

5 Zusammenfassung Chemie - Molekulare Geometrie II

Recap: Atomorbitale (AO) & Valenzbindungstheorie (VB-Theorie)

Es handelt sich dabei um ein Näherungsverfahren zur Beschreibung von Atombindungen, wobei lediglich die Valenzelektronen betrachtet werden. Nach der Valenzbindungstheorie entsteht eine kovalente Bindung durch die Überlappung zweier Atomorbitale. Dabei behalten die Atomorbitale ihre ursprüngliche Form.

Molekülorbitaltheorie (MO-Theorie)

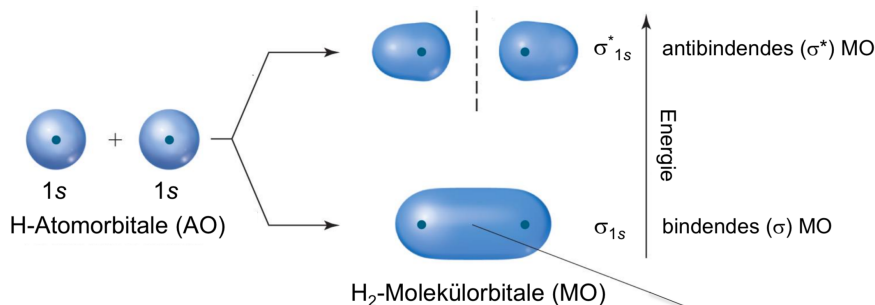
Wir schauen erneut auf die Wechselwirkungen zwischen einzelnen AO's, jedoch verändern diese nun ihre Form. Wir erhalten Molekülorbitale (MO's). Die neu entstandenen Orbitale gehören nun nicht mehr zu einem einzelnen Atom, sondern zum ganzen Molekül.

Bei der Überlappung zweier AO's werden zwei neue MO's gebildet ($\# \text{ AO's} = \# \text{ MO's}$), wobei eine konstruktive sowie destruktive Kombination der beiden AO's möglich ist:

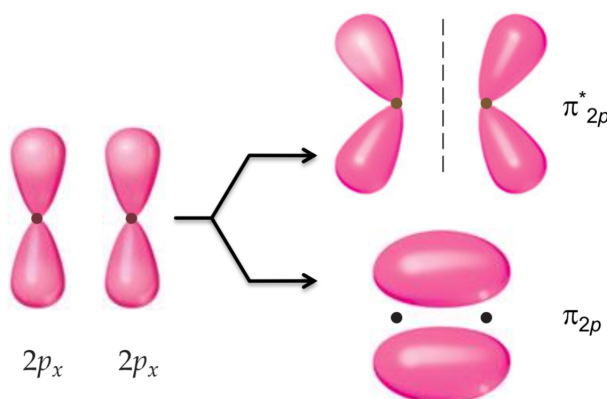
- konstruktive Kombination*: Entstehung eines bindenden MO.
- destruktive Kombination*: Entstehung eines antibindenden MO^a.

Grafische Darstellung der kombinierten AO's:

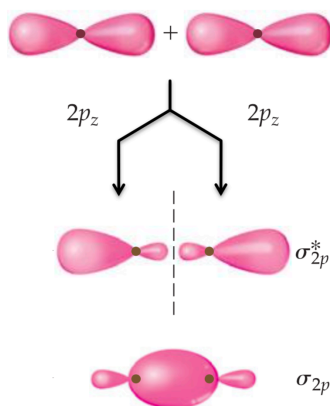
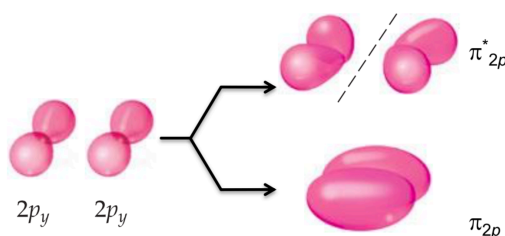
- Kombination zweier s-Schalen:



- Kombination zweier p_x -Schalen:

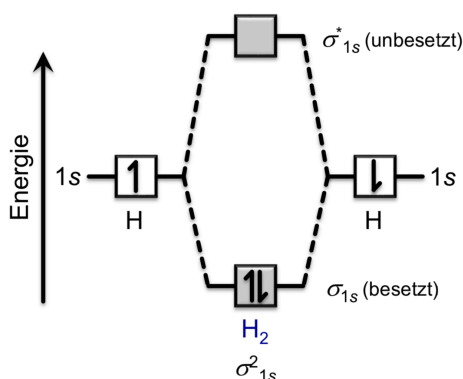


^aAntibindende Orbitale werden mit einem * gekennzeichnet.

3. Kombination zweier p_z -Schalen:4. Kombination zweier p_y -Schalen:

Folgende Regeln sind zu beachten für die Erstellung eines Molekülorbitaldiagramms für diatomische Verbindungen:

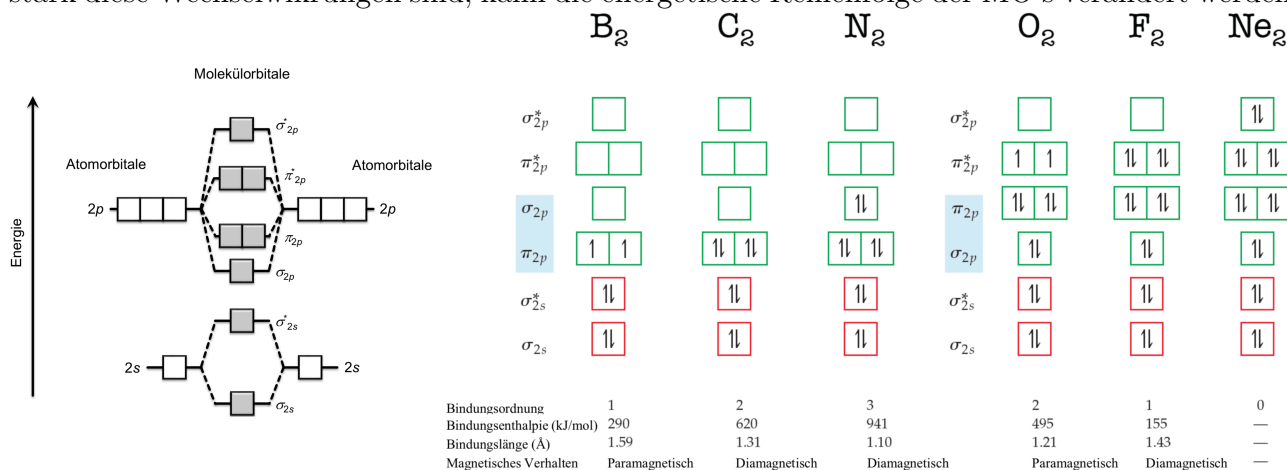
- (1) Die anfängliche Zahl der AO's ist gleich der endgültigen Anzahl der neuen MO's. (Es entstehen genau so viele neue MO's, wie anfänglich AO's existieren.)
- (2) AO's gleicher Energieniveau wechselwirken am effektivsten miteinander. Je besser die Wechselwirkung der AO's, desto niedriger liegt die bindende Kombination der AO's im Energieniveauschema.
- (3) Wie wir bereits wissen: Jedes MO kann mit zwei Elektronen bestzt werden (Aber: Spin-up, Spin-down!).
- (4) Die Befüllung des MO-Diagramms mit Elektronen erfolgt nach den uns bereits bekannten Prinzipien: *Pauli-Prinzip*, *Energetisches Aufbauprinzip* und *Hund'sche Regel*.

MO-Diagramm für H_2 

MO - Von B₂ bis Ne₂

Im folgenden findet ihr das allgemeine Molekülorbitaldiagramm für die biatomaren Atome B₂ bis Ne₂ der zweiten Periode. Wie ihr der Grafik daneben entnehmen könnt, ist dieses Schema nicht für alle biatomaren Moleküle der zweiten Periode gültig.

Wieso ist das so? Es wechselwirken nicht nur Orbitale gleicher Symmetrie miteinander. Hier: Die 2s-Orbitale eines Atoms wechselwirken mit den 2p-Orbitalen des anderen Atoms. Je nachdem wie stark diese Wechselwirkungen sind, kann die energetische Reihenfolge der MO's verändert werden.



Bindungsordnung

Die Bindungsordnung (BO) gibt uns Auskunft über die Stabilität einer Bindung, dabei berechnet sich diese wie folgt:

$$BO = \frac{\# \text{ bindender Elektronen} - \# \text{ antibindender Elektronen}}{2}$$

Nun gilt:

- BO = 1 → Einfachbindung
- BO = 2 → Doppelbindung
- BO = 3 → Dreifachbindung

Elektronenkonfiguration und molekulare Eigenschaft

Je nach Elektronenkonfiguration eines Moleküls, kann ein extern angelegtes Magnetfeld eine anziehende oder abstossende Wirkung auf ein Molekül haben:

- paramagnetisch* - Das Molekül besitzt mindestens ein ungepaartes Elektron.
Ein externes Magnetfeld hat eine anziehende Wirkung auf das Molekül.
- diamagnetisch* - Das Molekül besitzt nur Elektronenpaare → keine ungepaarten Elektronen.
Ein externes Magnetfeld hat eine schwach abstossende Wirkung auf das Molekül.

Die metallische Bindung - Drei Modelle

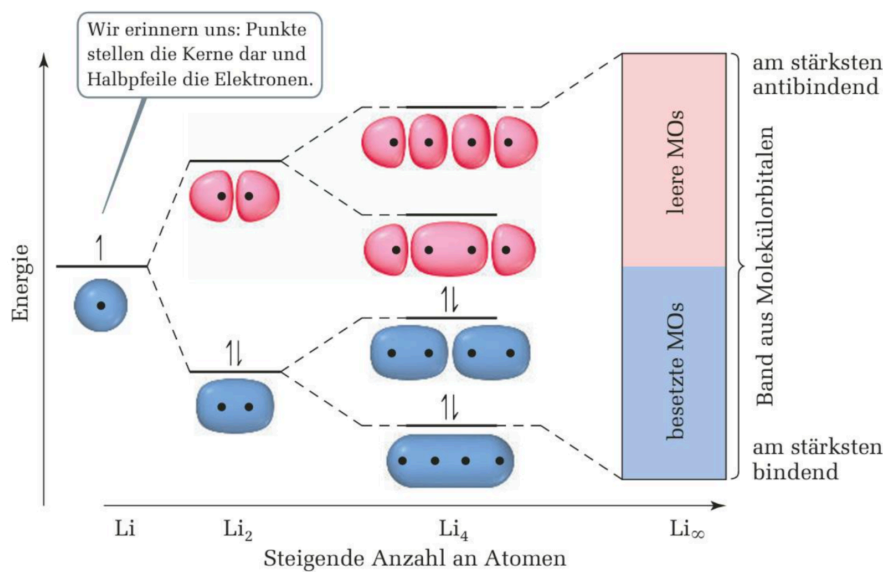
Im Laufe dieser Vorlesung werden die folgenden drei Modelle für eine metallische Bindung besprochen:

1. Elektronengasmodell:

Die Elektronen werden gleichmässig über die regelmässig angeordneten Metallkationen verteilt → erklärt die Strom- und Wärmeleitfähigkeit von Metallen.

2. Molekülorbitalmodell:

Wir nehmen an, dass n Metallatome zur Bildung von n MO's führen. Wenn n sehr gross ist, werden die Unterschiede sehr klein und wir erhalten eine kontinuierliche Energiebande.



3. Elektronenbandstruktur:

Bitte schaut auf die Slides 30 bis 34 aus Vorlesung 5.