

Grundlagen der Chemie

Die Atombindung – Kovalente Bindungen

Prof. Annie Powell

Institut für Anorganische Chemie – Grundlagen der Chemie



Kovalente Bindungen

- In einem Molekül werden die Atome durch kovalente Bindungen zusammengehalten.
- Eine kovalente **Einfachbindung** besteht aus einem Paar von Elektronen, das zwei Atomen gemeinsam angehört.

Beispiel: H₂

- Jedes Wasserstoff-Atom hat ein Elektron, das symmetrisch um den Atomkern auf ein 1s-Orbital verteilt ist. Zwei H-Atome kommen zusammen, die Atomorbitale überlappen sich, sodass die Elektronenwolke im Bereich zwischen den Atomkernen dichter wird. Die erhöhte negative Ladungsdichte in diesem Bereich zieht die positiv geladenen Atomkerne an. Laut dem Pauli-Verbot haben die beiden Elektronen entgegengesetzten Spin.

Kovalente Bindungen

- Symbolisch: **H:H** oder **H-H**
- Ein Strich (–) steht für ein Elektronenpaar (:)
- Obwohl die Elektronen dem Molekül als ganzem angehören, ist jedes H-Atom an zwei Elektronen beteiligt und hat damit eine Elektronenkonfiguration, die derjenigen des nächsten Edelgases, Helium, entspricht

Edelgasregel

- Die Lewis-Theorie (GN Lewis, 1916) betont das Erreichen der Edelgaskonfiguration als Ziel für jedes Atom

Lewis- oder Valenzstrich-Formeln

- Molekülstrukturen können als Strichformeln gezeichnet werden. Jeder Bindungsstrich zwischen zwei Atomsymbolen symbolisiert ein gemeinsames Elektronenpaar. Die übrigen Valenzelektronen werden als Punkte oder Striche neben die Atomsymbole geschrieben.

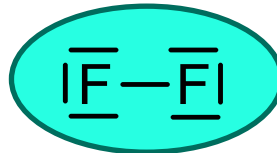
Die (8 – N)-Regel

- Die Zahl der kovalenten Bindungen ergibt sich oft aus der Zahl der Elektronen, die noch fehlen, um die Konfiguration des nächsten Edelgases zu erreichen. Da bei den Nichtmetallen die Zahl der Valenzelektronen gleich der Hauptgruppennummer ist (alte Nomenklatur), werden $8 - N$ Elektronen benötigt.

Beispiele

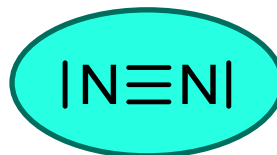
■ F₂:

Fluor ist in der 7. Hauptgruppe, hat sieben Valenzelektronen. Durch Bildung einer kovalenten Bindung zwischen Atomen kommt jedes zu einem Elektronen-Oktett: die Elektronenkonfiguration des nächsten Edelgases, Neon, wird erreicht.



■ N₂:

Mehrfachbindungen können entstehen, wenn mehr als zwei Elektronen zu Elektronenpaarbindungen zusammentreten. Ein N-Atom besitzt drei ungepaarte Valenzelektronen (5. Hauptgruppe: $8 - N = 8 - 5 = 3$). Im N₂-Molekül wird das Elektronen-Oktett durch eine Dreifachbindung erreicht.



■ Weitere Beispiele

Lewis-Formeln und die Oktettregel

- Um Lewis-Formeln im Einklang mit der Oktettregel richtig zu formulieren, muss die Gesamtzahl der Valenzelektronen so auf bindende und einsame Elektronenpaare aufgeteilt werden, dass jedes Atom von acht Elektronen (vier Paaren) und jedes H-Atom von zwei Elektronen umgeben ist. Die Anzahl der Elektronen, die an Bindungen beteiligt ist, ergibt sich gemäß:

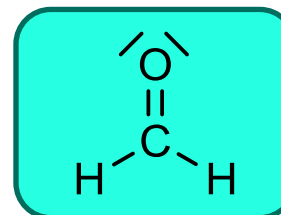
$$\begin{aligned} \text{Anzahl der Bindungs-}e^- &= 2 * (\text{Anzahl der H-Atome}) \\ &+ 8 * (\text{Anzahl der übrigen Atome}) \\ &- (\text{Gesamtzahl der Valenzelektronen}) \end{aligned}$$

Beispiel

- Welche Lewis-Formel hat H_2CO (Formaldehyd)?
 - Jedes **H**-Atom bringt **ein** Valenzelektron ein
 - das **C**-Atom bringt **vier** Valenzelektron ein
 - das **O**-Atom bringt **sechs** Valenzelektron ein
 - **Gesamtzahl** der Valenzelektronen = **12**

$$\begin{aligned}
 \text{Anzahl der Bindungs-}e^- &= 2 * (\text{Anzahl der H-Atome}) && 2 * 2 \\
 &+ 8 * (\text{Anzahl der übrigen Atome}) && + 8 * 2 \\
 &- (\text{Gesamtzahl der Valenzelektronen}) && - 12 \\
 &&& (4 + 16) - 12 \\
 &&& 20 - 12 = 8
 \end{aligned}$$

- Es ergeben sich **8 Bindungselektronen** oder **vier Bindungen**:



Formalladungen

- In Verbindungen mit Elementen der dritten und höherer Perioden wird oft mit mehr als acht Valenzelektronen formuliert. Es ist jedoch auch hier möglich, im Einklang mit der Oktettregel zu formulieren, wenn man **Formalladungen** zufügt. Allgemein gilt:

Ein Atom, an dem in der Lewis-Formel so viele Bindungsstriche zusammenkommen, wie nach der (8 – N)-Regel zu erwarten, hat keine Formalladung. Sind es mehr Bindungsstriche, so ist die Formalladung positiv, sind es weniger, ist sie negativ.

- Wie es der Name zum Ausdruck bringt, ist eine Formalladung eine Formalität!!!
- In Lewis-Formeln sollten möglichst wenige Atome eine Formalladung haben und sie sollten auch möglichst klein sein. Atome, die aneinander gebunden sind, sollten keine Formalladungen des gleichen Vorzeichens haben.

Beispiele

- Welche Lewis-Formel und Formalladungen hat das CO-Molekül?
- Valenzelektronen = $4 + 6 = 10$.
- Nach der Oktettregel muss eine Dreifachbindung formuliert werden:
- Durch gleichmäßige Aufteilung der Bindungselektronen erhält sowohl das C- wie das O-Atom 5 Elektronen. Verglichen mit der Zahl der Valenzelektronen der Neutralen Atome ergibt sich die Formalladung 1^- für C und 1^+ für O:
- Die Summe der Formalladungen ergibt Null, wie für ein neutrales Molekül gefordert.

Beispiele

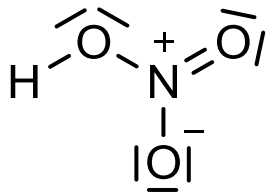
- Welche ist die Lewis-Formel für Salpetersäure?
- Im HNO_3 ist das N-Atom an die drei O-Atome gebunden, das H-Atom an eines der O-Atome.
- Valenzelektronen = 1 (von H) + 5 (von N) + 3 * 6 (von O) = 24

$$\begin{aligned}
 \text{Anzahl der Bindungselektronen} &= 2 * (\text{Zahl der H-Atome}) && 2 * 1 \\
 &+ 8 * (\text{Zahl der übrigen Atome}) && + (8 * 4) \\
 &- \text{Zahl der Valenzelektronen} && - 24 \\
 &&& = 34 - 24 = \mathbf{10}
 \end{aligned}$$

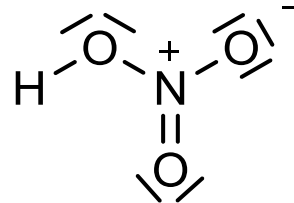
Beispiele

- Die zehn Bindungselektronen (= 5 Bindungen) können auf drei Arten formuliert werden, die übrigen Elektronen ergeben einsame Elektronenpaare im Einklang mit der Oktett-Regel:

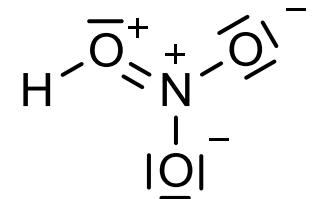
A



B



C



- Die Formeln a und b sind gleichwertig.
- Formel c kommt nicht in Betracht wegen der benachbarten positiven Formalladungen.

Mesomerie (Resonanz)

- In dem Fall, wo mehrere gleichwertige Formeln (wie **a** und **b** in dem Beispiel mit HNO_3) angegeben werden können, gelten diese Formeln als **Grenzformeln**. Man gibt alle solche Grenzformeln an und schreibt einen Doppelpfeil (\leftrightarrow) zwischen ihnen. Diese Art formulierung nennt man Mesomerie oder Resonanz.

Für den Fall, wo nicht alle Grenzformeln gleichwertig sind, helfen die folgenden Regeln:

- 1. Für alle mesomeren Grenzformeln muss die räumliche Anordnung der Atomkerne die gleiche sein. Grenzformeln unterscheiden sich nur in der Verteilung von Elektronen.

Beispiel:

Im Cyanat-Ion sind die Atome in der Reihenfolge OCN^- aneinander gebunden. Strukturen mit der Anordnung NOC^- oder CNO^- gehören nicht zum Cyanat-Ion und kommen als Grenzformeln nicht in Betracht.

Mesomerie (Resonanz)

- 2. Zwei aneinander gebundene Atome sollen keine Formalladungen mit gleichem Vorzeichen haben.
- 3. Die wichtigsten Grenzformeln sind diejenigen mit der kleinsten Anzahl von Formalladungen. Am günstigsten sind die Grenzformeln ohne Formalladungen.
- 4. Bei den wichtigeren Grenzformeln entspricht die Verteilung von positiven und negativen Formalladungen den Elektronegativitäten der Atome. Das Elektronegativste Atom sollte keine positive Formalladung erhalten.