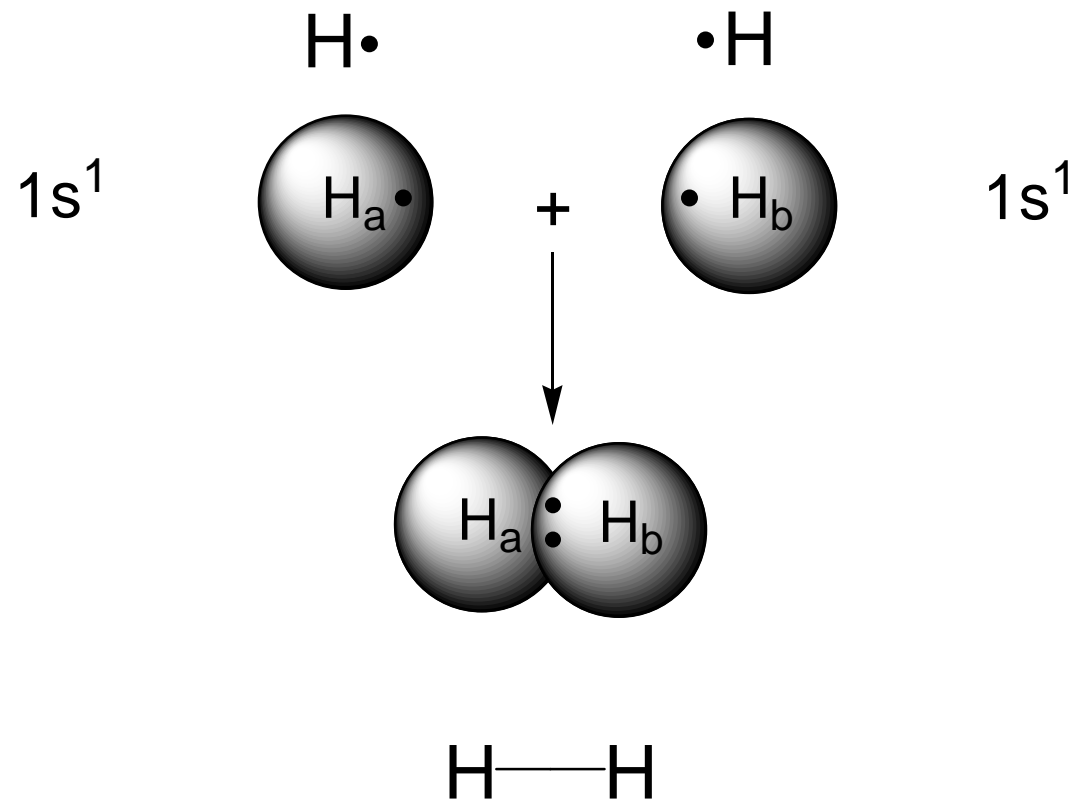


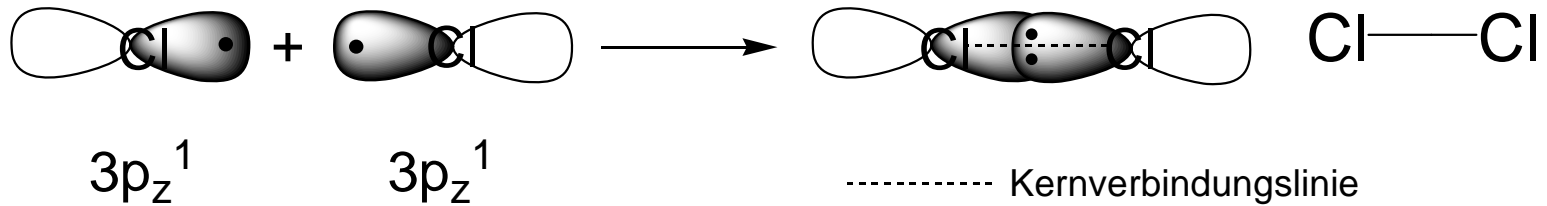
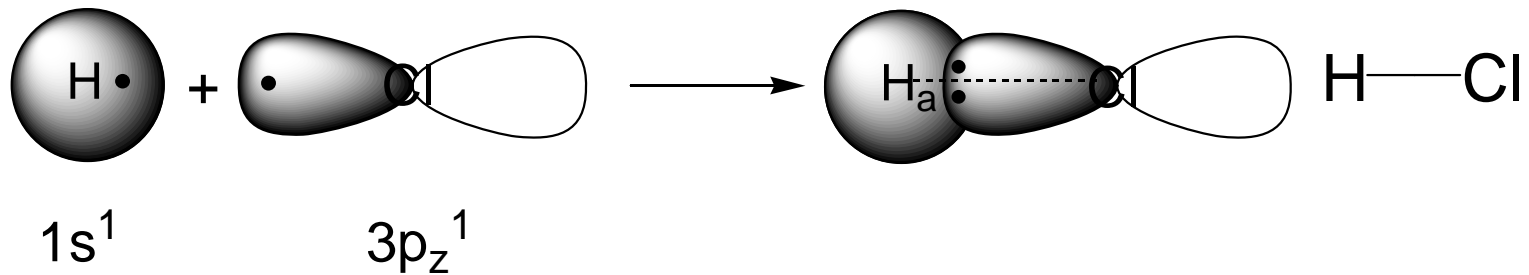
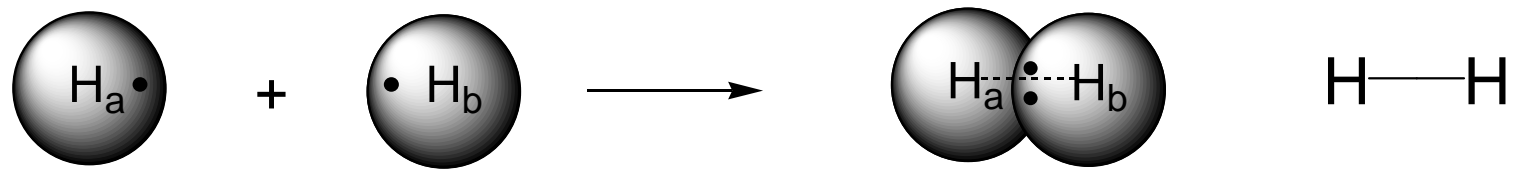
10 Valenzelektronen

verboten!



# Die kovalente Bindung im Wasserstoffmolekül





$\sigma$ -Bindungen entstehen durch Überlappung von s- bzw. p-Orbitalen rotationssymmetrisch zur Kernverbindungsline

## Bindung in mehratomigen Molekülen: Hybridorbitale

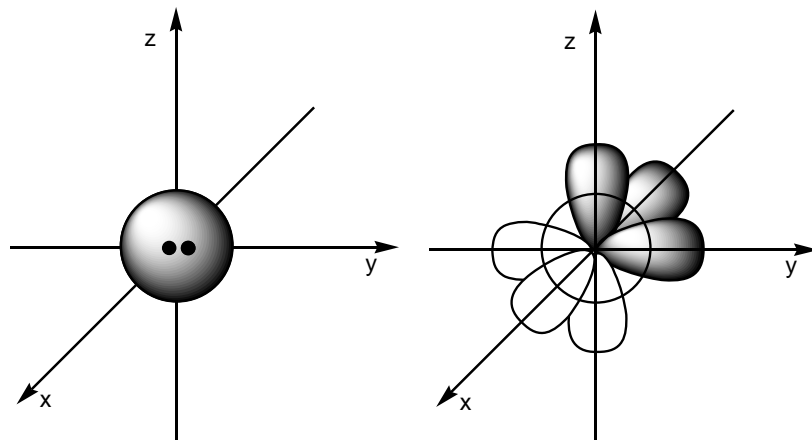
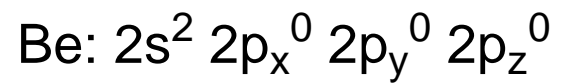
„Berylliumhydrid  $\text{BeH}_2$ “

$\text{BeH}_2$  ist als Monomer nicht existent. Es dient hier als Modellverbindung für das lineare  $\text{Be}(\text{CH}_3)_2$ .



Elektronenkonfiguration: Be ( $1s^2, 2s^2$ )

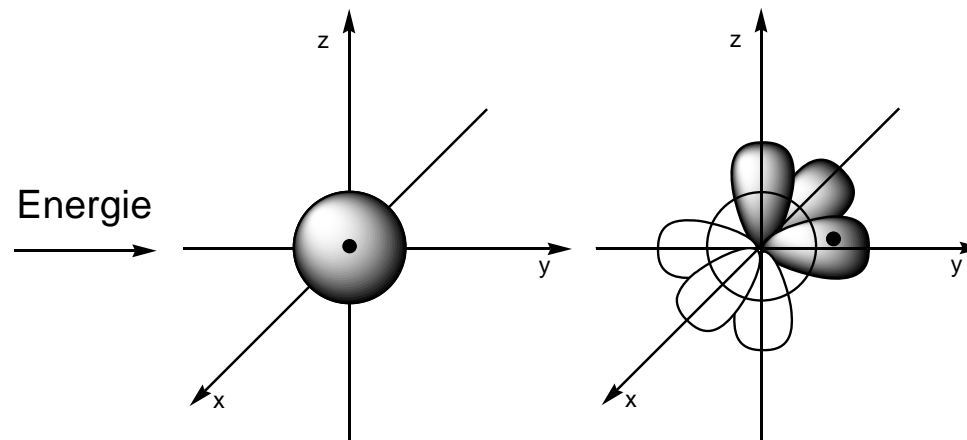
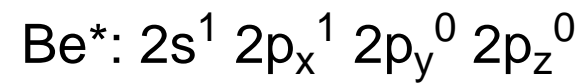
Be (Grundzustand)



s-AO

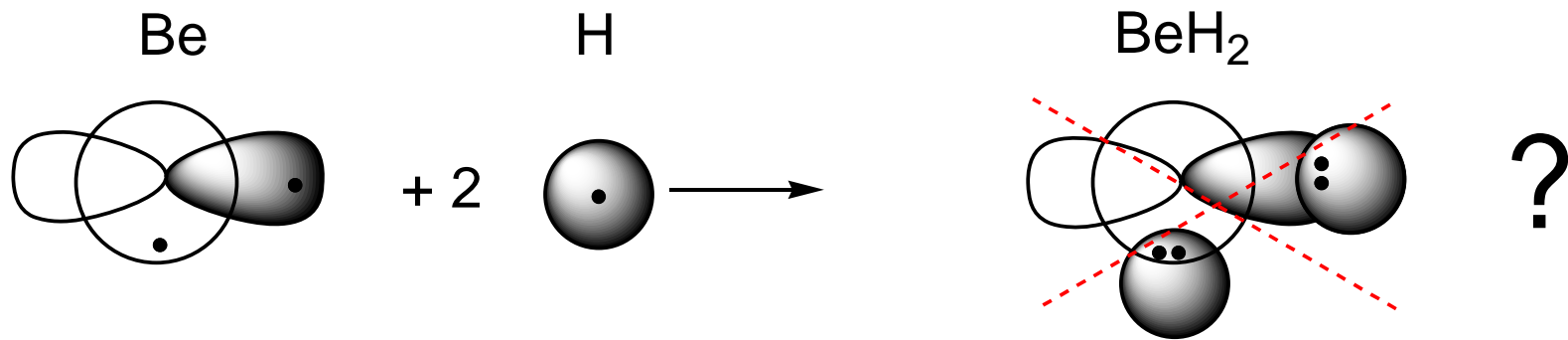
$p_x^-$ ,  $p_y^-$ ,  $p_z^-$ -AO

Be\* (angeregter Zustand)

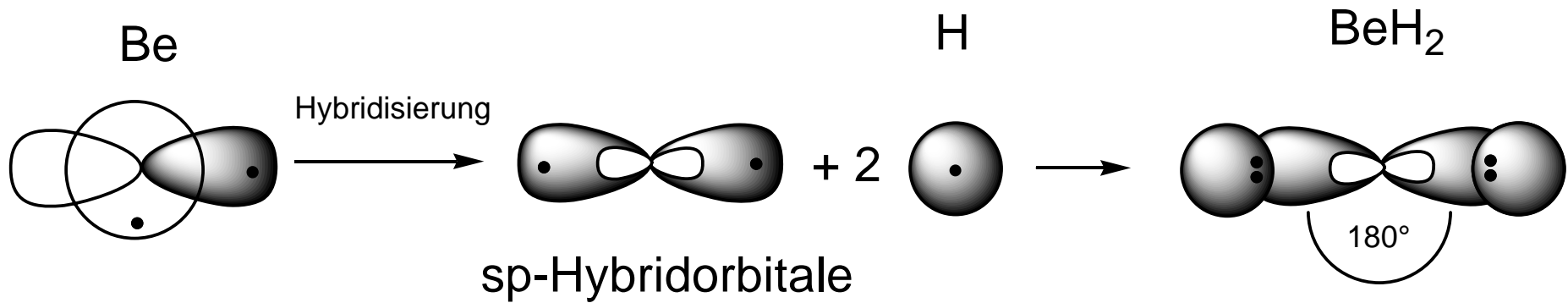


s-AO

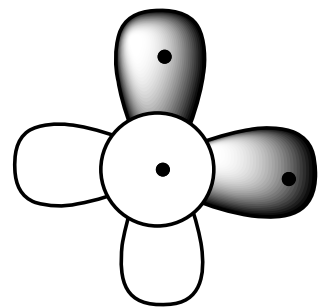
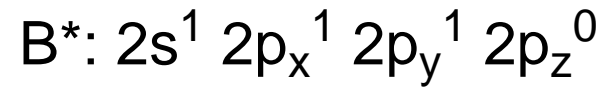
$p_x^-$ ,  $p_y^-$ ,  $p_z^-$ -AO



Dieses BeH<sub>2</sub>-Molekül hätte unterschiedliche Bindungslängen und wäre gewinkelt.

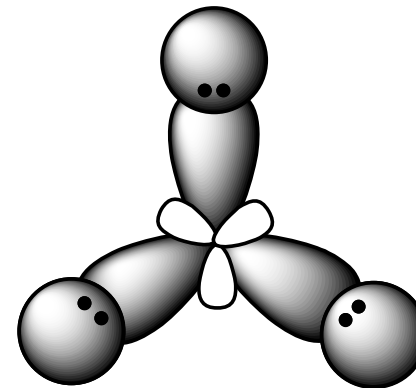
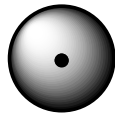


B\* (angeregter Zustand)

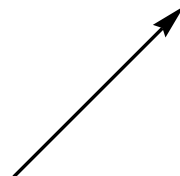
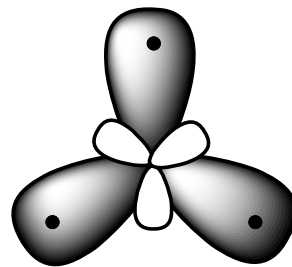
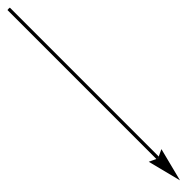


+ 3

H



" BH<sub>3</sub> "

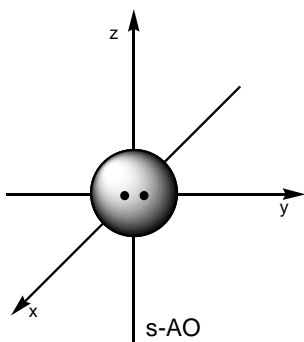
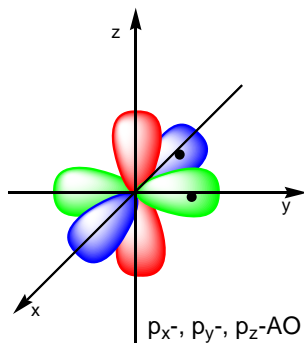
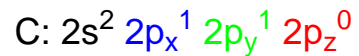


Modellsubstanz für trigonal-  
planares B(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>

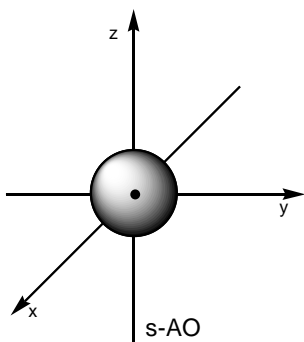
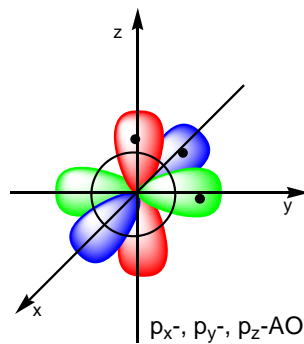
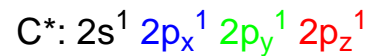
drei sp<sup>2</sup>-Hybridorbitale  
Bindungswinkel: 120°

## Bindungsverhältnisse im Methan CH<sub>4</sub>

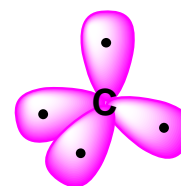
C (Grundzustand)



C\* (angeregter Zustand)

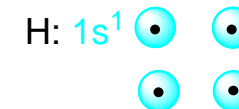


C\* (hybridisierter Zustand = "Valenzzustand")

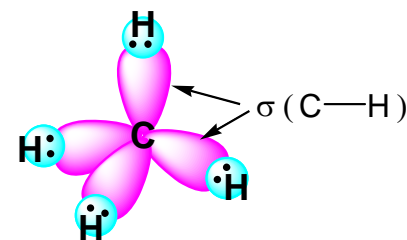


$sp^3$ -Hybrid-AO

+ 4 H·



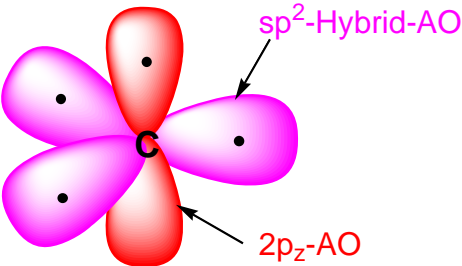
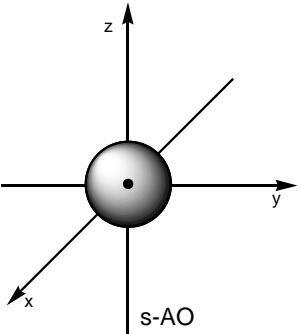
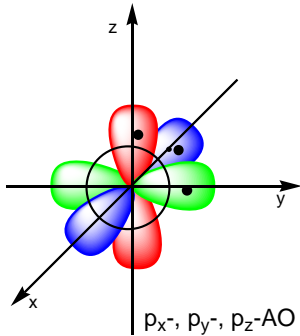
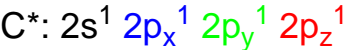
CH<sub>4</sub>-Tetraeder



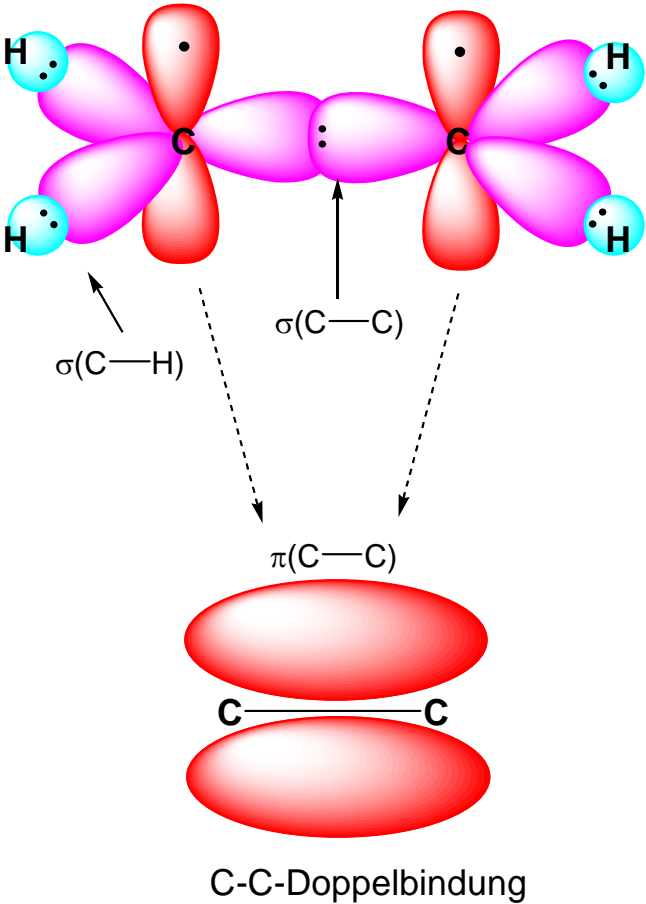
Bindungswinkel HCH: 109.5°

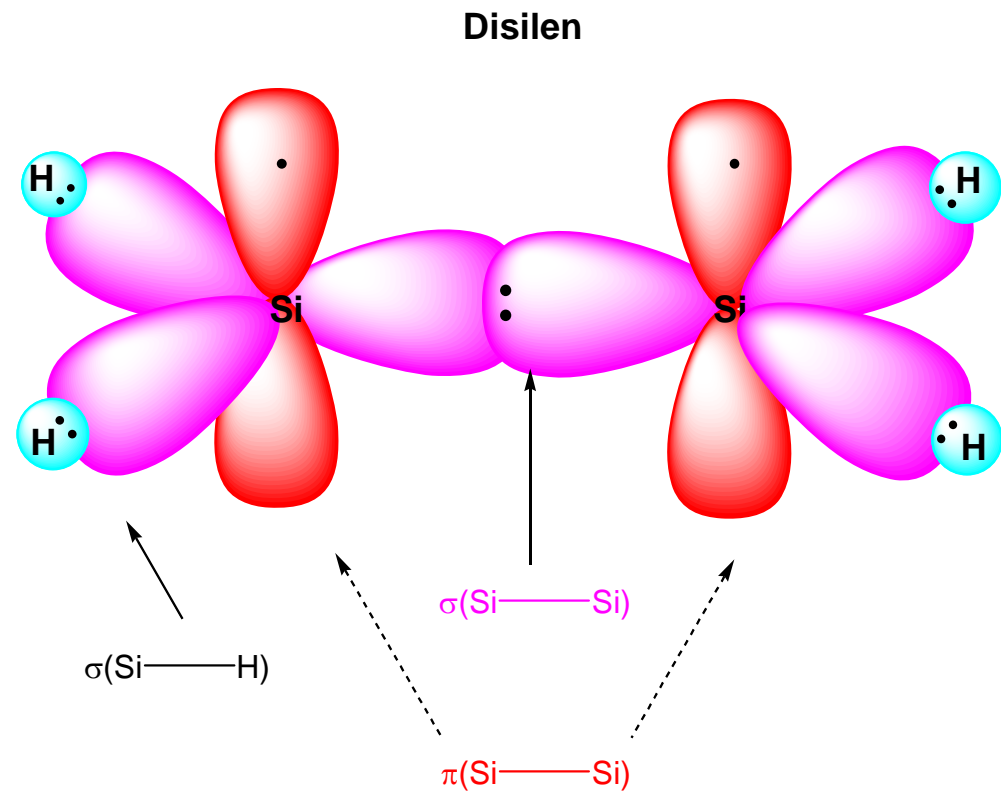
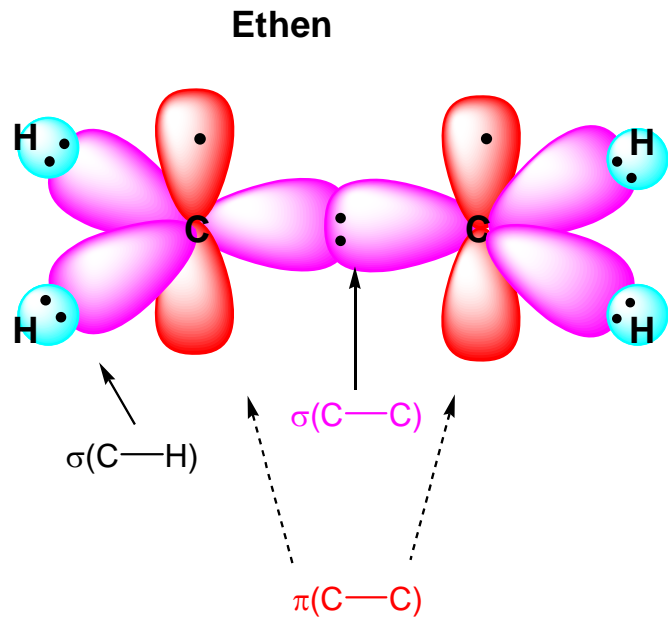
# Bindungsverhältnisse im Ethen C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>

C\* (angeregter Zustand)    C (hybridisierter Zustand)



## Ethen





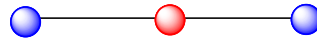
keine Wechselwirkung der  $p_z$ -Orbitale  
wegen zu grossem Atomabstand  
Doppelbindung wird nicht beobachtet.

"Klassische Doppelbindungsregel": Elemente der höheren Perioden können keine  $p_\pi - p_\pi$ -Doppelbindungen ausbilden.

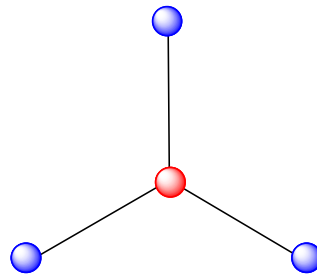
## Hybridorbitale

AO	Typ	Anzahl	Räumliche Anordnung	Beispiel
s, p <sub>x</sub>	sp	2	linear	Be(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
s, p <sub>x</sub> , p <sub>y</sub>	sp <sup>2</sup>	3	trigonal-planar	BF <sub>3</sub>
s, p <sub>x</sub> , p <sub>y</sub> , p <sub>z</sub>	sp <sup>3</sup>	4	tetraedrisch	CH <sub>4</sub>
d <sub>z<sup>2</sup></sub> , s, p <sub>x</sub> , p <sub>y</sub> , p <sub>z</sub>	dsp <sup>3</sup>	5	trigonal- bipyramidal	PF <sub>5</sub>
d <sub>z<sup>2</sup></sub> , d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> , s, p <sub>x</sub> , p <sub>y</sub> , p <sub>z</sub>	d <sup>2</sup> sp <sup>3</sup>	6	oktaedrisch	SF <sub>6</sub>

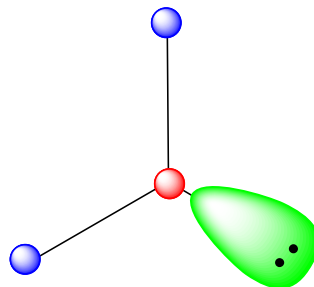
## VSEPR-Modell: 2 oder 3 Aufenthaltsräume



Einsame E-Paare: 0  
Molekültyp:  $AL_2$   
Geometrie: linear  
Beispiele:  $BeH_2$ ,  $CO_2$ ,  $HgCl_2$

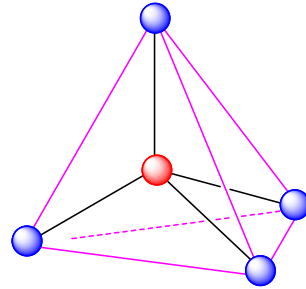


Einsame E-Paare: 0  
Molekültyp:  $AL_3$   
Geometrie: trigonal-planar  
Beispiele:  $BF_3$ ,  $SO_3$ ,  $NO_3^-$

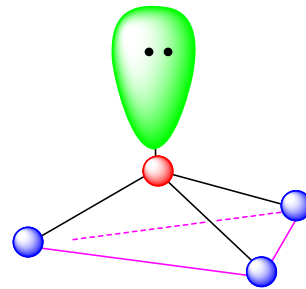


Einsame E-Paare: 1  
Molekültyp:  $AL_2E$   
Geometrie: V-förmig  
Beispiele:  $NO_2$ ,  $SO_2$ ,  $O_3$

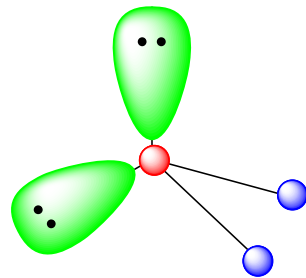
## VSEPR-Modell: 4 Aufenthaltsräume



Einsame E-Paare: 0  
Molekültyp:  $AL_4$   
Geometrie: tetraedrisch  
Beispiele:  $CH_4$ ,  $NH_4^+$ ,  $SO_4^{2-}$ ,  
 $POCl_3$ ,  $SO_2Cl_2$

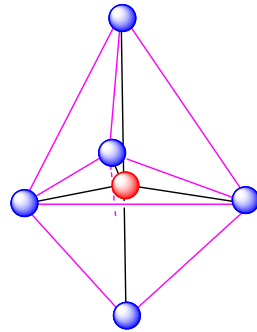


Einsame E-Paare: 1  
Molekültyp:  $AL_3E$   
Geometrie: trigonal pyramidal  
Beispiele:  $NH_3$ ,  $SO_3^{2-}$ ,  $H_3O^+$ ,  $SbCl_3$

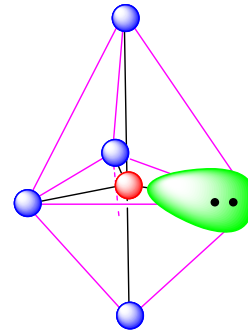


Einsame E-Paare: 2  
Molekültyp:  $AL_2E_2$   
Geometrie: V-förmig  
Beispiele:  $H_2O$ ,  $H_2S$ ,  $SCl_2$

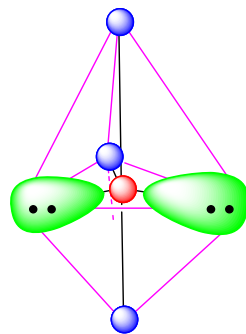
VSEPR-Modell: 5 Aufenthaltsräume



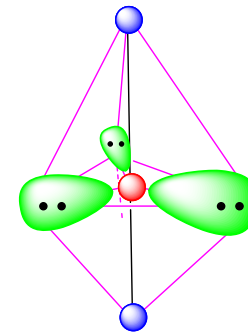
Einsame E-Paare: 0  
 Molekültyp:  $AL_5$   
 Geometrie: trigonal-bipyramidal  
 Beispiele:  $PF_5$ ,  $PCl_5$ ,  $SOF_4$



Einsame E-Paare: 1  
 Molekültyp:  $AL_4E$   
 Geometrie: verzerrt tetraedisch  
 Beispiele:  $SF_4$ ,  $SeF_4$ ,  $XeO_2F_2$

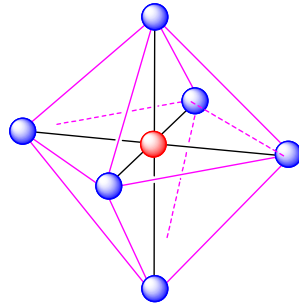


Einsame E-Paare: 2  
 Molekültyp:  $AL_3E_2$   
 Geometrie: T-förmig  
 Beispiele:  $ClF_3$ ,  $BrF_3$

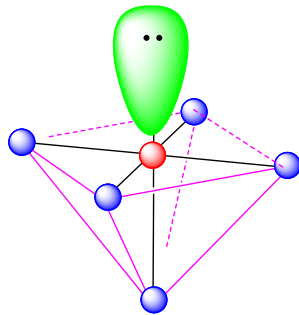


Einsame E-Paare: 3  
 Molekültyp:  $AL_2E_3$   
 Geometrie: linear  
 Beispiele:  $XeF_2$ ,  $I_3^-$ ,  $ICl_2^-$

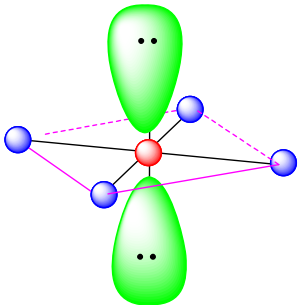
VSEPR-Modell: 6 Aufenthaltsräume



Einsame E-Paare: 0  
Molekültyp:  $AL_6$   
Geometrie: **oktaedrisch**  
Beispiele:  $SF_6$ ,  $PCl_6^-$



Einsame E-Paare: 1  
Molekültyp:  $AL_5E$   
Geometrie: **quadratisch pyramidal**  
Beispiele:  $BrF_5$ ,  $IF_5$



Einsame E-Paare: 2  
Molekültyp:  $AL_4E_2$   
Geometrie: **quadratisch planar**  
Beispiele:  $XeF_4$ ,  $ICl_4^-$

## **Mesomerie**

Formulierungsmethode für Bindungsverhältnisse in Molekülen, die durch eine einzige Lewisformel nicht richtig wiedergegeben werden können.

Die tatsächlichen Bindungsverhältnisse sind als Mittel zwischen mehreren Grenzformeln anzusehen (Delokalisation von Elektronen).

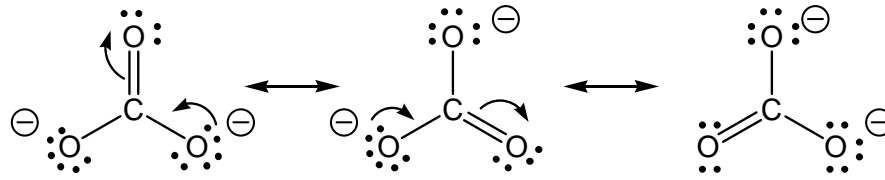
## **Formalladungen**

Eine willkürlich dem Atom zugewiesene elektrische Ladung, die sich ergibt, wenn die Bindungselektronen gleichmässig auf die beteiligten Atome aufgeteilt werden. Formalladungen dienen zur Bewertung und Interpretation von Formeln, Struktur und Eigenschaften von Molekülen.

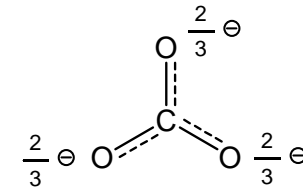
Sie geben nicht in jedem Fall die tatsächliche Ladungsverteilung wieder.

# Äquivalente Resonanzstrukturen

Carbonat  $\text{CO}_3^{2-}$  :  
24 Valenzelektronen



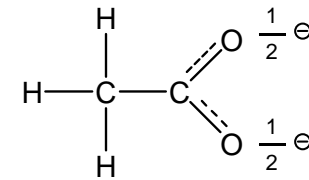
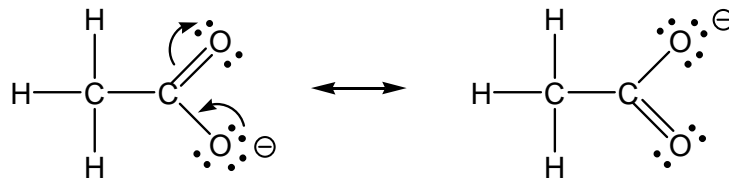
mesomere Grenzstrukturen



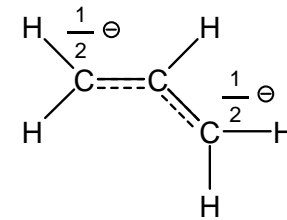
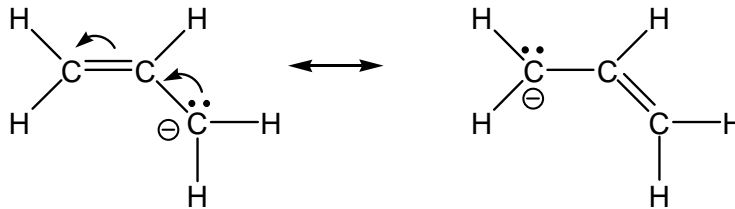
Resonanzhybrid

Das Carbonat-Ion ist ein Resonanzhybrid der drei mesomeren Grenzstrukturen.

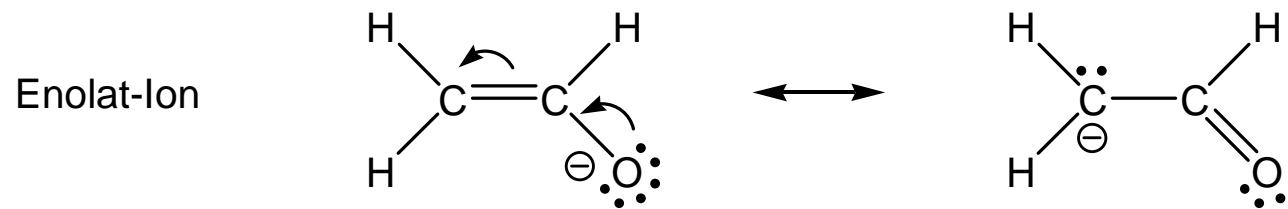
Acetat-Ion



Allyl-Ion

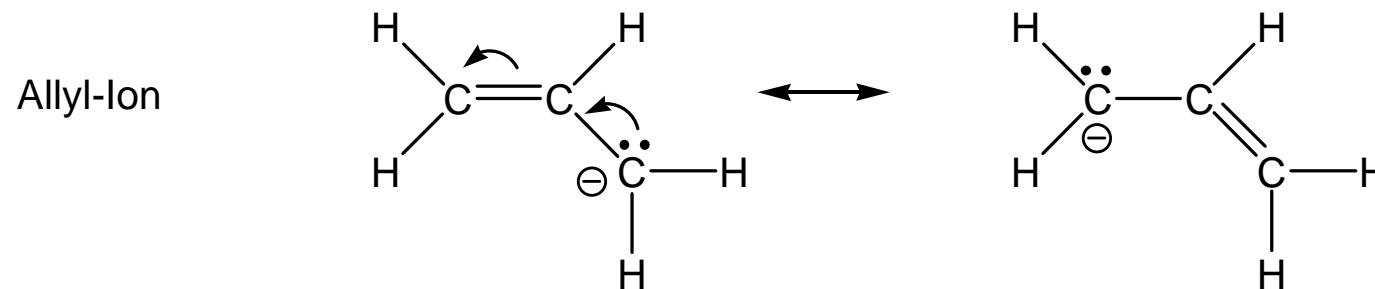


## Nicht-äquivalente Resonanzstrukturen des Enolat-Ions



nicht-äquivalente Resonanzstrukturen

zum Vergleich:

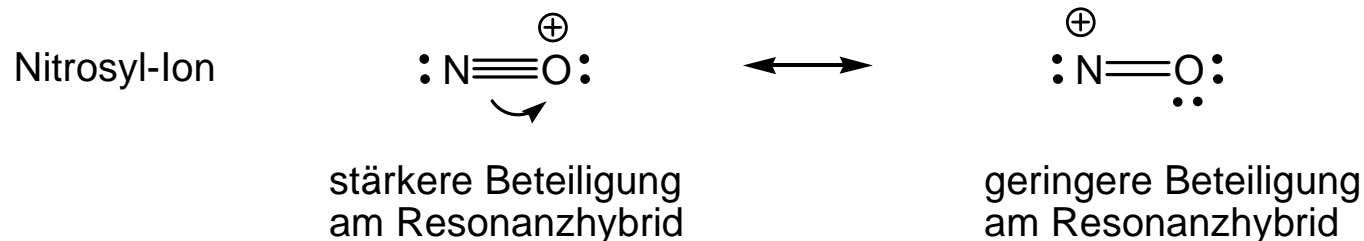


äquivalente Resonanzstrukturen

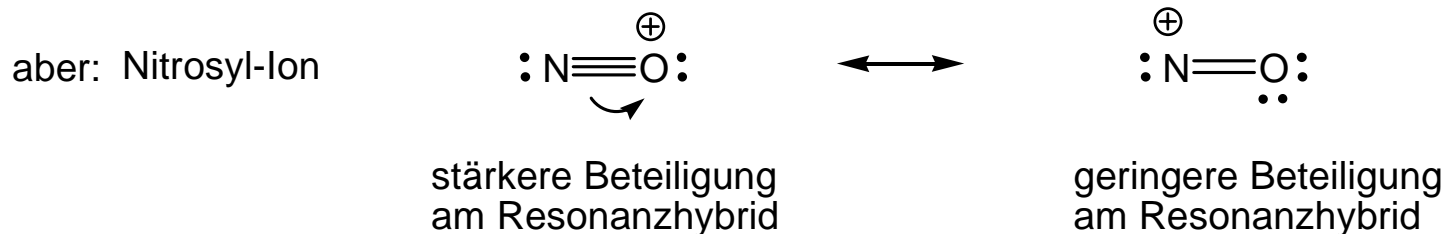
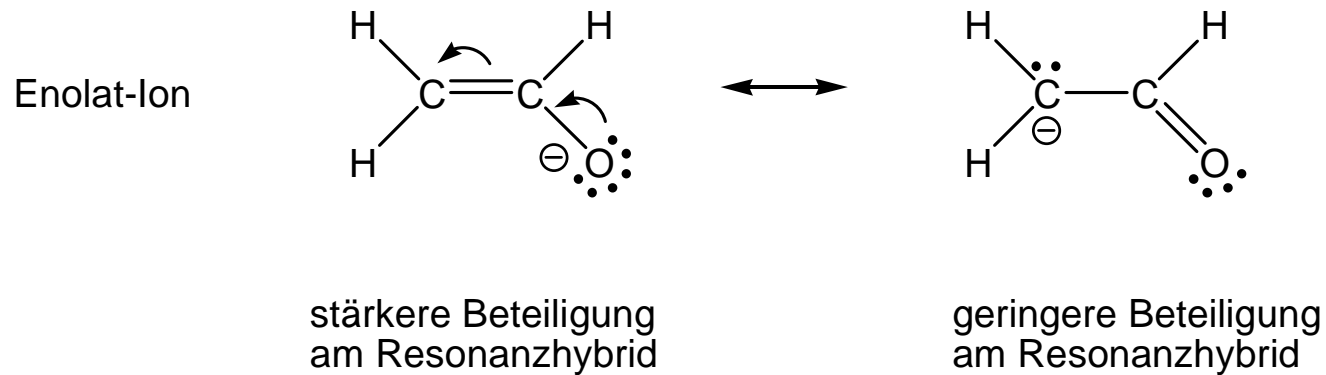
## Regeln zur Formulierung mesomerer Grenzformeln

Für alle mesomeren Grenzformeln muss die räumliche Anordnung der Atomkerne gleich sein. Grenzformeln unterscheiden sich nur in der Verteilung der Elektronen.

**Regel 1:** *Strukturen mit der grösstmöglichen Anzahl von Elektronenoktets sind bevorzugt.*

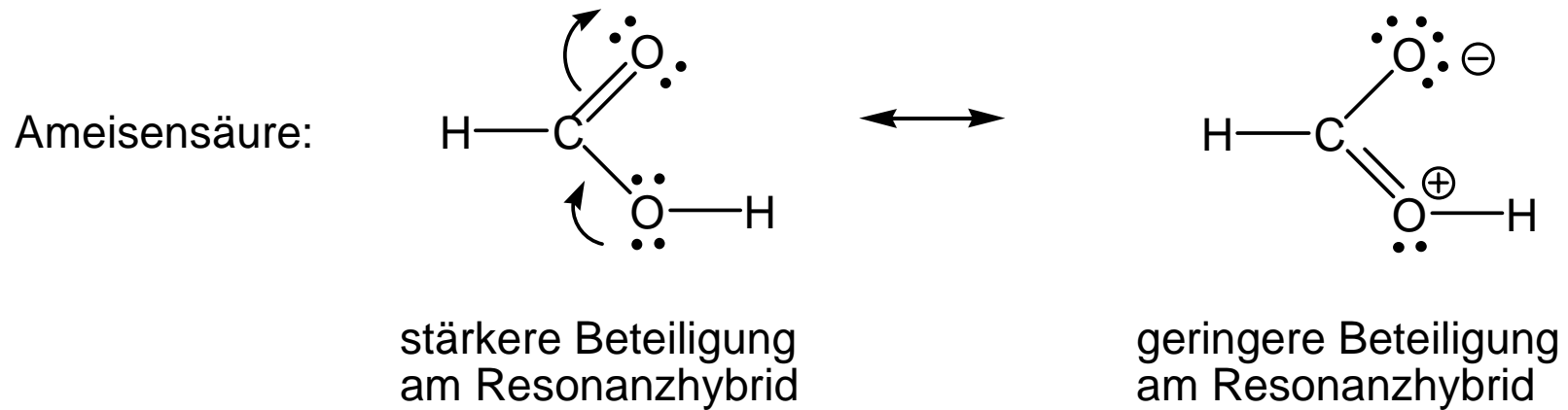


**Regel 2:** Negative Ladungen sollten bevorzugt am Atom mit der grössten, positive Ladungen am Atom mit der geringsten Elektronegativität lokalisiert sein.



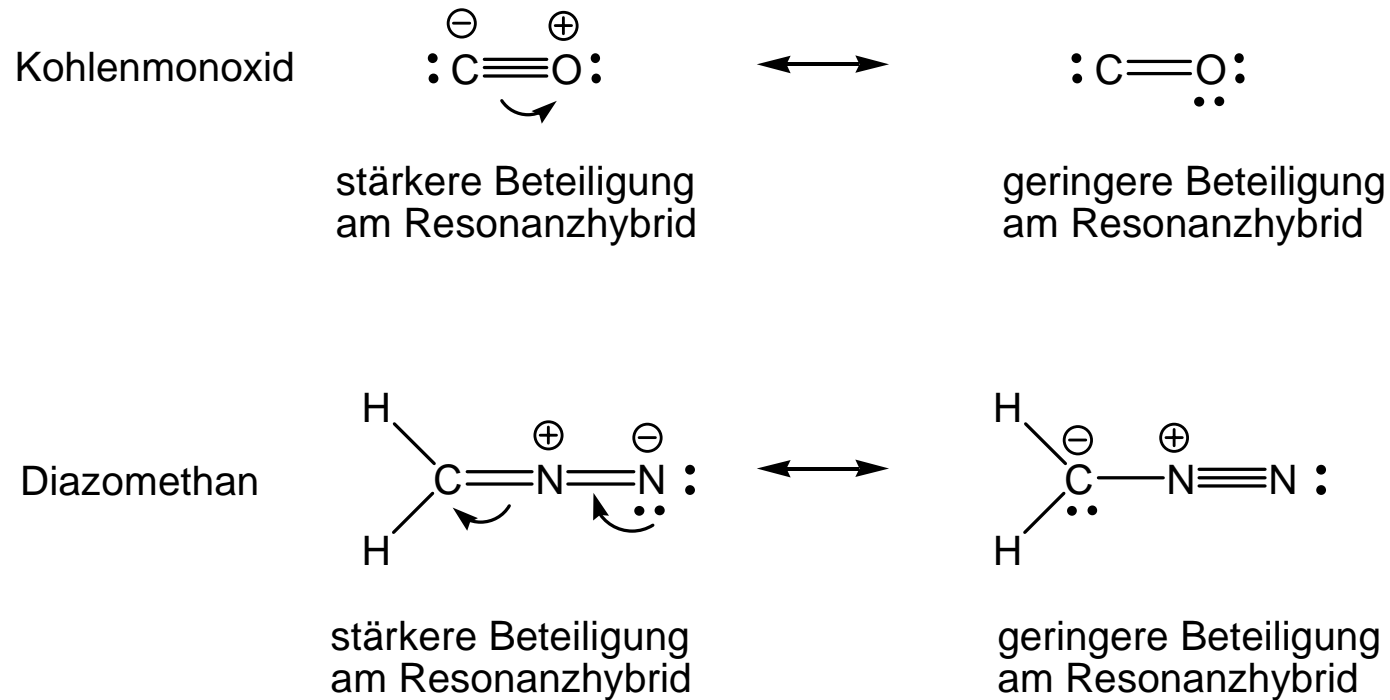
Regel 1 dominiert gegenüber Regel 2!

**Regel 3:** *Strukturen mit geringerer Ladungstrennung sind bevorzugt.*



Neutrale Strukturen sind gegenüber dipolaren begünstigt.

**Regel 4:** *Trennung von Ladungen kann durch die Oktettregel erzwungen werden.*

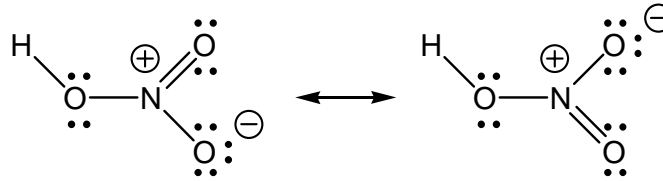


Regel 1 besitzt höhere Priorität als Regel 3. Bei mehreren ladungsgetrennten Resonanzstrukturen dominiert Regel 2.

## Mesomere Grenzstrukturen von Säuren und ihren konjugierten Basen

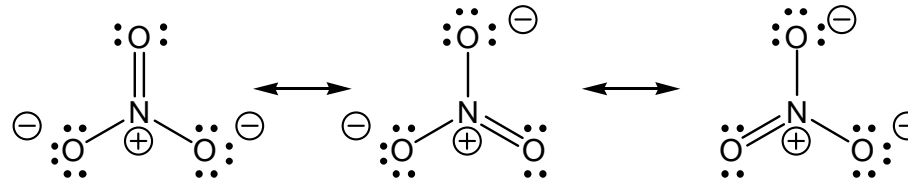
Salpetersäure  $\text{HNO}_3$  :

24 Valenzelektronen



Nitrat  $\text{NO}_3^-$  :

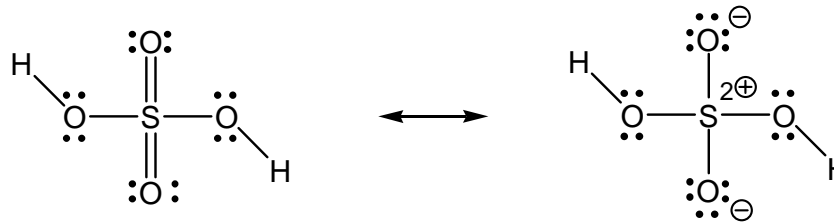
24 Valenzelektronen



Oktettregel  
streng gültig

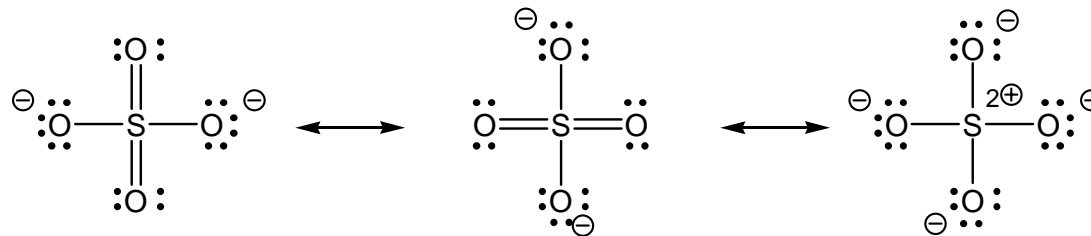
Schwefelsäure  $\text{H}_2\text{SO}_4$  :

32 Valenzelektronen

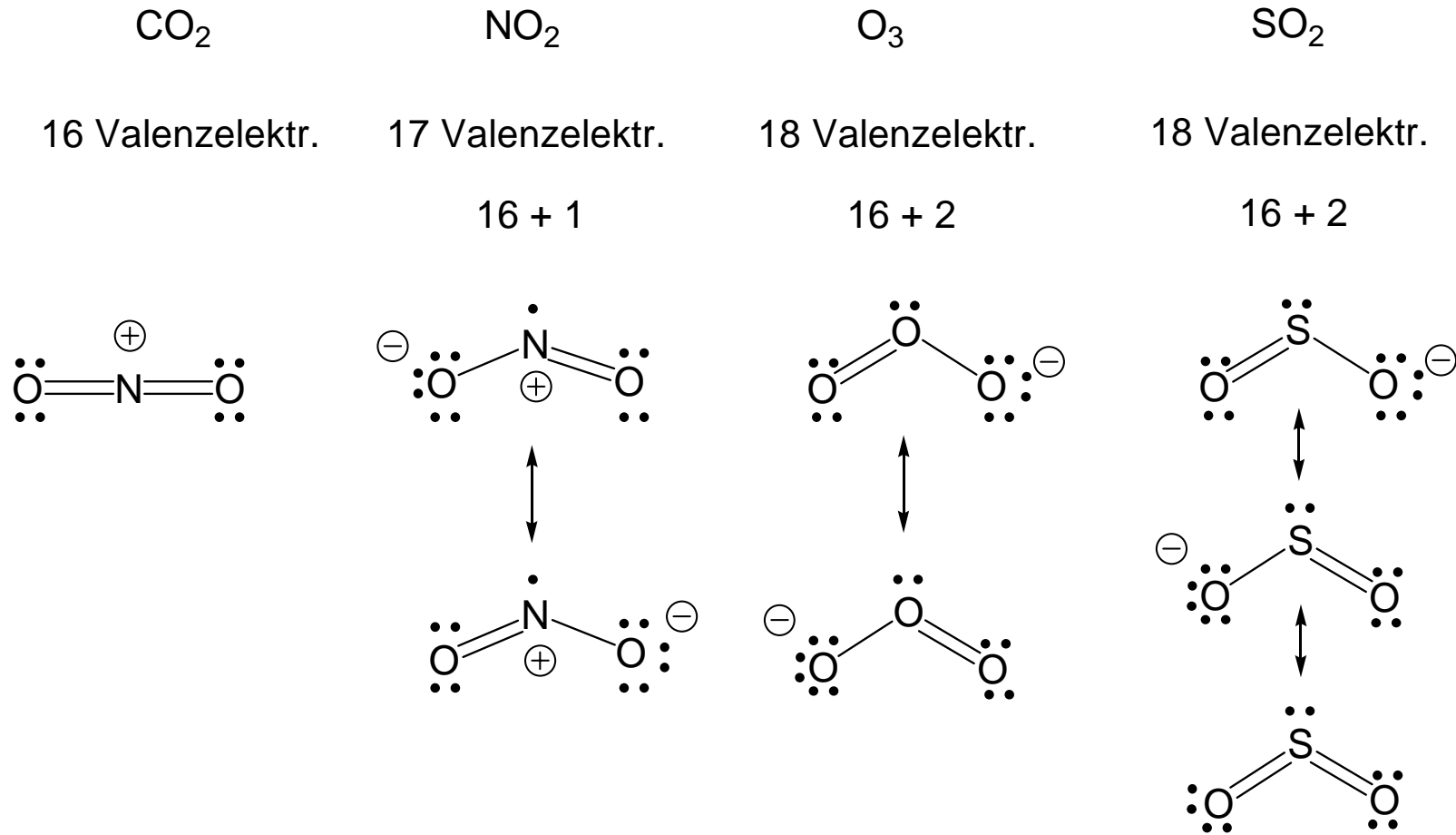


Sulfat  $\text{SO}_4^{2-}$  :

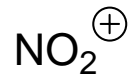
32 Valenzelektronen



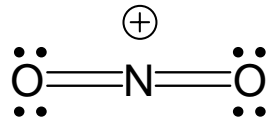
# Struktur der Verbindungen EO<sub>2</sub>



# Struktur von $\text{NO}_2$ sowie der vom Oxid abgeleiteten Ionen



16 Valenzelektr.

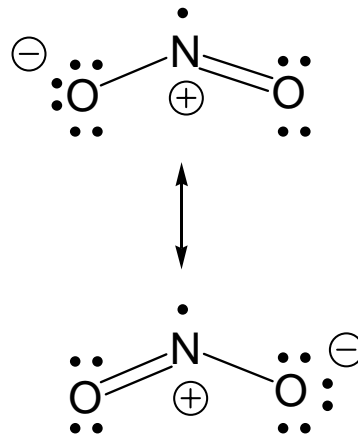


Abstand: 115 pm  
Winkel ONO:  $180^\circ$

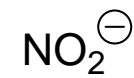


17 Valenzelektr.

16 + 1

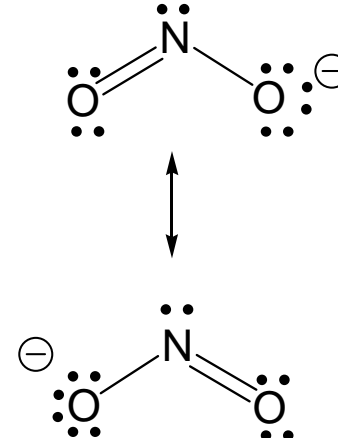


119 pm  
 $134^\circ$



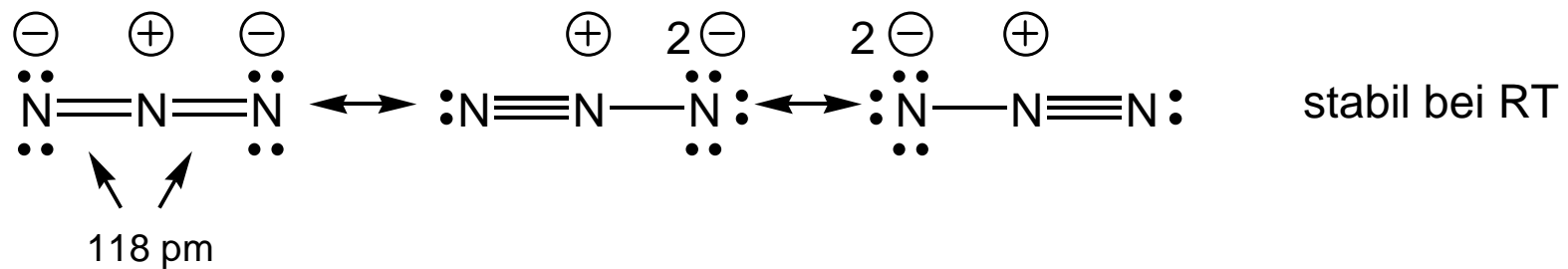
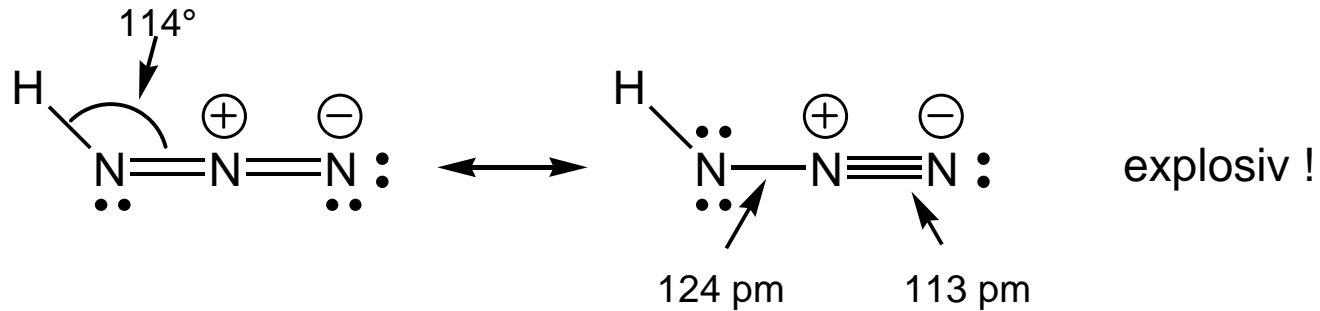
18 Valenzelektr.

16 + 2



124 pm  
 $115^\circ$

## Struktur-Reaktivitätsbeziehung am Beispiel der Stickstoffwasserstoffsäure $\text{HN}_3$



Mittlere Bindungslängen:	$\text{N}-\text{N}$	140 pm
	$\text{N}=\text{N}$	120 pm
	$\text{N}\equiv\text{N}$	110 pm