

### 3 Zusammenfassung Chemie - Chemische Bindung

Allgemein gilt: An einer chemischen Reaktion sind lediglich Elektronen der äussersten Schale eines Atoms beteiligt - die sogenannten *Valenzelektronen*.

#### Lewis-Formel und Oktettregel

Definition der **Oktettregel**:

Atome tendieren dazu Elektronen entweder abzugeben, aufzunehmen oder zu teilen, so dass sie von acht Valenzelektronen umgeben sind.

Grund: Erreichen der Edelgaskonfiguration (*Elektronoktett*)  
 → vollbesetzte *s*- und *p*-Schalen.

#### Lewis-Formel

Eine *Lewis-Formel* kann dazu verwendet werden die Valenzelektronen eines Atoms darzustellen. Dabei gilt:

- (1) • - Ein einzelnes Elektron wird mit der Hilfe eines Punkts dargestellt.
- (2) I - Elektronenpaare werden mittels eines Strich dargestellt.
- (3) Es werden bindende sowie nicht-bindende Valenzelektronen gezeigt.

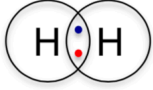
Bsp:

| Gruppe | Element | Elektronen-konfiguration | Lewis-Symbol | Element | Elektronen-konfiguration | Lewis-Symbol |
|--------|---------|--------------------------|--------------|---------|--------------------------|--------------|
| 1A     | Li      | [He]2s <sup>1</sup>      | Li•          | Na      | [Ne]3s <sup>1</sup>      | Na•          |
| 2A     | Be      | [He]2s <sup>2</sup>      | •Be•         | Mg      | [Ne]3s <sup>2</sup>      | •Mg•         |

$\text{H} \cdot + \cdot \text{H}$

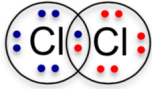
→



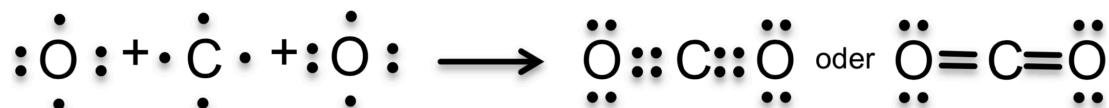
  

$\cdot \ddot{\text{Cl}} \cdot + \cdot \ddot{\text{Cl}} \cdot$

→



- (4) Darstellung von Mehrfachbindungen:

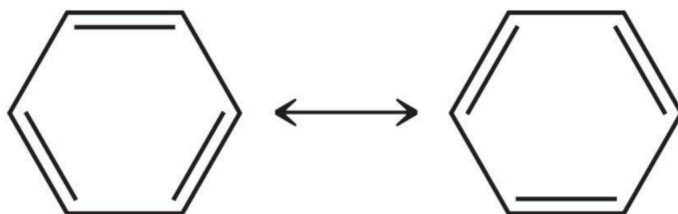


- (5) Resonanz:

Def.: Resonanz liegt vor, wenn sich ein Molekül durch mehrer gleichwertige Lewis-Strukturen darstellen lässt - diese Lewis-Strukturen werden auch *Resonanzstrukturen* genannt. Dies bedeutet, dass eine einzelne Lewis Struktur nur einen Teil der wirklichen

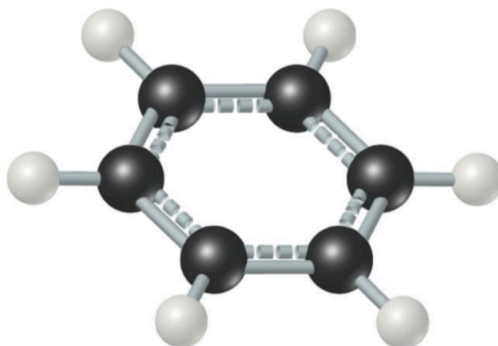
Struktur wiedergibt und die Realität durch eine Vermischung aller Resonanzstrukturen dargestellt werden muss.

Bedeutung: Schauen wir uns Benzol an



Eine einzelne Lewis-Formel gibt wieder, dass dieses Molekül drei Zweifachbindungen sowie drei Einfachbindungen besitzt. Nun ist eine Einfachbindung länger als eine Zweifachbindung. Misst man nun die einzelnen Abstände der Kohlenstoffatome innerhalb eines Benzolmoleküls fällt jedoch auf, dass alle Abstände gleich gross sind. Dazu liegen die gemessenen Abstände zwischen der Länge einer Einfachbindung und der einer Doppelbindung.

Was bedeutet das nun? In der Realität sind die Doppelbindungen nicht lokalisiert an einem festen Punkt innerhalb des Moleküls, sondern bewegen sich über den Benzolring - man spricht von delokalisierten Doppelbindungen. Die gestrichelten Linien in der folgenden Darstellung spiegeln diese Delokalisierung wieder - dies ist keine Darstellung in der Lewis-Formel:



### Ausnahmen zur Oktettregel:

- (1) Moleküle und polyatomare Ionen mit einer ungeraden Anzahl an Elektronen (Bsp.: NO).
- (2) Moleküle und polyatomare Ionen, in welchen ein Atom weniger als acht Valenzelektronen besitzt (Bsp.:  $\text{BF}_3$ ).
- (3) Moleküle und polyatomare Ionen in welchen ein Atom mehr als acht Valenzelektronen besitzt (Bsp.:  $\text{PF}_5$ ).

Bemerkung: Es gibt Resonanzstrukturen, in denen Formalladungen<sup>a</sup> auftauchen. Dabei gilt jedoch, dass jene Resonanzstrukturen am stabilsten sind, welche die wenigsten Formalladungen besitzen.

<sup>a</sup>Formalladung = Anzahl der Valenzelektronen des Atoms - Zugewiesene Elektronenzahl in der Struktur

## Arten chemischer Bindungen

### Kovalente Bindungen

Definition *kovalente Bindung*

Kovalente Bindungen entstehen dann, wenn sich Atome Elektronen teilen.  
Grund: Die Edelgaskonfiguration kann dadurch erreicht werden (Oktettregel).

**Bindungsenthalpien** - ein Mass für die Stärke von kovalenten Bindungen:

Definition Bindungsenthalpie:

Die Bindungsenthalpie ist immer positive und entspricht dem Energiebetrag der aufgebracht werden muss, um eine chemische Bindung zu brechen.

→ Die Bildung chemischer Bindungen ist ein exothermer Prozess.

→ Das Aufbrechen chemischer Bindungen ist ein endothermer Prozess.

**Reaktionsenthalpie  $\Delta H_{\text{rxn}}$**  - endothermer<sup>b</sup> oder exothermer<sup>c</sup> Prozess?

Definition Reaktionsenthalpie:

Die Reaktionsenthalpie ist die Summer der Bindungsenthalpien von gebrochenen Bindungen minus die Summe der Bindungsenthalpien von neu gebildeten Bindungen:

$$\Delta H_{\text{rxn}} = H_{\text{Edukte}} - H_{\text{Produkte}}$$

→  $\Delta H_{\text{rxn}} > 0$  - endothermer Prozess

→  $\Delta H_{\text{rxn}} < 0$  - exothermer Prozess

Bemerkung: Bei der aufgezeigten Methode zur Berechnung der Reaktionsenthalpie handelt es sich um eine Näherung welche strikt genommen lediglich für Reaktionen in der Gasphase anwendbar ist.

**Bindungslängen** - nehmen ab mit steigender Bindungszahl (s. Tab - Vorlesung 3/ Slide 65)

### Ionische Bindung

Definition *Ionenbindung*:

Entsteht durch Anziehungskräfte entgegengestzt geladener Ionen und Abstossungskräfte gleichartig geladener Ionen. Dabei gibt einer der Bindungspartner ein Elektron ab, wohingegen der andere Bindungspartner dieses aufnimmt - ebenfalls mit dem Ziel die Edelgaskonfiguration zu erreichen.

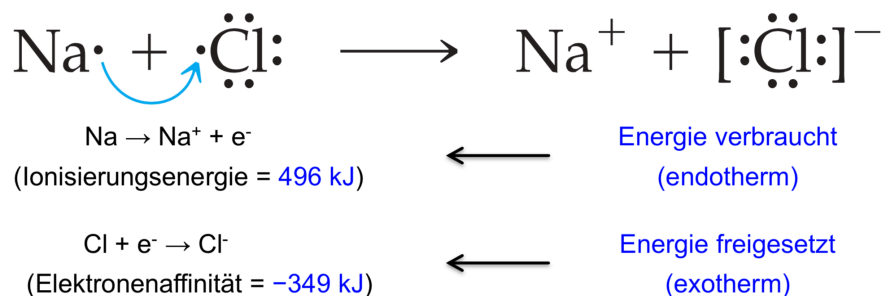
Bsp: Ionenbindungen treten bei Verbindungen zwischen (Erd)Alkalimetallen und Halogenen auf (NaCl, LiCl,...).

<sup>b</sup>Man spricht von einer *endothermen Reaktion*, wenn das stoffliche System Energie in Form von Wärme aus der Umgebung aufnimmt.

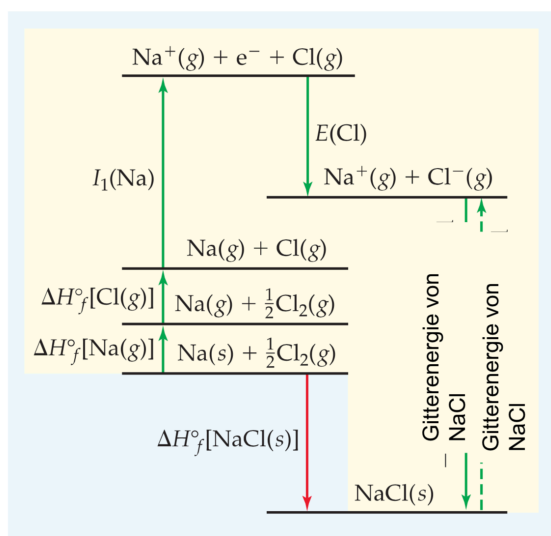
<sup>c</sup>Man spricht von einer *exothermen Reaktion*, wenn das stoffliche System Energie in Form von Wärme an die Umgebung abgibt.

## Gitterenergie

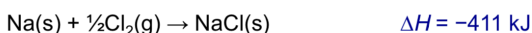
Wenn wir uns die Reaktionsenthalpie ohne die Berücksichtigung der Gitterenergie anschauen, müssten wir zu dem Schluss kommen, dass es sich bei der Bildung von Natriumchlorid um einen endothermen Prozess handeln muss<sup>d</sup>. Dem ist jedoch nicht so, die



Bildung von NaCl ist ein stark exothermer Prozess. Wie kann das sein? Die Energie, die durch die elektrostatischen Anziehungen freigesetzt wird ist grösser, als die endotherme Ionisierungsenergie. → Die Gitterenergie ist ein Mass für die Stabilisierung die erreicht wird, wenn sich Ionen in einem Kristallgitter anordnen. Diese kann mit der Hilfe des *Born-Haber Kreisprozesses* ermittelt werden:



### Direkter Weg:



### Indirekter Weg:

1. Verdampfen  $\text{Na(s)} \rightarrow \text{Na(g)}$   $\Delta H = 108 \text{ kJ}$
2. Bildung von  $\text{Cl(g)}$  aus  $\text{Cl}_2(\text{g})$   $\Delta H = 122 \text{ kJ}$
3. Ionisierung  $\text{Na(g)} \rightarrow \text{Na}^+(\text{g})$   $\Delta H = 496 \text{ kJ}$
4. Aufnahme eines  $\text{e}^-$   $\text{Cl(g)} \rightarrow \text{Cl}^-(\text{g})$   $\Delta H = -349 \text{ kJ}$
5. Verbindung von  $\text{Na}^+(\text{g})$  &  $\text{Cl}^-(\text{g})$   $\Delta H_{\text{Gitter}} = ??? \text{ kJ}$

Und somit:

$$\Delta H_{\text{Gitter}} = 411 + 108 + 122 + 496 - 349 = 788 \text{ kJ}$$

## Polarität von chemischen Bindungen

Definition *Polarität*:

Mass dafür, wie gleichmässig Elektronen in einer chemischen Bindung geteilt werden. Polarität kann mit Hilfe des *Dipolmoments*  $\mu$  quantifiziert werden. Dipole entstehen, da sich die Elektronendichte innerhalb eines Moleküls zu Atomen mit grösseren Elektronegativitäten verschieben.

<sup>d</sup> $\Delta H_{\text{rxn}} = \text{Ionisierungsenergie} + \text{Elektronenaffinität} = 496 \text{ kJ mol}^{-1} - 349 \text{ kJ mol}^{-1} = 147 \text{ kJ mol}^{-1}$

Definition *Elektronegativität*:

Mass für die Fähigkeit eines Atoms in einem Molekül Elektronen anzuziehen.

Bemerkung zum PSE: Die Elektronegativität nimmt innerhalb einer Periode von links nach rechts zu, sowie in einer Gruppe von unten nach oben. Je grösser die Elektronegativität eines Atoms, desto stärker zieht dieses Elektronen an.

Mit Hilfe der Elektronegativität kann die Polarität einer chemischen Bindung charakterisiert werden. Dafür wird die Elektronegativitätsdifferenz  $\Delta EN$  zwischen den Atomen berechnet. Dabei gilt, je grösser  $\Delta EN$ , desto polarer ist die Bindung. Je nach  $\Delta EN$  kann eine Bindung charakterisiert werden:

| $\Delta EN$             | <i>Charakterisierung der Bindung</i> |
|-------------------------|--------------------------------------|
| $0 < \Delta EN < 0.5$   | unpolare Bindung                     |
| $0.5 < \Delta EN < 1.7$ | polare Bindung                       |
| $\Delta EN > 2.0$       | ionische Bindung                     |