

Vorlesung

„Allgemeine und Anorganische Chemie für Human-, Zahn-, und Veterinärmediziner“

Vorlesung 3

Die Chemische Bindung, Theorien der Chemischen Bindung, Grenztypen Chemischer Bindung, Die Kovalente Bindung, Molekülstrukturen in Valenzstrichschreibweise, Mehrfachbindungen, Aussagen zur Geometrie chemischer Verbindungen (Gillespie-Nyholm-Regeln, VSEPR-Modell)

Theorien zur Chemischen Bindung

- *Elektronentheorie der Valenz* (relativ alt, Kossel, Lewis, 1916, Pauling) und *Molekülorbitalbeschreibung* (baut auf quantenchemischen Rechnungen auf)
- Ausgangspunkt ist die Elektronenkonfiguration der Atome - Edelgaskonfigurationen sind energetisch besonders begünstigt
- je nach Elektronenkonfiguration der Atome und ihren Eigenschaften ergeben sich verschiedene Möglichkeiten zur Realisierung einer gefüllten Edelgasschale
- daraus resultieren verschiedene Grenztypen der Chemischen Bindung (Kovalente Bindung, Ionenbindung, Metallbindung, van-der-Waals-Wechselwirkungen)

Die Kovalente Bindung

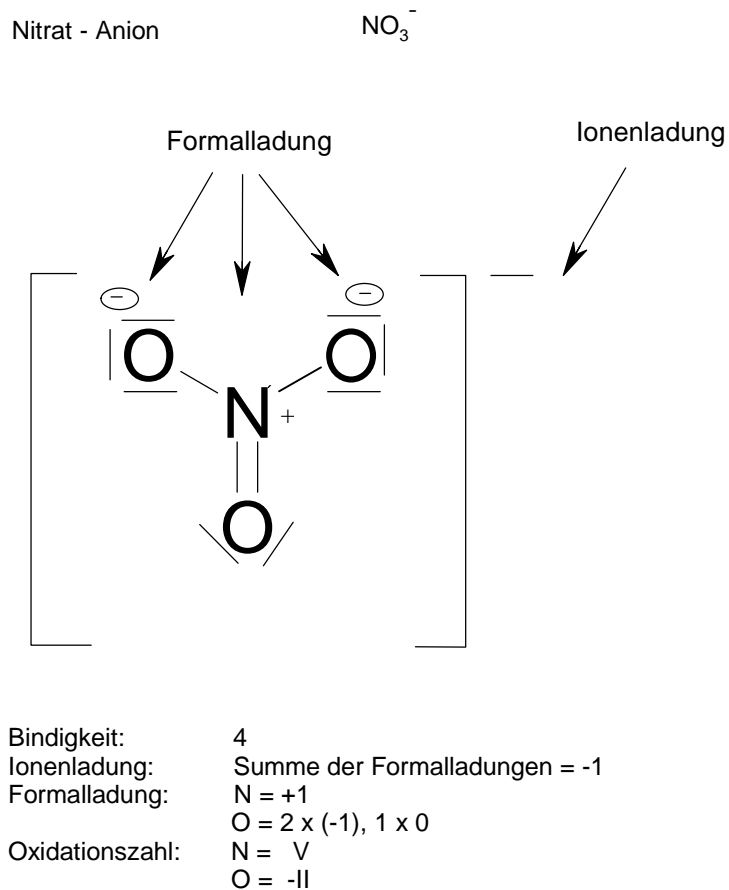
- In Molekülen werden Atome durch kovalente Bindungen zusammengehalten
- Eine kovalente Einfachbindung besteht aus einem Paar von Elektronen, das zwei Atomen gemeinsam gehört (Überlappung von Atomorbitalen → Molekülorbital)
- Molekülorbitale werden wie Atomorbitale mit Elektronen besetzt
Schreibweise: $\text{H} : \text{H}$ oder $\text{H} - \text{H}$
- Die Elektronen in kovalenten Bindungen gleichartiger Atome (H_2 , Cl_2 etc.) gehören beiden Bindungspartnern gleichermaßen
- Bei unterschiedlichen Elektronegativitäten der Bindungspartner (HBr , HCl) ist die Bindung polarisiert (d.h. das gemeinsame Elektronenpaar hat eine höhere Aufenthaltswahrscheinlichkeit beim elektronegativeren Bindungspartner). Bei unsymmetrischen Molekülen entstehen dann Dipolmomente (z. B. HCl , H_2O , aber nicht bei CCl_4 , obwohl die C-Cl-Bindungen polarisiert sind - symmetrisches Molekül)
- Kovalente Bindungen sind gerichtete Bindungen

Valenzstrichformeln

- Molekülstrukturen werden meist als Valenzstrichformeln gezeichnet (der/die Bindungsstrich/e zwischen der Bindungspartnern symbolisiert das/die gemeinsame/n Elektronenpaar/e)
- durch die Bindung erreichen die Partner "Edelgaskonfiguration"
- Mehrfachbindungen (Doppel- oder Dreifachbindungen) werden gebildet, wenn die elektronischen Verhältnisse (Zahl der erforderlichen Elektronenpaare) es erfordern und die Energien und Symmetrien der beteiligten Atomorbitale es erlauben.

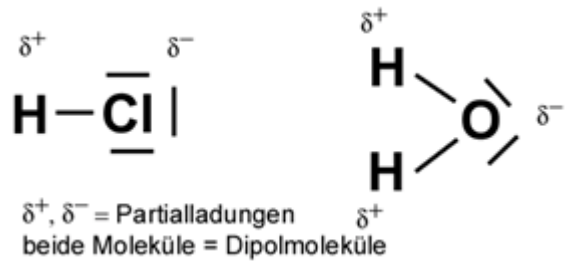
Regeln zum Aufstellen von Valenzstrichformeln

1. Das Molekül strebt die niedrigste Gesamtenergie an
2. Beim Entstehen einer Bindung bilden normalerweise zwei Elektronen ein Paar (**Pauli-Prinzip**)
3. In der Valenzstrichformel sind Bindungselektronenpaare und einsame Elektronenpaare möglichst so zu verteilen, daß für jedes Atom ein Oktett resultiert (**Oktettregel**)
4. Bei Elementen, denen d-Orbitale zur Verfügung stehen, kann die Valenzschale über das Oktett hinaus erweitert werden
5. Doppel- und Dreifachbindungen kommen fast ausschließlich bei Elementen der ersten Achterperiode (kleine Atomradien) vor (**Doppelbindungsregel**)
6. Die Formalladungen werden durch Vergleich der nach der Valenzstrichformel jedem Atom zukommenden Elektronen mit den im freien Atom vorkommenden Valenzelektronen ermittelt



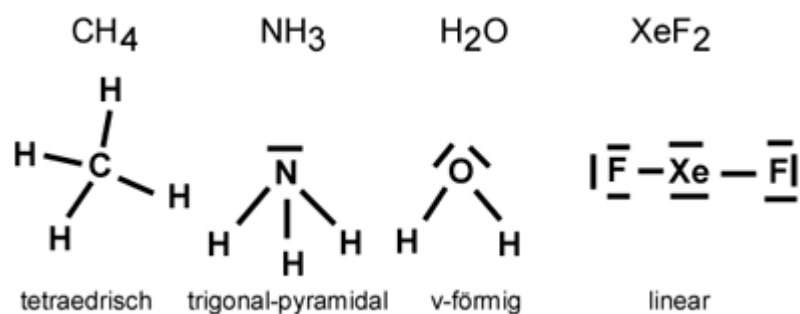
Beispiel: Nitrat-Anion NO_3^-

Beispiel: Heteroatomare Moleküle:



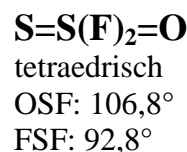
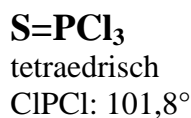
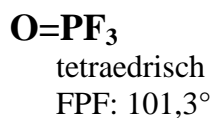
Gillespie--Nyholm--Regeln (Valenzelektronenpaar--Abstoßungs--Modell)

- wichtiges Instrument zur Abschätzung der Molekülgeometrie
- In der Valenzschale eines Atoms ordnet sich eine gegebene Zahl von Elektronen bevorzugt so an, daß ihr gegenseitiger Abstand am größten wird
- Ein nichtbindendes Elektronenpaar beansprucht mehr Platz auf der Oberfläche eines Atoms als ein bindendes
- Die Raumfüllung eines bindenden Elektronenpaares nimmt mit steigender Elektronegativität des Bindungspartners ab
- Die beiden Elektronenpaare einer Doppelbindung (oder die drei Paare einer Dreifachbindung) beanspruchen mehr Platz als das eine Elektronenpaar einer Einfachbindung



Aussagen zu Bindungswinkeln

- wegen der größeren Elektronenzahl beansprucht eine Mehrfachbindung mehr Raum als eine Einfachbindung



- nichtbindende Elektronenpaare (freie Elektronenpaare) nehmen größeren Raum ein als bindende



Regeln zur Bestimmung der molekularen Geometrie

- Aufstellen der Valenzstrichformeln (Prüfen der Elektronenzahl)
- Bestimmung der Symmetrie **mit** freien Elektronenpaaren
- Bestimmung der Position der freien Elektronenpaare
- Bestimmung der **Molekülgeometrie**