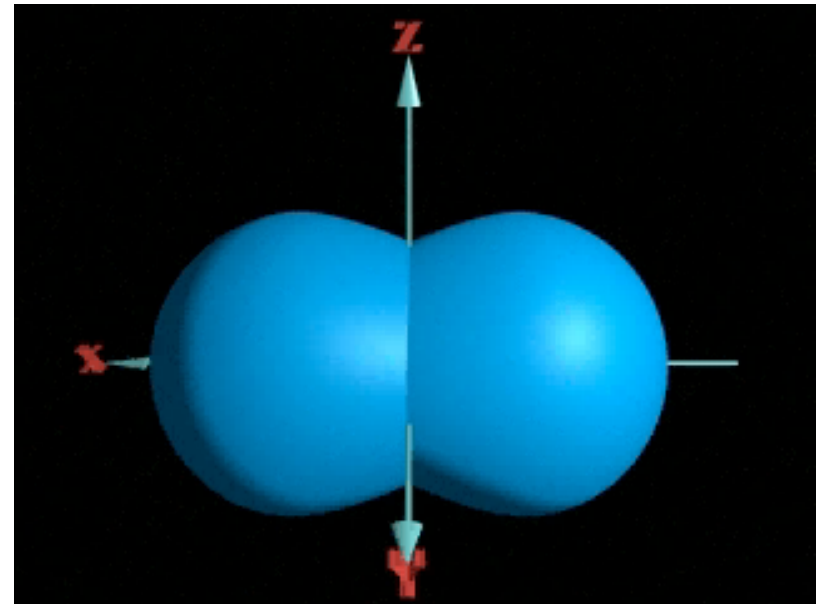
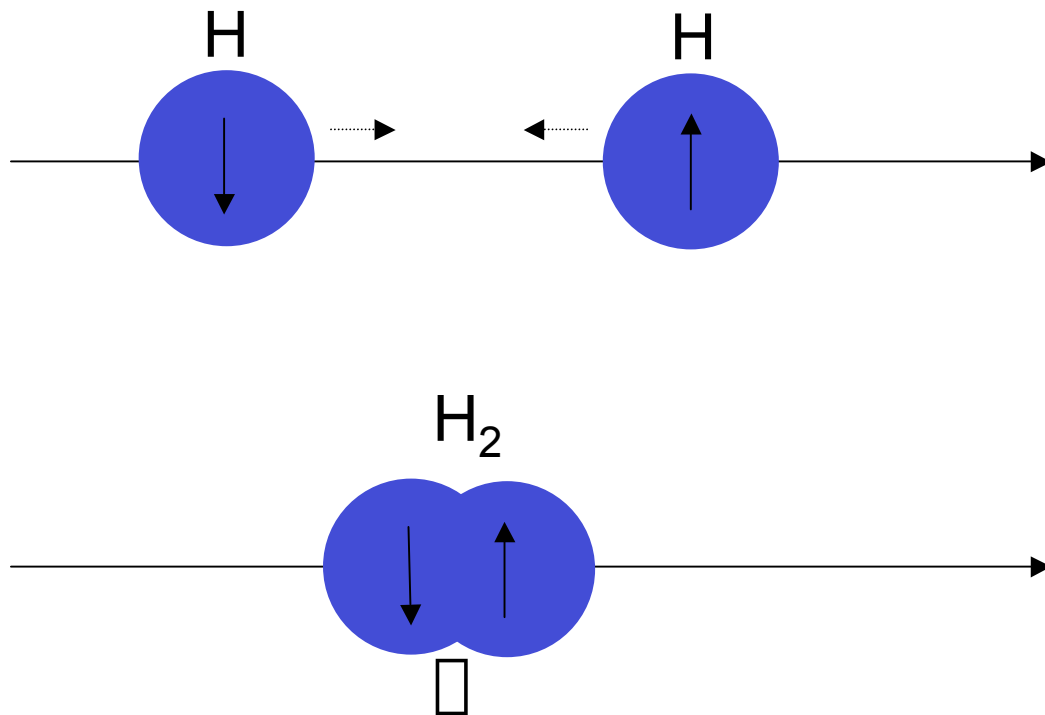


Valenz-Bindungstheorie

“Beschreibung von Molekülen mit Hilfe von Orbitalen”

H₂:



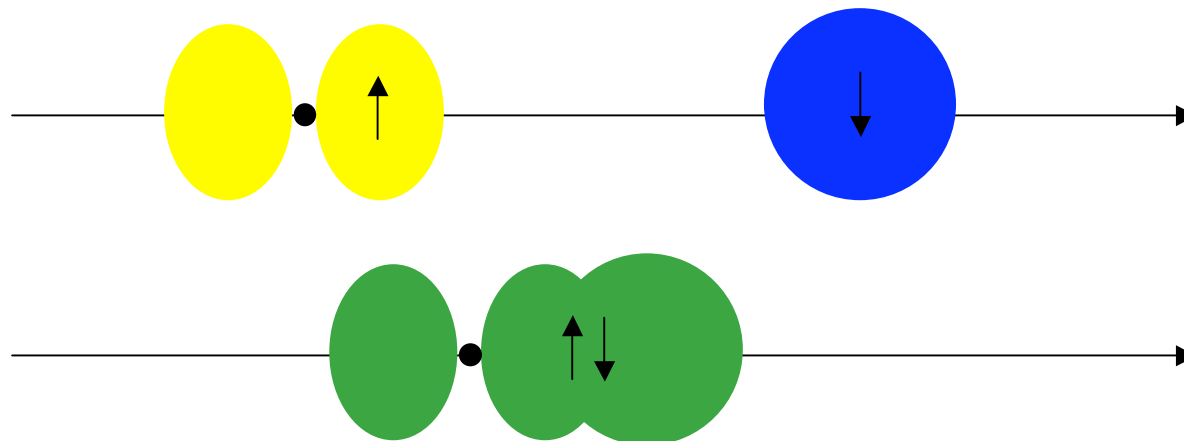
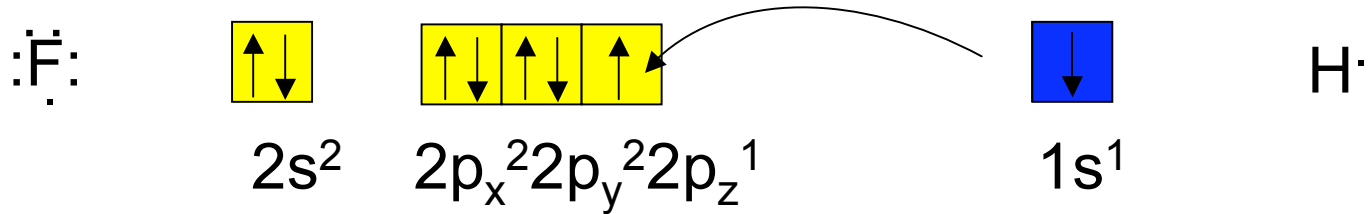
Überlappung von Atomorbitalen

→ \square -Bindung: 2 Elektronen in einem Orbital zylindrischer Symmetrie um die interatomare Achse!

Beispiel:HF

→ Welche Elektronen bilden die Bindung?
Welche Atomorbitale besetzen sie?

↪ Lewis-Formel und Elektronenkonfiguration

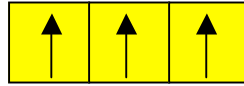


Eine einzelne kovalente Bindung besteht aus einer σ -Bindung in der 2 Elektronen über zwei miteinander verknüpfte Atome verteilt sind!

➔ Kombination von 2 s Orbitalen
 1 s und 1 p Orbital
 2 p Orbitalen (Beispiel?)

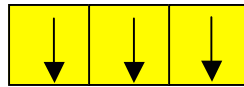
Einfachbindung: ein gemeinsames Elektronenpaar, das eine σ -Bindung bildet

N_2



$2s^2$

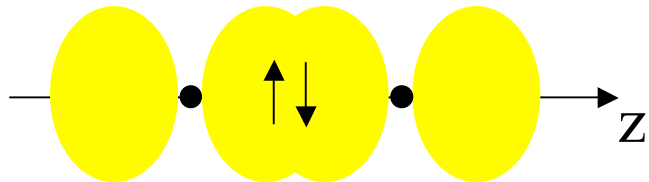
$2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$



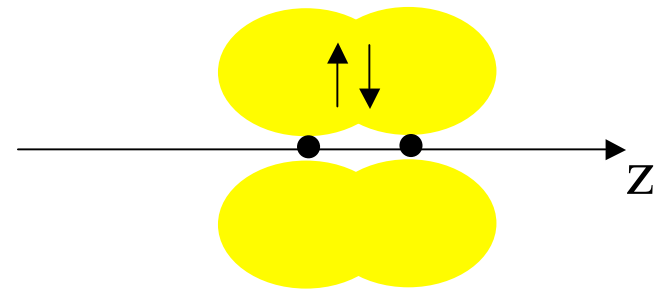
$2s^2$

$2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$

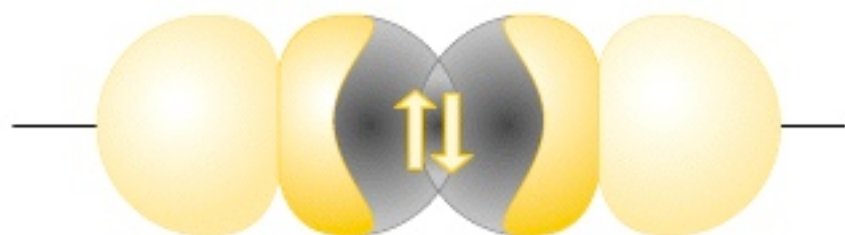
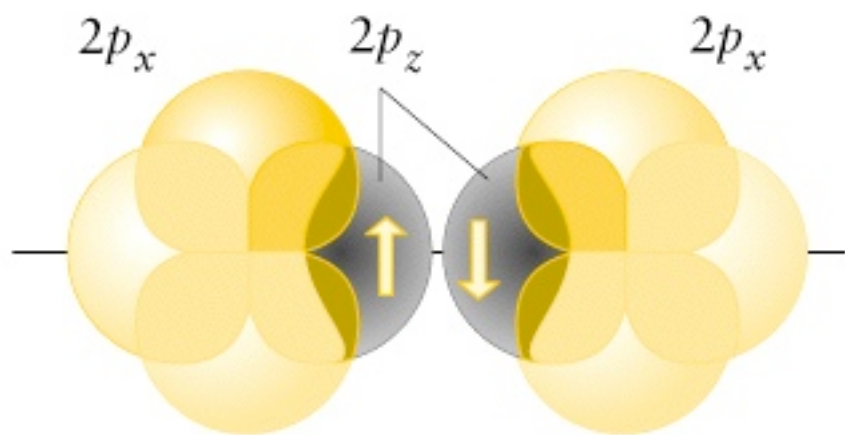
$2 \square p_z$



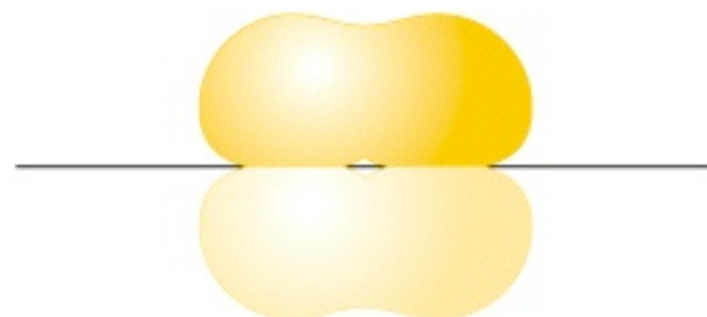
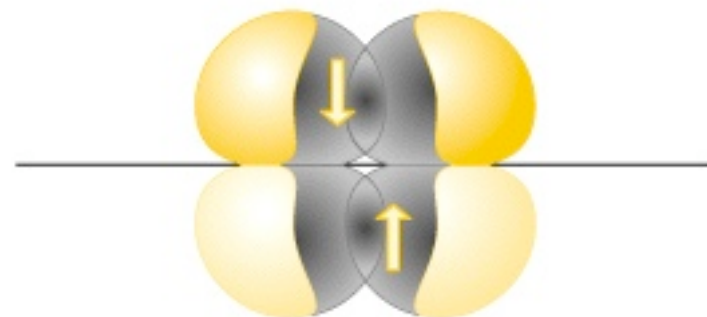
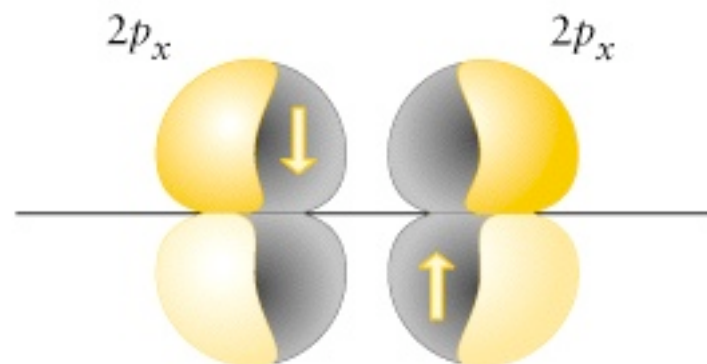
$2 \square p_x$ or $2 \square p_y$



\square Bindung!



σ -Bindung



π -Bindung

□-Bindung: 2 Elektronen, die ein Orbital mit 2 'Lappen' auf den beiden Seiten der intermolekularen Achse besetzen

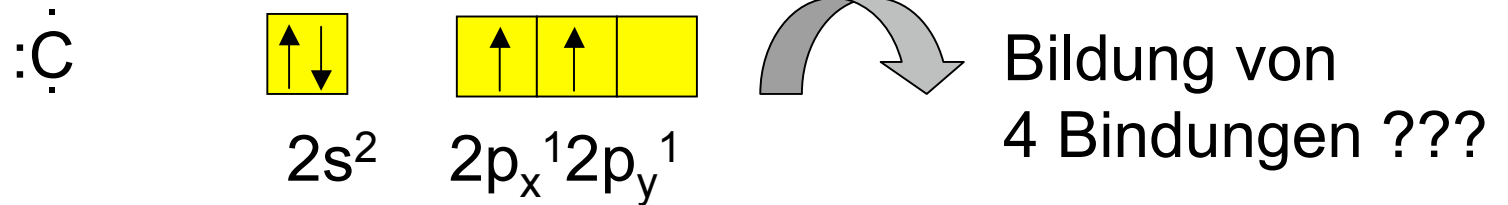
$N_2 \Rightarrow$ insgesamt 3 Bindungen: 1 □
und 2 □ Bindungen

Doppelbindung: 2 gemeinsame Elektronenpaare , die eine □- und eine □-Bindung bilden

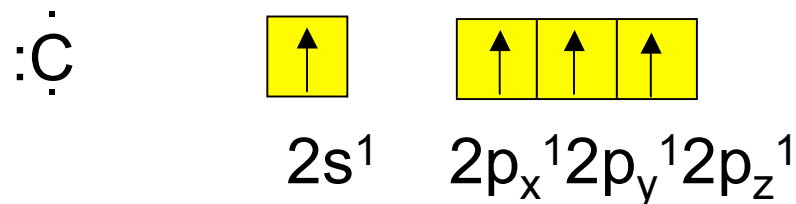
Dreifachbindung: 3 gemeinsame Elektronenpaare , die eine □- und zwei □-Bindungen bilden

Hybridisierung

CH₄ → Problem:

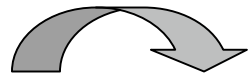


Lösung: investiere etwas Energie ins C-Atom, um ein 2s-Elektron in ein (energiereicheres) 2p Orbital zu überführen!



(Erlaubt, wenn bei der Molekülbildung mehr Energie wiedergewonnen wird (Netto-Energiegewinn!))

Problem: → Bildung zweier verschiedener □ Bindungsarten mit H!!



und

1 durch Ueberlappung von H **1s** mit C **2s**

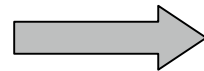
3 durch Ueberlappung von H **1s** mit C **2p**

(im Winkel 90° zueinander!)

Experimentell: 4 äquivalente C-H Bindungen im Winkel 109.5°!

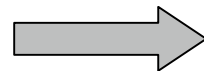
(Gestalt?)

Wellencharakter der Orbitale



Ueberlagerung

(Interferenzmuster)!

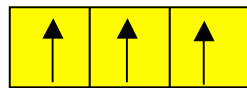


Bildung von 4 identischen

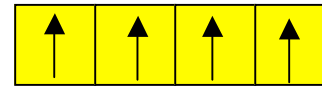
Hybridorbitalen



$2s^1$

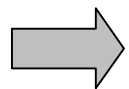
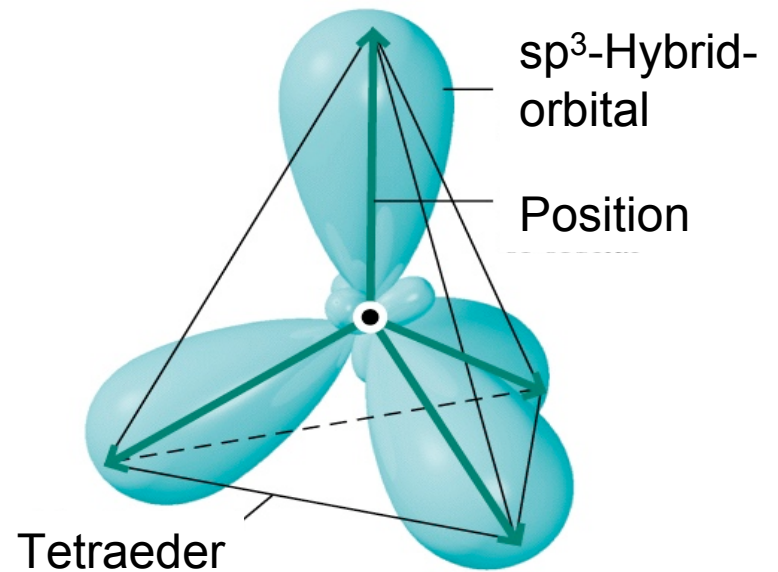
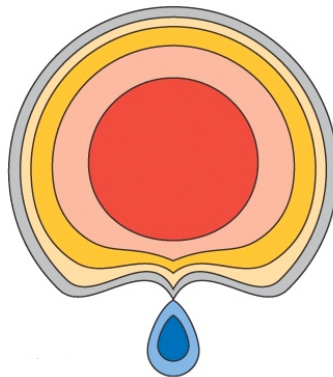
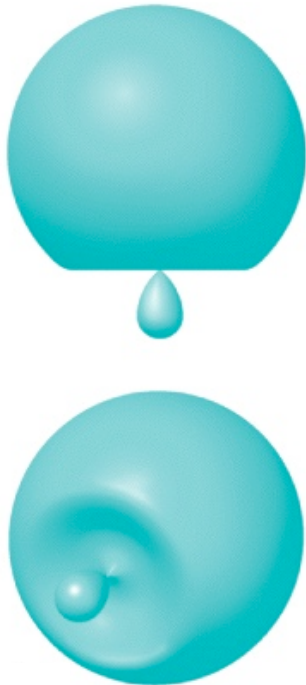


$2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$



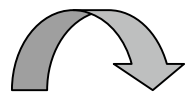
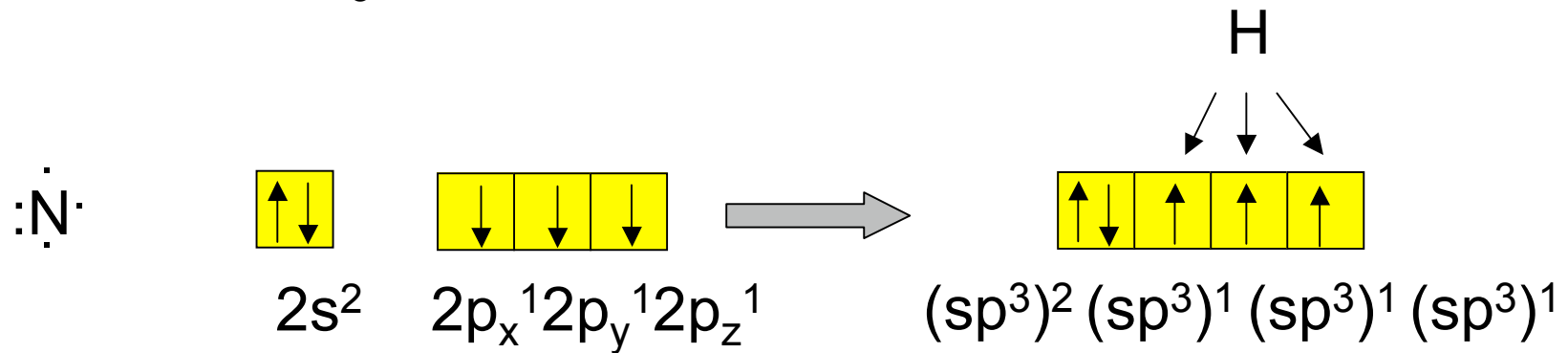
$(sp^3)^1 (sp^3)^1 (sp^3)^1 (sp^3)^1$

sp^3 Hybridorbitale des C



\square -Bindungen in Methan sind nach den 4 Ecken eines Tetraeders ausgerichtet

Aehnlich: NH₃



3 σ -Bindungen und zwei Elektronen in einem
'nicht-bindenden' Orbital!

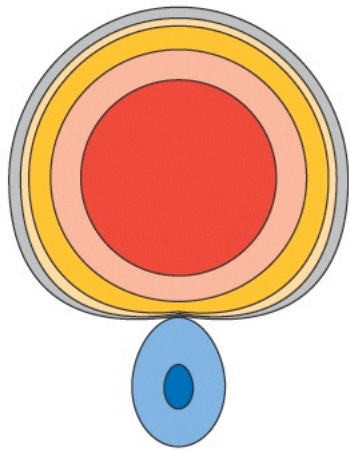
Andere Hybridisierungen

→ Mischen anderer Atomorbitale,

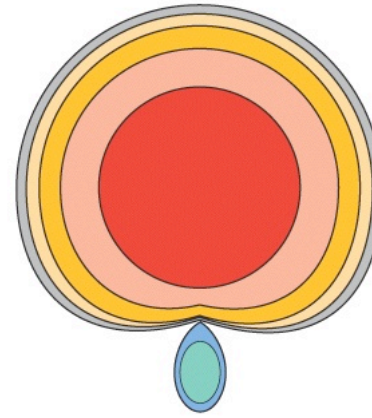
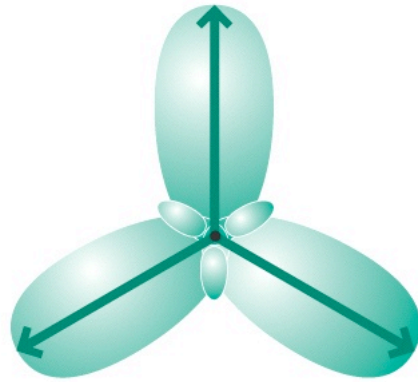
z.B., 1s und 2 p Orbitale, 1s und 1p Orbital oder, falls mehr als 4 Elektronenpaare vorhanden, zusätzlich d-Orbitale!

<i>Anzahl der Hybridorbitale</i>	<i>Geometrie</i>	<i>Hybridtyp</i>
2	linear	sp
3	trigonal planar	sp ²
4	tetraedrisch	sp ³
5	trigonal bipyramidal	sp ³ d
6	oktaedrisch	sp ³ d ²

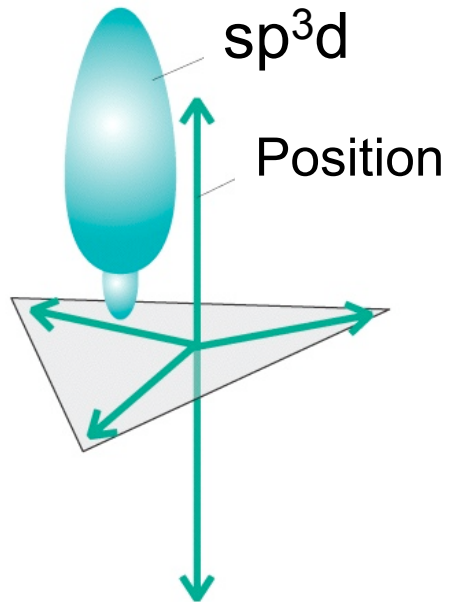
Die Gestalt der Hybridorbitale



sp^2

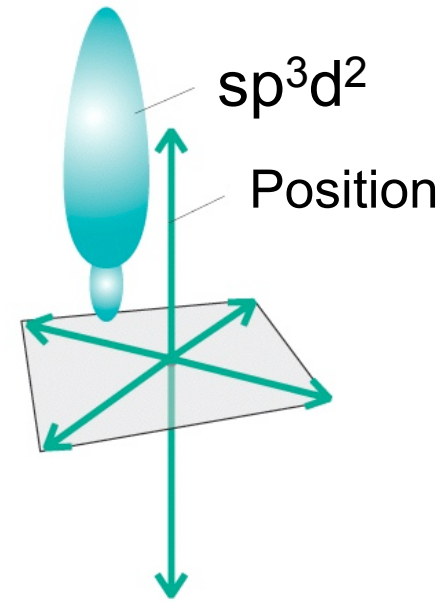


sp



sp^3d

Position

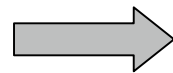
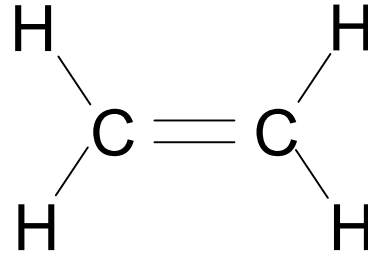


sp^3d^2

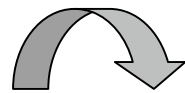
Position

Mehrfachbindungen

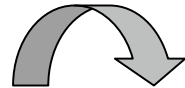
Ethen: C_2H_4



Alle Atome liegen in derselben Ebene und die HCH und CCH Bindungswinkel betragen 120°



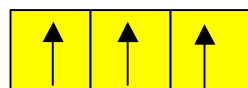
C Atome sp^2 hybridisiert!



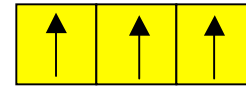
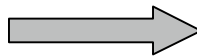
4. Elektron in einem 2p Orbital!



$2s^1$



$2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$

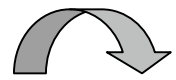


$(sp^2)^1 (sp^2)^1 (sp^2)^1$



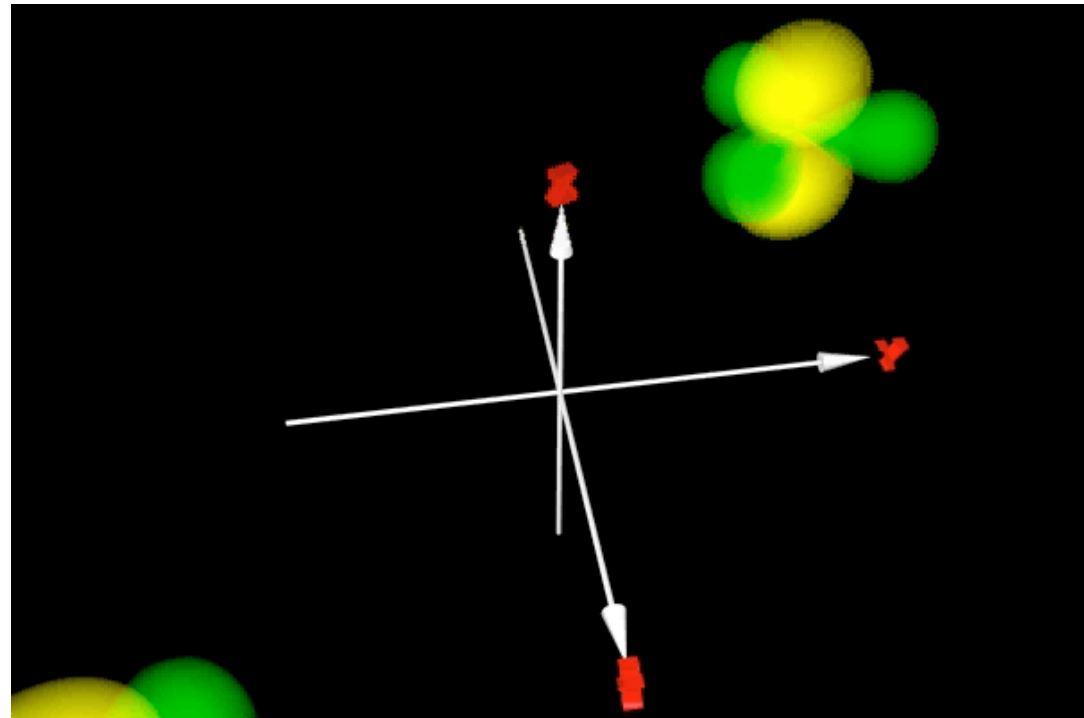
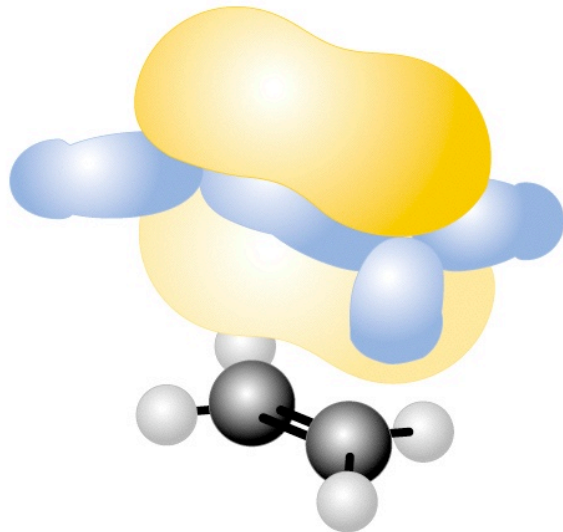
$2p_z^1$

→ $2p_z$ Orbital senkrecht zur Ebene



Bildung einer π -Bindung

C-C Doppelbindung!



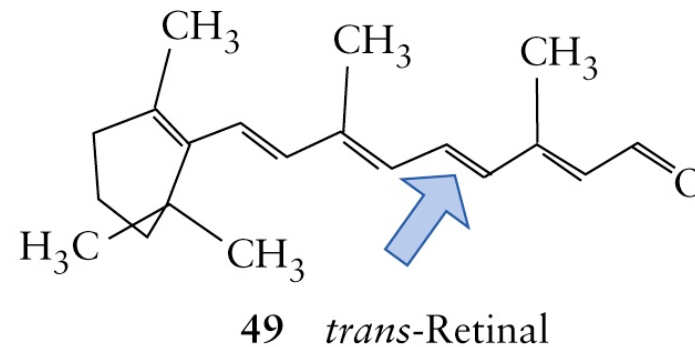
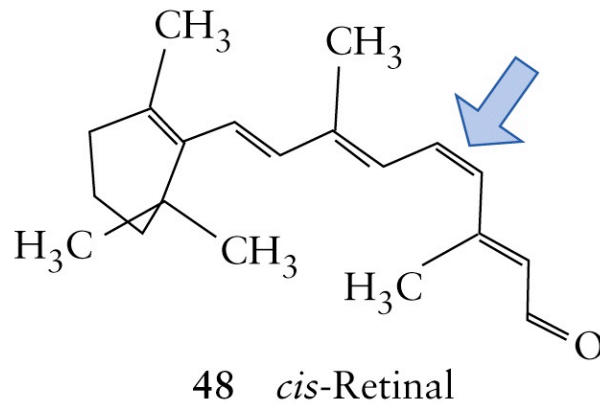
Aehnlich: Acetylen, Benzol!

(Hydride? Molekülgestalt?)

Eigenschaften von Doppelbindungen

↪ in C: π -Bindungen ca. 84 kJ/mol schwächer als σ -Bindung
→ höhere Reaktivität

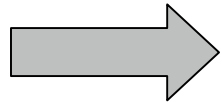
↪ Doppelbindungen sind 'verwindungssteif' (warum?)
→ z.B., Isomerisierung von Retinal



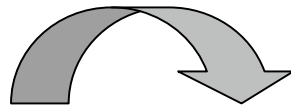
↪ Fehlen von Mehrfachbindungen bei grösseren Atomen
zu gross für effiziente p-Ueberlappung!

Molekülorbitale (MO-Theorie)

Existenz von Elektronenmangelverbindungen wie B_2H_6 ,
Paramagnetismus bei O_2

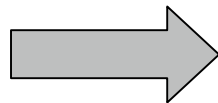


Lewis Formel, VB Beschreibung ???

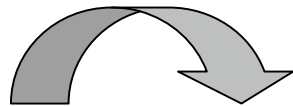


Molekülorbitale

Molekülorbitale sind über alle Atome eines Moleküls 'verteilt'
(nicht auf ein Atom konzentriert) !



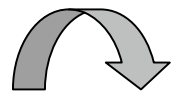
Pauli-Prinzip ist gültig :



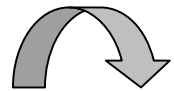
Ein Molekülorbital kann mit maximal 2 Elektronen
besetzt sein!

Zweiatomige Moleküle

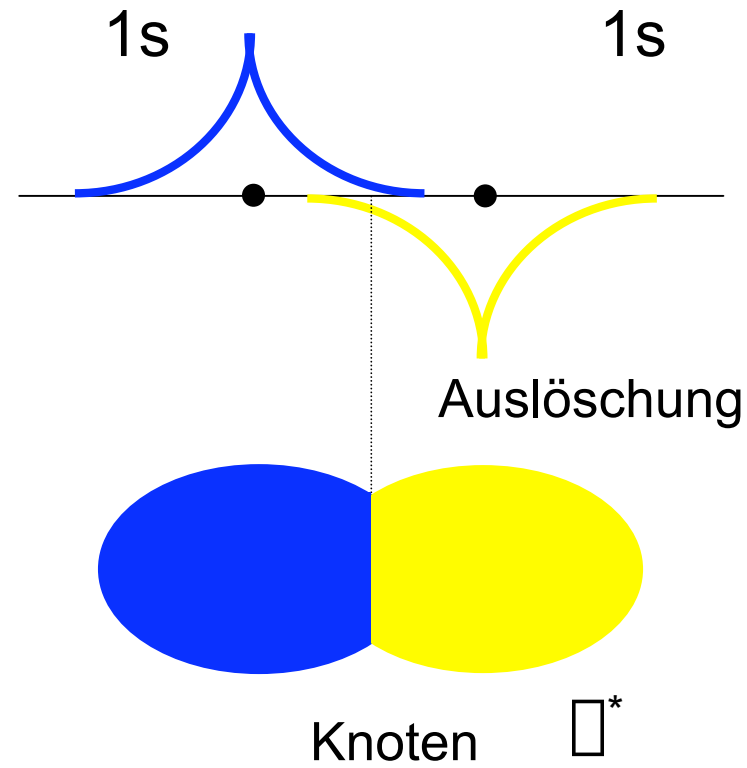
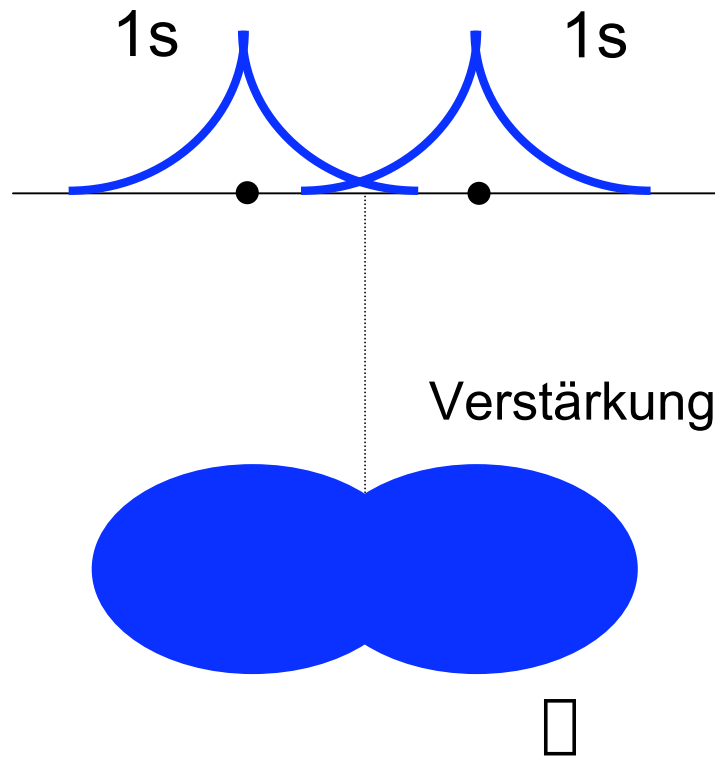
Überlappung 2er Atomorbitale \rightarrow 2 Molekülorbitale



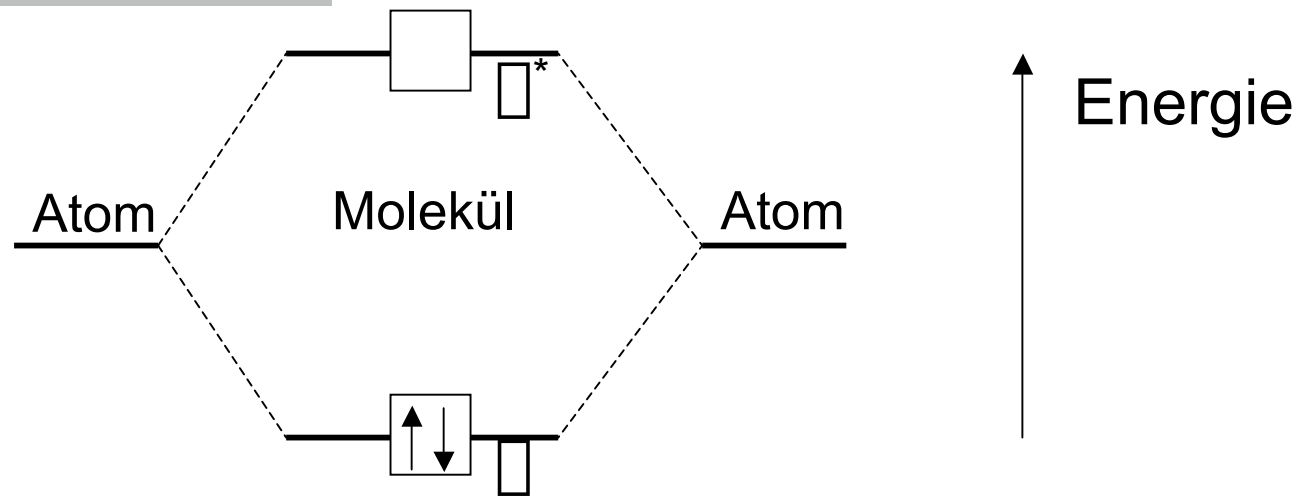
besetzte **bindende Orbitale** erniedrigen die Energie eines Moleküls bezogen auf die isolierten Atome



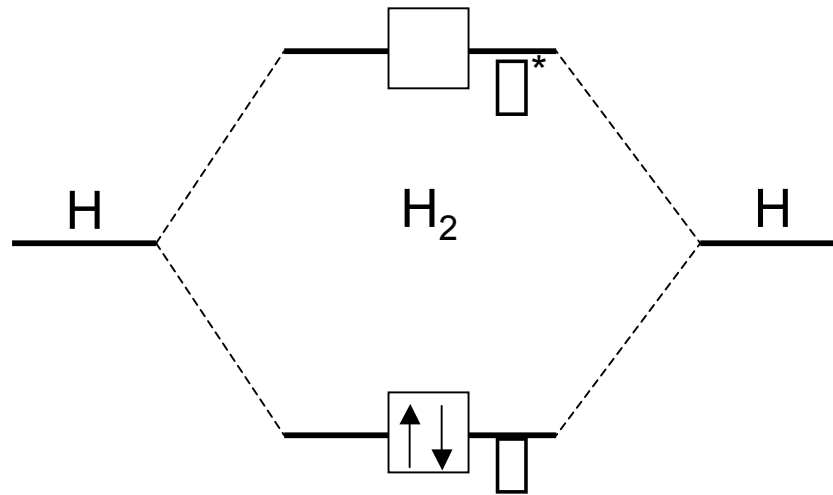
besetzte **antibindende Orbitale** erhöhen die Energie eines Moleküls bezogen auf die isolierten Atome



Energieniveau-Diagramm:

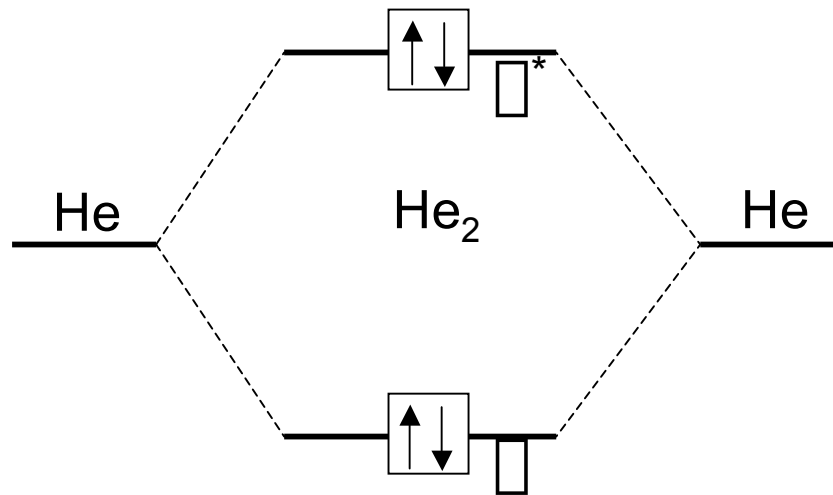


H₂:



Energiegewinn, stabil!

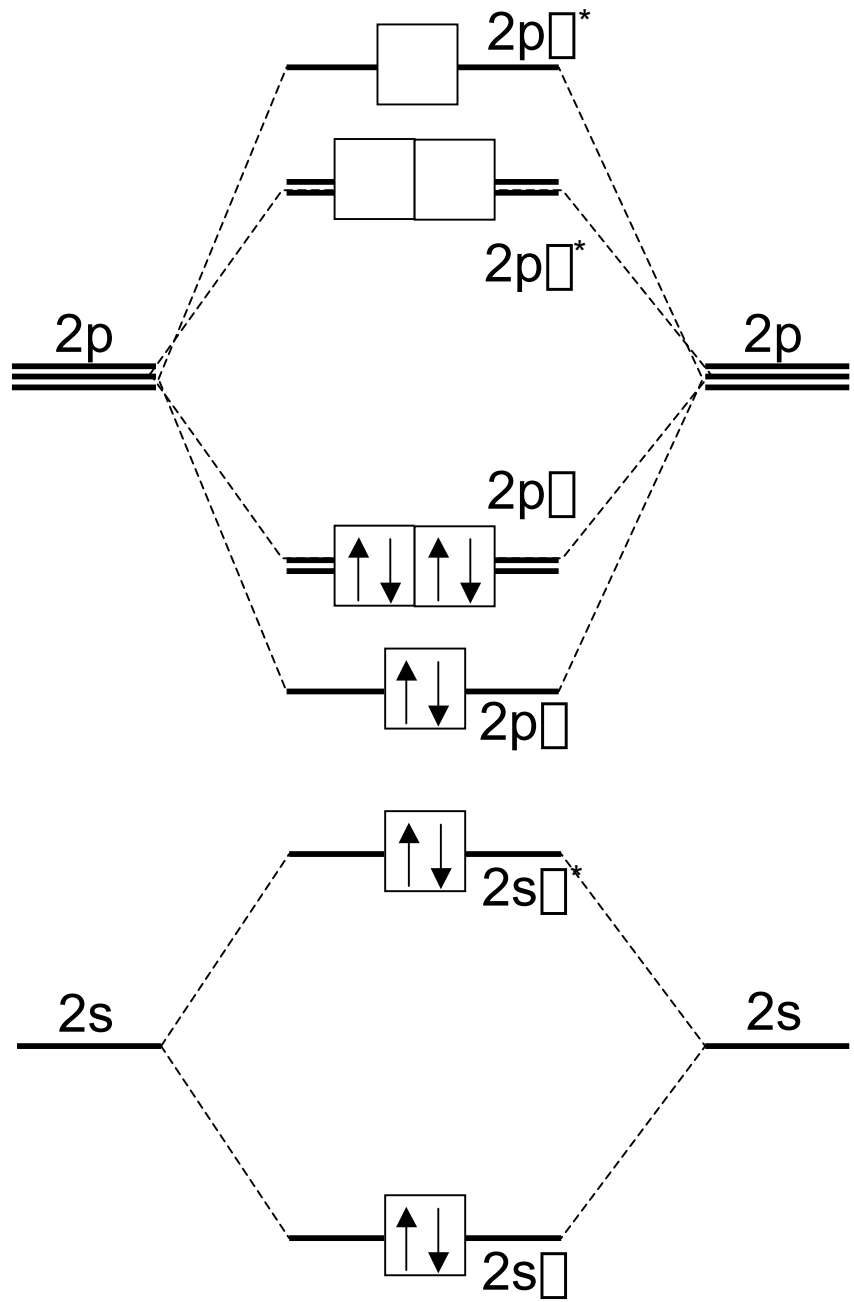
He₂



Kein Energiegewinn, instabil!

N_2

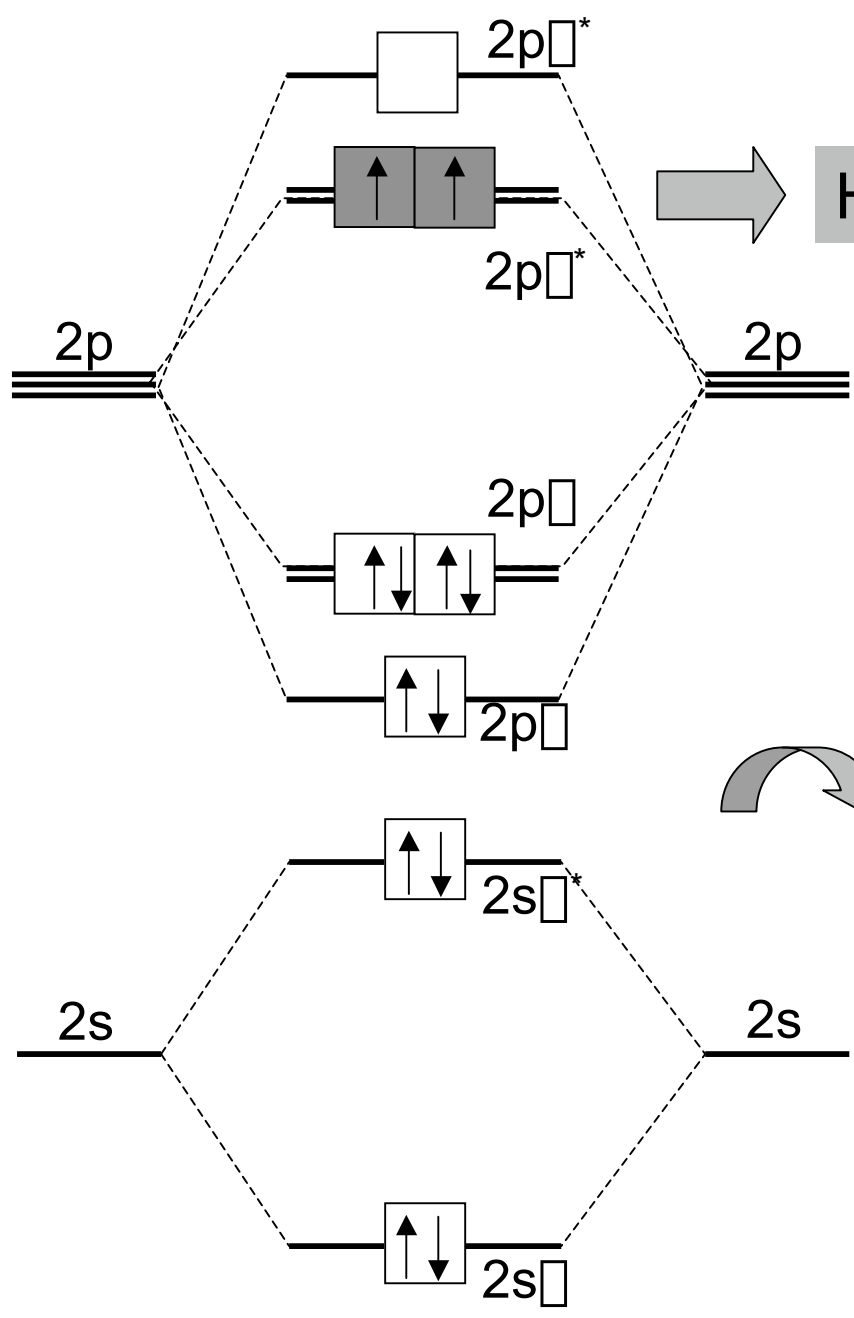
E



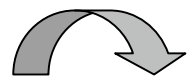
Bindungsordnung:
 $1/2 (B - A)$

O₂

E ↑



Hund'sche Regel !!

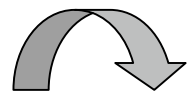


B.O. = 2
und
paramagnetisch!!

Mehratomige Moleküle

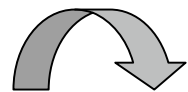
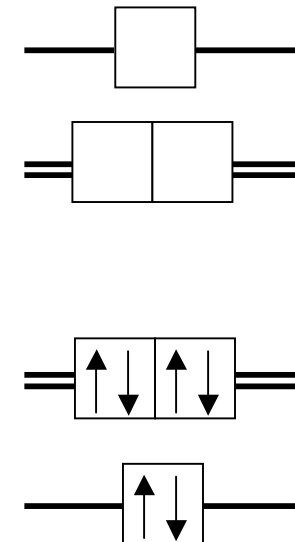
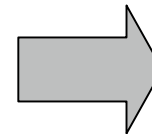
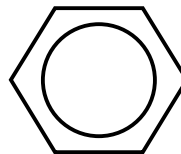
- M.O.s verteilen sich über alle Atome eines Moleküls
- jedes Elektronenpaar in einem bindenden Orbital stabilisiert das ganze Molekül!

→ 'delokalisierte Orbitale'



Benzol (C_6H_6)

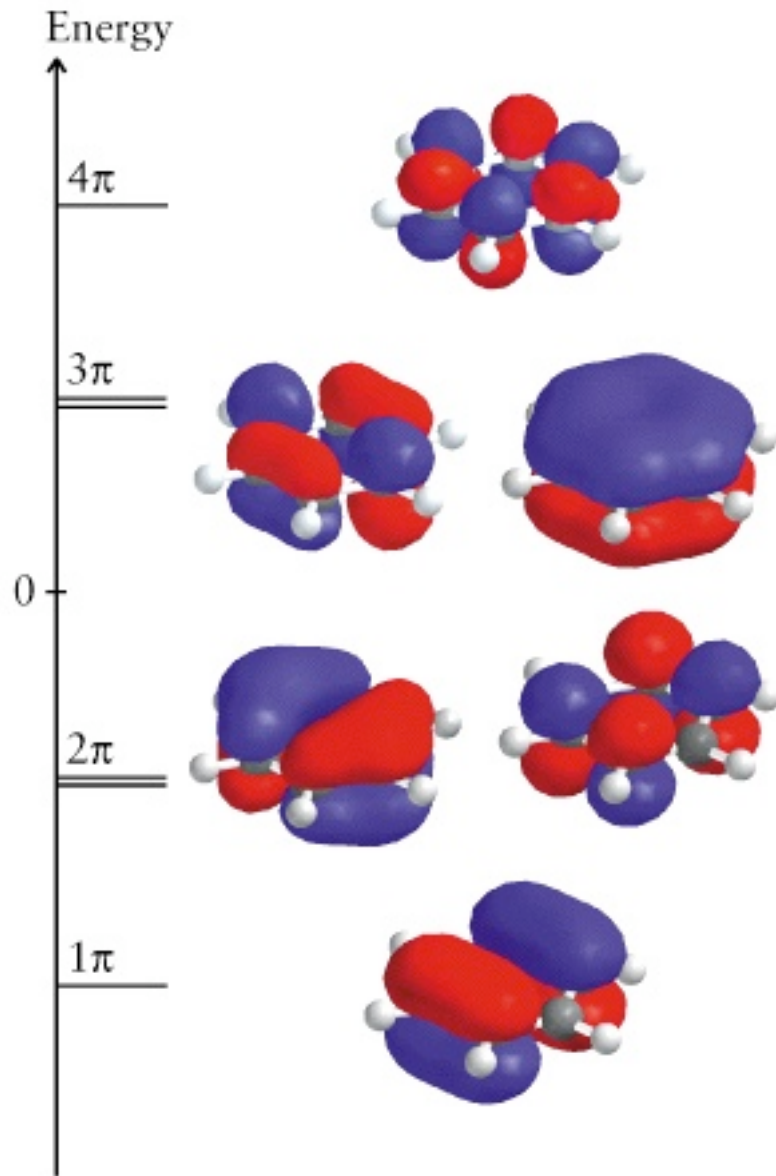
6 delokalisierte π Orbitale



Elektronenmangelverbindungen

(B_2H_6 : 6 Elektronenpaare verbinden 8 Atome!)

Die Molekülorbitale von Benzol



Fehler?

Knotenebenen
↔ Energieinhalt!