

Hybridisierung und VSEPR-Modell

Um die Geometrie von mehratomigen Molekülen beschreiben zu können, bedarf es des Modells der sog. „Hybridisierung“. Was ist das?

Aus der griechischen Mythologie stammt der Begriff „Hybrid“. Dort sind damit Tierkörper mit Menschentorso, -armen und -kopf, also z.B. ein Kentaur, gemeint. Allgemein ist ein Hybrid eine Kreuzung aus zwei verschiedenen Wesen oder Dingen. Ein Hybridantrieb beim Auto ist z.B. ein Fahrzeugmotor, der mit Benzin und Erdgas betrieben werden kann. Was hat das mit Orbitalen zu tun?

Um eine Bindung zwischen zwei Atomen zu knüpfen, haben wir je ein Atomorbital der Atome zu zwei Molekülorbitalen, nämlich dem bindenden und dem antibindenden MO, addiert (linearkombiniert).

Das Gleiche machen wir jetzt mit den Atomorbitalen innerhalb eines Atoms. Es gibt verschiedene Möglichkeiten:

1. Wir addieren 1 s-Orbital und 3 p-Orbitale: 4 sp^3 -Hybridorbitale, 0 p-Orbitale übrig
2. Wir addieren 1 s-Orbital und 2 p-Orbitale: 3 sp^2 -Hybridorbitale, 1 p-Orbital übrig
3. Wir addieren 1 s-Orbital und 1 p-Orbitale: 2 sp -Hybridorbitale, 2 p-Orbitale übrig

Auch hier bleibt die Anzahl der Orbitale vor und nach der Linearkombination gleich!

Wie sehen denn nun diese Hybridorbitale aus? Das hängt davon ab, ob es sich um ein sp^3 -, sp^2 - oder ein sp -Hybridorbital handelt:

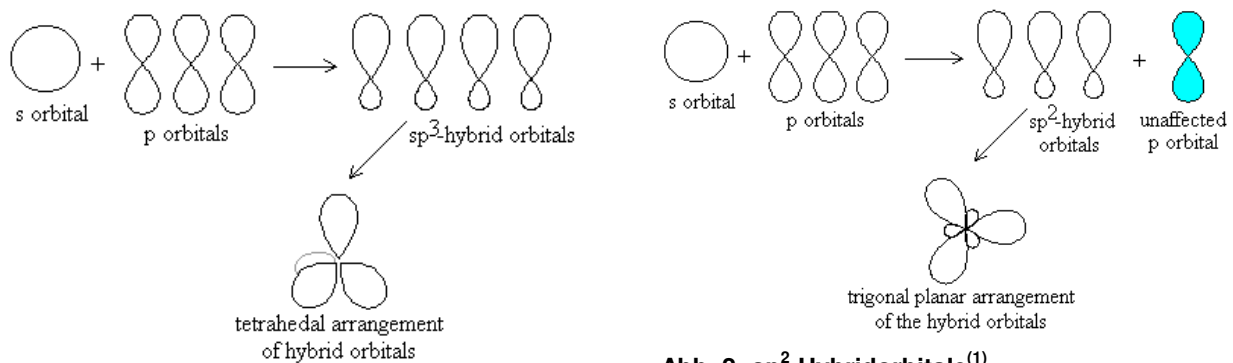


Abb. 1: sp^3 -Hybridorbitale⁽¹⁾

Abb. 2: sp^2 -Hybridorbitale⁽¹⁾

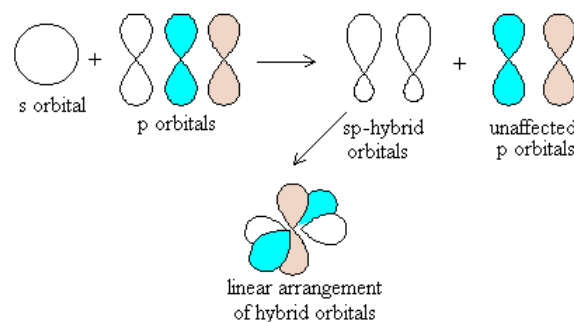


Abb. 3: sp -Hybridorbitale⁽¹⁾

Mit Hilfe des VSEPR-Modells (VSEPR = „Valence Shell Electron Pair Repulsion“, also „Valenzschalen-Elektronenpaar-Abstoßung“) können wir die Geometrie erklären.

Die Orbitale sind so angeordnet, daß sie einen möglichst großen Abstand voneinander haben:

- Bei sp^3 -Hybridorbitalen ist dieser Zustand der Tetraeder (Abb. 1).
- Bei sp^2 -Hybridorbitalen ist dieser Zustand das ebene Dreiein (trigonal-planar). Das unbeteiligte p-Orbital steht senkrecht auf der Dreiecksfläche (Abb. 2).
- Bei sp -Hybridorbitalen ist dieser Zustand linear. Die beiden unbeteiligten p-Orbitale stehen jeweils senkrecht zu dieser Geraden und zueinander (Abb. 3).

Aus diesen Hybridorbitalen können nun wieder wie gewohnt Molekülorbitale gebildet werden:

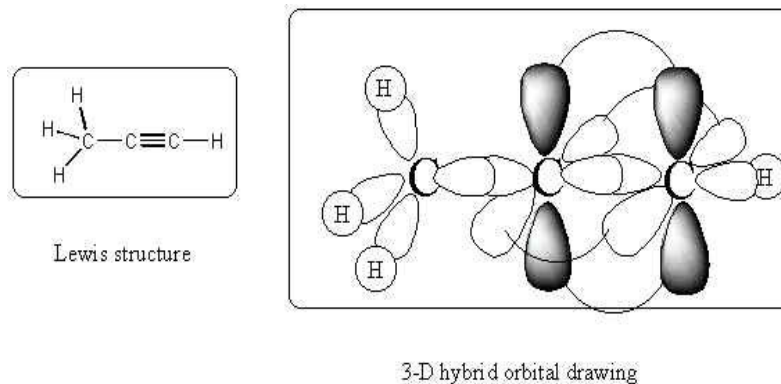


Abb. 4: Die Bindungen im 1-Propin⁽²⁾

Ionische Bindung

Neben der kovalenten Bindung ist die ionische Bindung die andere fundamentale Bindungsart. Während bei der (reinen) kovalenten Bindung die Elektronen gleichmäßig auf beide Atome verteilt sind, hat bei der ionischen Bindung das eine Atom ein oder mehrere Elektronen von anderen Atom übernommen. Das nehmende Atom ist dann negativ geladen, es wird zum Anion, das gebende Atom trägt eine (oder mehrere) positive Ladungen und wird zum Kation. Anion und Kation werden durch die elektrostatische Anziehung (beschrieben durch das Coulomb-Gesetz) aneinander gehalten.

Was ist das Kriterium, das entscheidet, ob eine kovalente oder ionische Bindung ausgebildet wird? Die Antwort lautet: Die Differenz in der Elektronegativität (EN).

Die Elektronegativität eines Atoms ist ein Maß für seine Neigung Elektronen anzuziehen. Fluor ist mit einer EN von 4 das Element mit der höchsten EN. Die EN nimmt im Periodensystem nach links und nach unten ab, d.h. das Element, das links unten in der Ecke steht, hat die geringste EN. Dies ist Cs mit einer EN von 0,7.

H = 2.1	x	x	x	x	x	x
Li = 1.0	Be = 1.5	B = 2.0	C = 2.5	N = 3.0	O = 3.5	F = 4.0
Na = 0.9	Mg = 1.2	Al = 1.5	Si = 1.8	P = 2.1	S = 2.5	Cl = 3.0
K = 0.8	Ca = 1.0	Ga = 1.6	Ge = 1.8	As = 2.0	Se = 2.4	Br = 2.8
Rb = 0.8	Sr = 1.0	In = 1.7	Sn = 1.8	Sb = 1.9	Te = 2.1	I = 2.5
Cs = 0.7	Ba = 0.9	Tl = 1.8	Pb = 1.9	Bi = 1.9	Po = 2.0	At = 2.2

Tab. 1: Elektronegativität einiger Elemente⁽³⁾

Ist die Differenz der Elektronegativitäten gleich Null oder sehr klein, dann liegt eine reine kovalente Bindung vor. Dies ist nur bei Bindungen zwischen zwei Atomen eines Elementes der Fall (H_2 , N_2 , etc.).

Ist die Differenz der Elektronegativitäten größer als 1,7 (diese Grenze ist ein bißchen willkürlich, andere Angaben findet man auch), dann liegt eine ionische Bindung vor.

Bei allen Werten dazwischen liegt eine mehr oder weniger polarisierte Bindung vor. Hier sind die Elektronen nicht gleichmäßig auf beide Atome verteilt, sondern halten sich mehr in der Nähe des Elementes auf, daß die höhere EN hat.

Bindung	EN-Differenz	Negatives Atom	Art der Bindung
H - H	0,0	-/-	rein kovalent
C - H	0,4	C	(schwach) polar kovalent
O - H	1,4	O	polar kovalent
H - F	1,9	F	polar kovalent
S - O	1,0	O	polar kovalent
C - O	1,0	O	polar kovalent
Al - C	1,0	C	polar kovalent
Na - Cl	2,1	Cl	ionisch
Mg - O	2,3	O	ionisch
Li - F	3,0	F	ionisch
Mg - C	1,3	C	polar kovalent

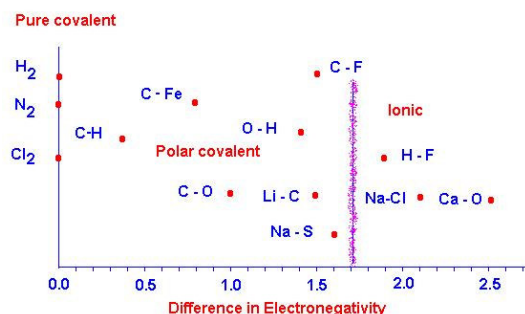


Abb. 5: Bindungstypen in Abhängigkeit von der EN-Differenz⁽³⁾

Man erkennt den Unterschied zwischen kovalenter und ionischer Bindung auch sehr gut in den sog. Konturenplots (eine Art Höhenlinienzeichnung der Elektronendichte):

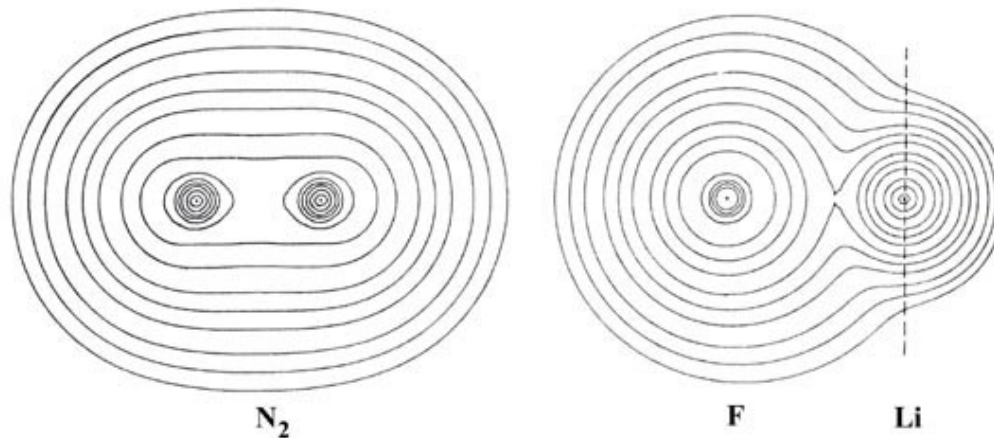


Abb. 6: Konturenplots von N₂ und LiF⁽⁴⁾

Des Weiteren läßt sich die Frage, ob eine kovalente oder eine ionische Bindung gebildet wird, auch mit Hilfe der Oktettregel beantworten:

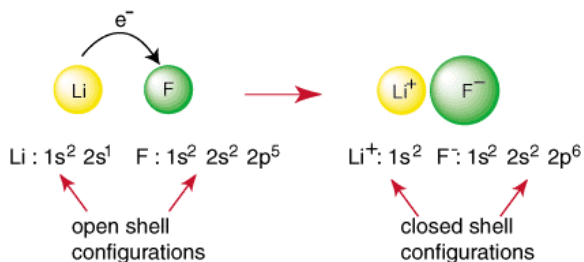


Abb. 7: Die Elektronenkonfiguration von LiF⁽⁵⁾

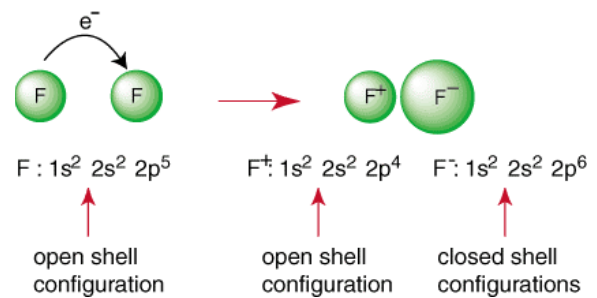


Abb. 8: Die Elektronenkonfiguration von F₂⁽⁵⁾

Man sieht, daß die Bildung einer ionischen Bindung zwischen zwei Fluoratomen keinen Sinn macht, weil der gewünschte Zustand, also die abgeschlossene Schale, nicht von beiden Fluoratomen erreicht wird. Hier ist es sinnvoller, die Elektronen zu „teilen“.

Quellen

1. falcon.sbuniv.edu
2. www.chem.orst.edu
3. www.chem.uidaho.edu
4. www.chemistry.mcmaster.ca
5. www.sparknotes.com