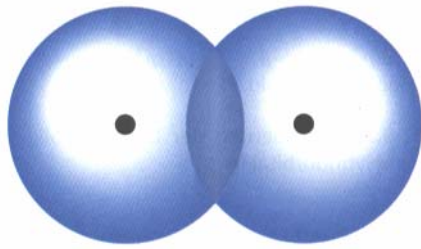


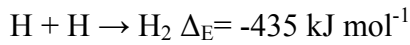
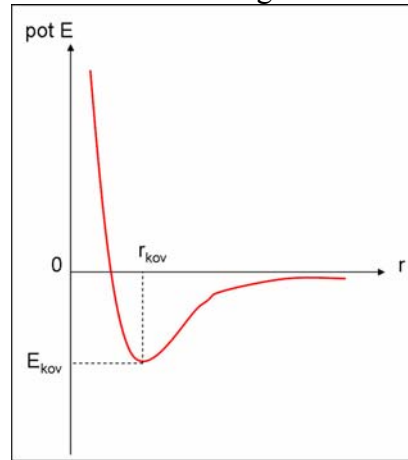
Kovalente Bindungen, Molekülstrukturen, Elektronegativität (EN), VSEPR, Quantenchemie

Kovalente Bindungen:



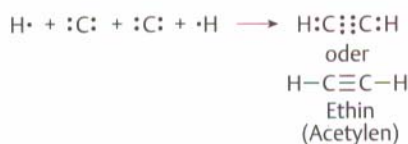
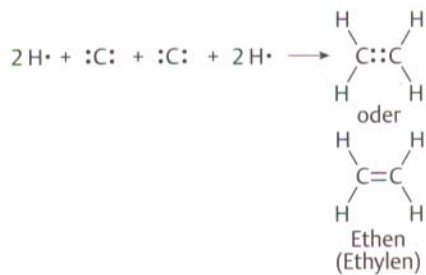
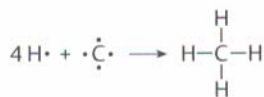
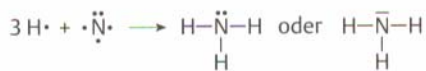
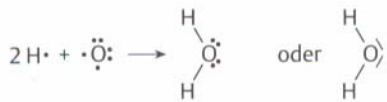
9.6 Überlappung der 1s-Orbitale von zwei Wasserstoff-Atomen

- doppelte Kernladung
- elektrostatische Entschirmung der Kernladung



⇒ Dissoziationsenergie (positiv) [Umkehrung der Molekülbildung]

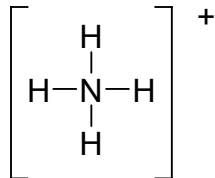
Lewis-Strukturen (Valenzstrichformeln)



Definition: Elektronegativität (EN): Fähigkeit eines Atoms in einem Molekül, die Elektronen in der Bindung an sich zu ziehen.

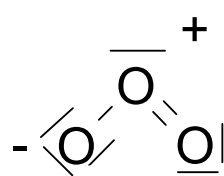
Übersicht EN → Mortimer

Definition: Formalladung = Anzahl der Valenzelektronen im freien Atom – der Anzahl der Valenzelektronen im gebundenen Atom = Anzahl der Valenzelektronen im freien Atom – $\frac{1}{2}$ Anzahl bindender Elektronen – Anzahl nichtbindender Elektronen



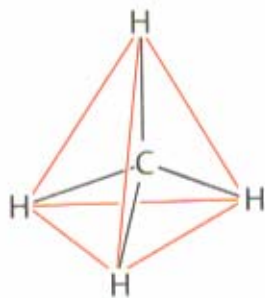
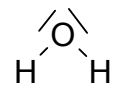
Ammoniumkation

Ozon-Molekül:

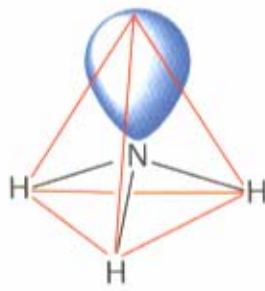


$$\begin{aligned} \text{O}_1: & 6 - \frac{1}{2}(2) - 6 = -1 \\ \text{O}_2: & 6 - \frac{1}{2}(6) - 2 = +1 \\ \text{O}_3: & 6 - \frac{1}{2}(4) - 4 = 0 \end{aligned}$$

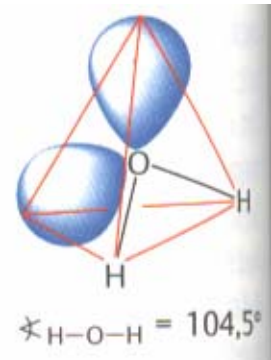
VSEPR-Modell: valence-shell-electron-pair-repulsion



$$\angle_{\text{H-C-H}} = 109,47^\circ$$



$$\angle_{\text{H-N-H}} = 107,3^\circ$$



$$\angle_{\text{H-O-H}} = 104,5^\circ$$

CH₄ tetraedrische Struktur

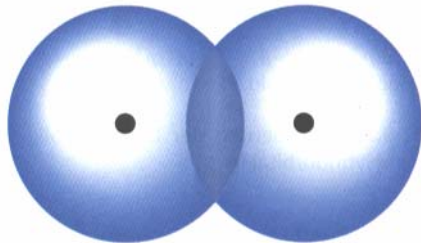
PF₅ Trigonalbipyramide

Quantenchemische Modelle:

Valence Bond (VB)-Verfahren

VB: Bindungen entstehen, wenn ein einfach besetztes Valenzorbital mit einem anderen überlappt.

⇒ Spinpaarung, doppeltes Kernfeld, abgeschirmte Kerne



9.6 Überlappung der 1s-Orbitale von zwei Wasserstoff-Atomen

Stärke der Bindung = f(Überlapp)

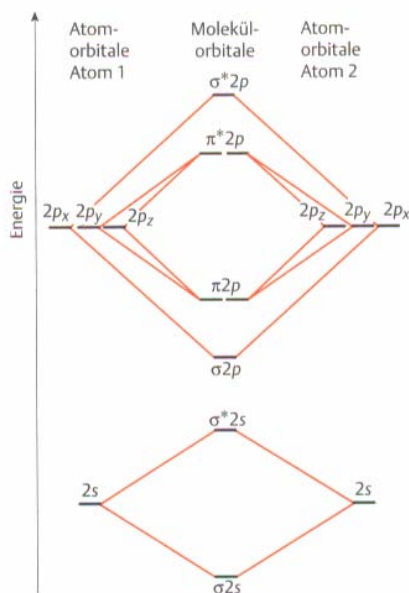


c hybridisierung

Molekülorbitaltheorie

Atomorbital (AO): Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein Elektron im Atom.
„Bahnfunktion“ ohne genaue Bahn, elektronische Wellenfunktion

Molekülorbital (MO): Lösung der Schrödinger-Gleichung für Elektronen im Molekül ⇒
elektronische Wellenfunktion; Betragsquadrat →
Aufenthaltswahrscheinlichkeit



9.14 Entstehung der Abfolge der Energieniveaus für die Moleküle O₂ und F₂ aus den Atomorbitalen

MOs ergeben sich durch lineare Kombination von AOs
(plus/minus – Kombination)