

# Oktett-Theorie von Lewis



*Gilbert Edward Lewis*

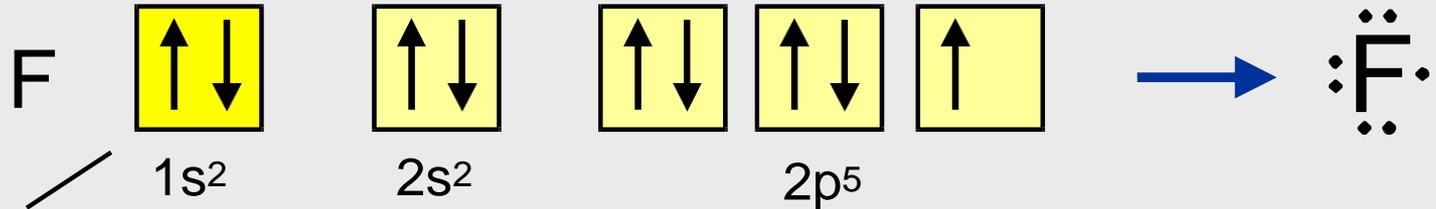
## Oktettregel

Atome versuchen durch die Nutzung gemeinsamer Elektronenpaare möglichst ein Elektronenoktett zu erlangen.

## allgemeiner: Edelgasregel

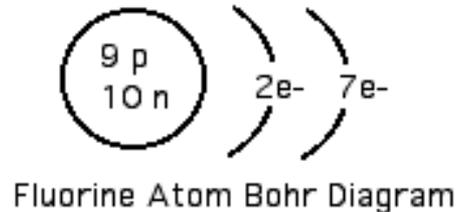
Atome streben durch Vereinigung mit Bindungspartnern an, eine edelgasanaloge Elektronenkonfiguration zu erlangen.

# Lewis-Symbole von Atomen / Ionen des s- und p- Blocks

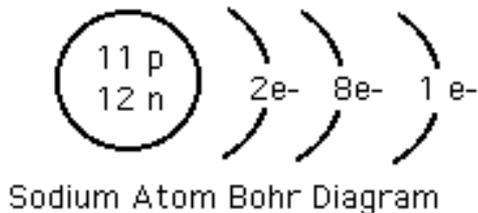
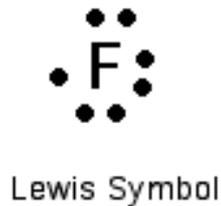


abgeschlossene Schale, Elektronen werden nicht dargestellt

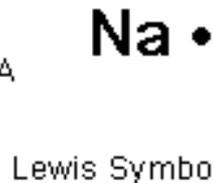
drei Elektronenpaare, ein isoliertes Elektron, Elektronenkonfiguration der äußeren Elektronen



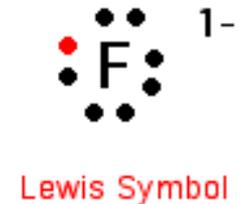
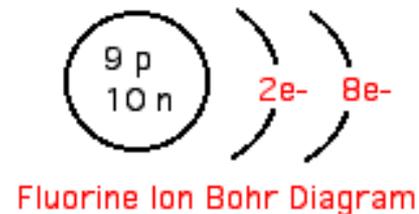
Group 17, VIIA, or 7



Group 1 or IA



To form the ion add one electron to form the Octet.



# Die Chemische Bindung - Grenztypen

- **ionische Bindung**

Vollständiger Übertrag der Valenzelektronen auf den elektronegativeren Partner ( $\Delta\chi$  groß, oft Metall + Nichtmetall).

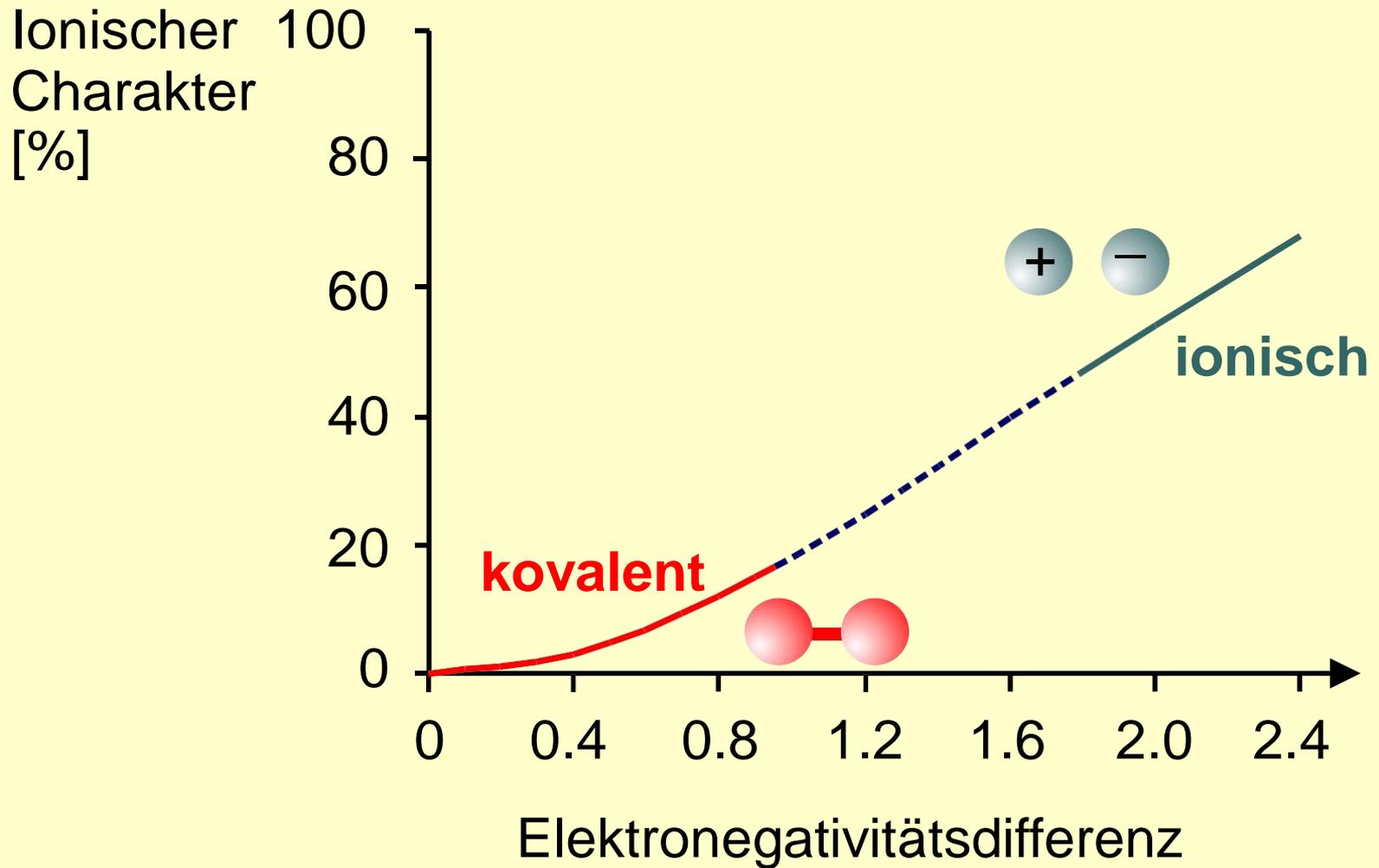
- **metallische Bindung**

Abgabe der Valenzelektronen. Elektronen werden gleichmäßig zwischen Atomrümpfen verteilt ( $\Delta\chi$  klein, nur Metalle beteiligt).

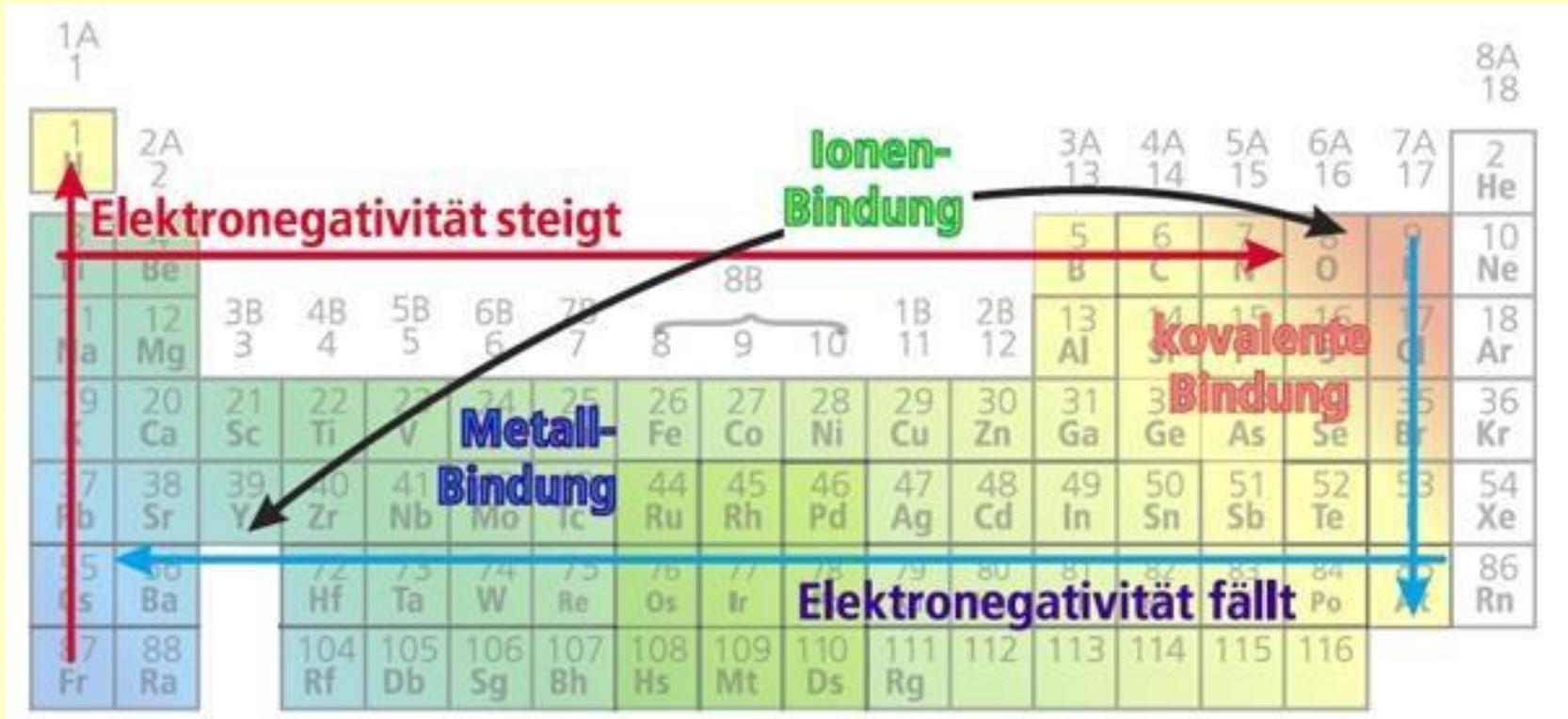
- **kovalente Bindung**

Zusammenhalt zweier oder mehrerer Atome durch Elektronen, die sich die beteiligten Atome „teilen“, Besetzung von Molekülorbitalen ( $\Delta\chi$  klein, mindestens ein Nichtmetall an der Bindung beteiligt).

# Typen der chemischen Bindung



# Typen der chemischen Bindung



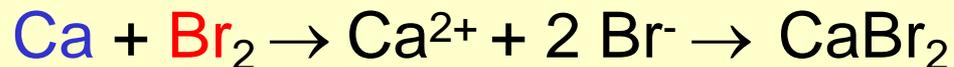
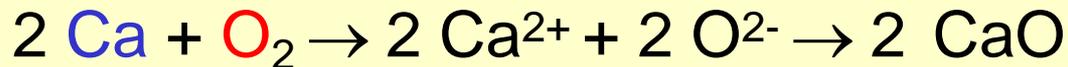
# Periodensystem der Elemente

1 <b>H</b> 1.0079																	2 <b>He</b> 4.0026									
3 <b>Li</b> 6.941	4 <b>Be</b> 9.0122											5 <b>B</b> 10.811	6 <b>C</b> 12.011	7 <b>N</b> 14.007	8 <b>O</b> 15.999	9 <b>F</b> 18.998	10 <b>Ne</b> 20.180									
11 <b>Na</b> 22.990	12 <b>Mg</b> 24.305											13 <b>Al</b> 26.982	14 <b>Si</b> 28.086	15 <b>P</b> 30.974	16 <b>S</b> 32.066	17 <b>Cl</b> 35.453	18 <b>Ar</b> 39.948									
19 <b>K</b> 39.098	20 <b>Ca</b> 40.078	21 <b>Sc</b> 44.956	22 <b>Ti</b> 47.867	23 <b>V</b> 50.942	24 <b>Cr</b> 51.996	25 <b>Mn</b> 54.938	26 <b>Fe</b> 55.845	27 <b>Co</b> 58.933	28 <b>Ni</b> 58.693	29 <b>Cu</b> 63.546	30 <b>Zn</b> 65.39	31 <b>Ga</b> 69.723	32 <b>Ge</b> 72.61	33 <b>As</b> 74.922	34 <b>Se</b> 78.96	35 <b>Br</b> 79.904	36 <b>Kr</b> 83.80									
37 <b>Rb</b> 85.468	38 <b>Sr</b> 87.62	39 <b>Y</b> 88.906	40 <b>Zr</b> 91.224	41 <b>Nb</b> 92.906	42 <b>Mo</b> 95.94	43 <b>Tc*</b> 98.906	44 <b>Ru</b> 101.07	45 <b>Rh</b> 102.91	46 <b>Pd</b> 106.42	47 <b>Ag</b> 107.87	48 <b>Cd</b> 112.41	49 <b>In</b> 114.82	50 <b>Sn</b> 118.71	51 <b>Sb</b> 121.76	52 <b>Te</b> 127.60	53 <b>I</b> 126.90	54 <b>Xe</b> 131.29									
55 <b>Cs</b> 132.91	56 <b>Ba</b> 137.33											72 <b>Hf</b> 178.49	73 <b>Ta</b> 180.95	74 <b>W</b> 183.84	75 <b>Re</b> 186.21	76 <b>Os</b> 190.23	77 <b>Ir</b> 192.22	78 <b>Pt</b> 195.08	79 <b>Au</b> 196.97	80 <b>Hg</b> 200.59	81 <b>Tl</b> 204.38	82 <b>Pb</b> 207.2	83 <b>Bi</b> 208.98	84 <b>Po*</b> 208.98	85 <b>At*</b> 209.99	86 <b>Rn*</b> 222.02
87 <b>Fr*</b> 223.02	88 <b>Ra*</b> 226.03											104 <b>Rf*</b> 261.11	105 <b>Db*</b> 262.11	106 <b>Sg*</b> 263.12	107 <b>Bh*</b> 262.12	108 <b>Hs*</b> 265	109 <b>Mt*</b> 268	110 <b>Eka-Pt</b> 271	111 <b>Eka-Au</b> 272	112 <b>Eka-Hg</b>						
		57 <b>La</b> 138.91	58 <b>Ce</b> 140.12	59 <b>Pr</b> 140.91	60 <b>Nd</b> 144.24	61 <b>Pm*</b> 146.92	62 <b>Sm</b> 150.36	63 <b>Eu</b> 151.97	64 <b>Gd</b> 157.25	65 <b>Tb</b> 158.93	66 <b>Dy</b> 162.50	67 <b>Ho</b> 164.93	68 <b>Er</b> 167.26	69 <b>Tm</b> 168.93	70 <b>Yb</b> 173.04	71 <b>Lu</b> 174.97										
		89 <b>Ac*</b> 227.03	90 <b>Th*</b> 232.04	91 <b>Pa*</b> 231.04	92 <b>U*</b> 238.03	93 <b>Np*</b> 237.05	94 <b>Pu*</b> 244.06	95 <b>Am*</b> 243.06	96 <b>Cm*</b> 247.07	97 <b>Bk*</b> 247.07	98 <b>Cf*</b> 251.08	99 <b>Es*</b> 252.08	100 <b>Fm*</b> 257.10	101 <b>Md*</b> 258.10	102 <b>No*</b> 259.10	103 <b>Lr*</b> 260.11										

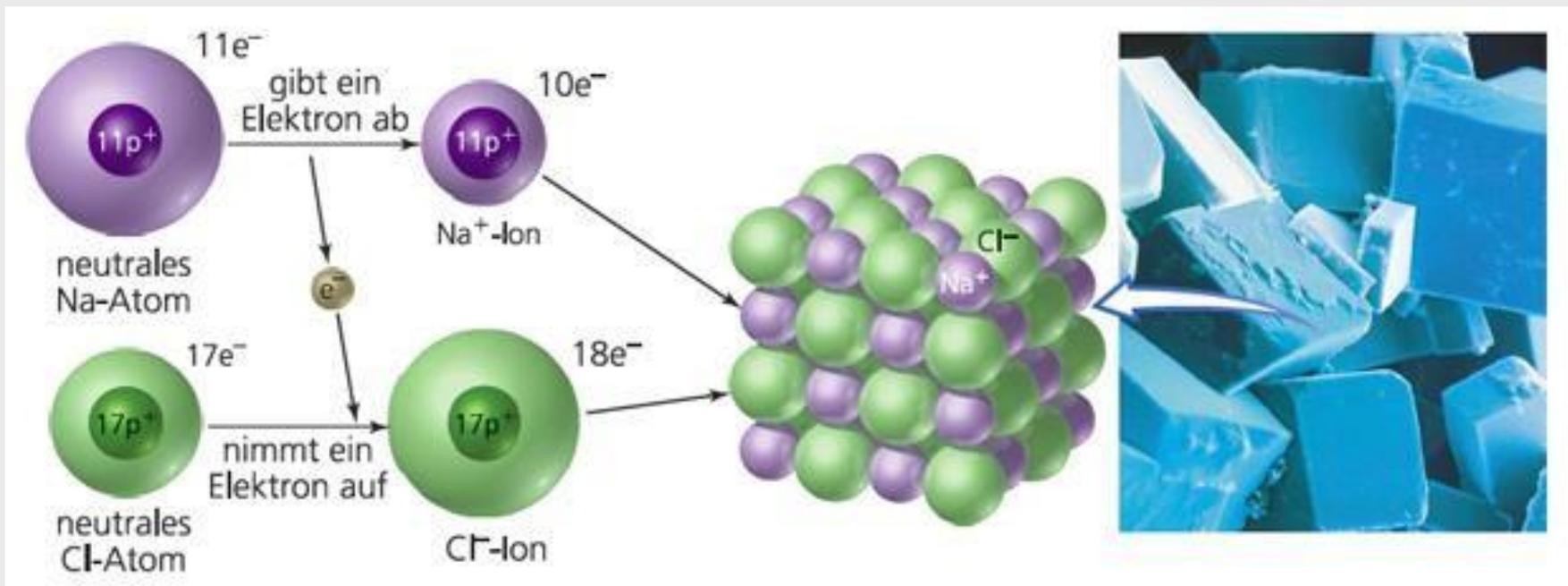
# Die ionische Bindung

Eine ionische Bindung entsteht dann, wenn ein Atom seine Valenzelektronen (komplett oder partiell) abgibt und ein zweites Atom diese aufnimmt.

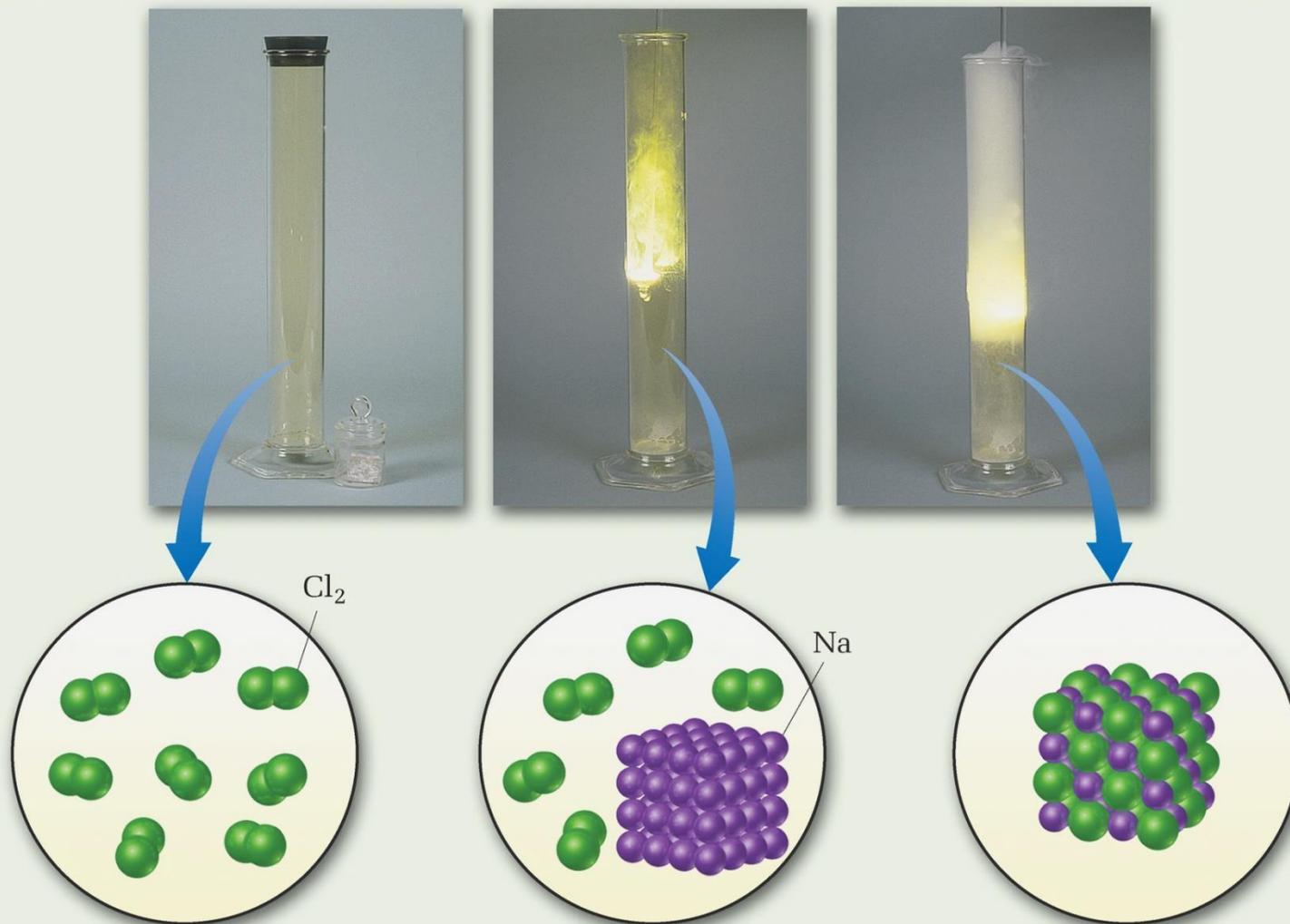
→ oft Reaktion von **Metall** und **Nichtmetall**, Bildung von Ionen



# Die ionische Bindung

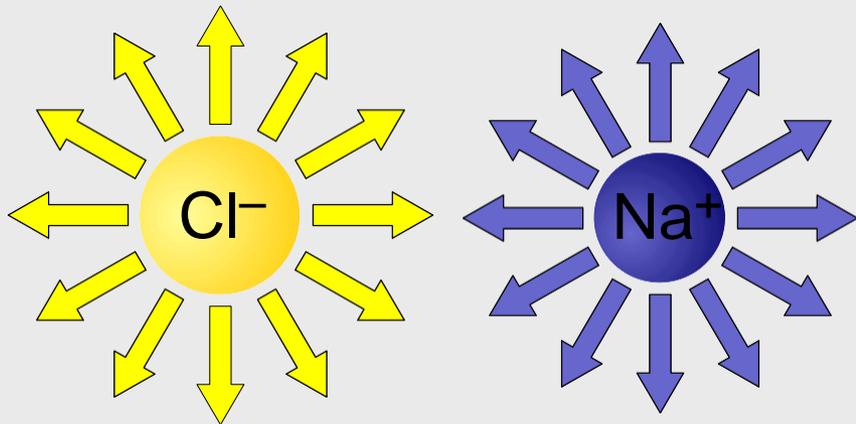


# Die ionische Bindung



# Die ionische Bindung

Elektrostatische Kräfte (Coulomb- Wechselwirkungen) sind nicht gerichtet (ungerichtet). Sie wirken in alle Richtungen gleich stark / sie sind isotrop. → Ionenverbindungen bilden nicht einzelne Moleküle, sondern aus Ionen aufgebaute Kristalle.



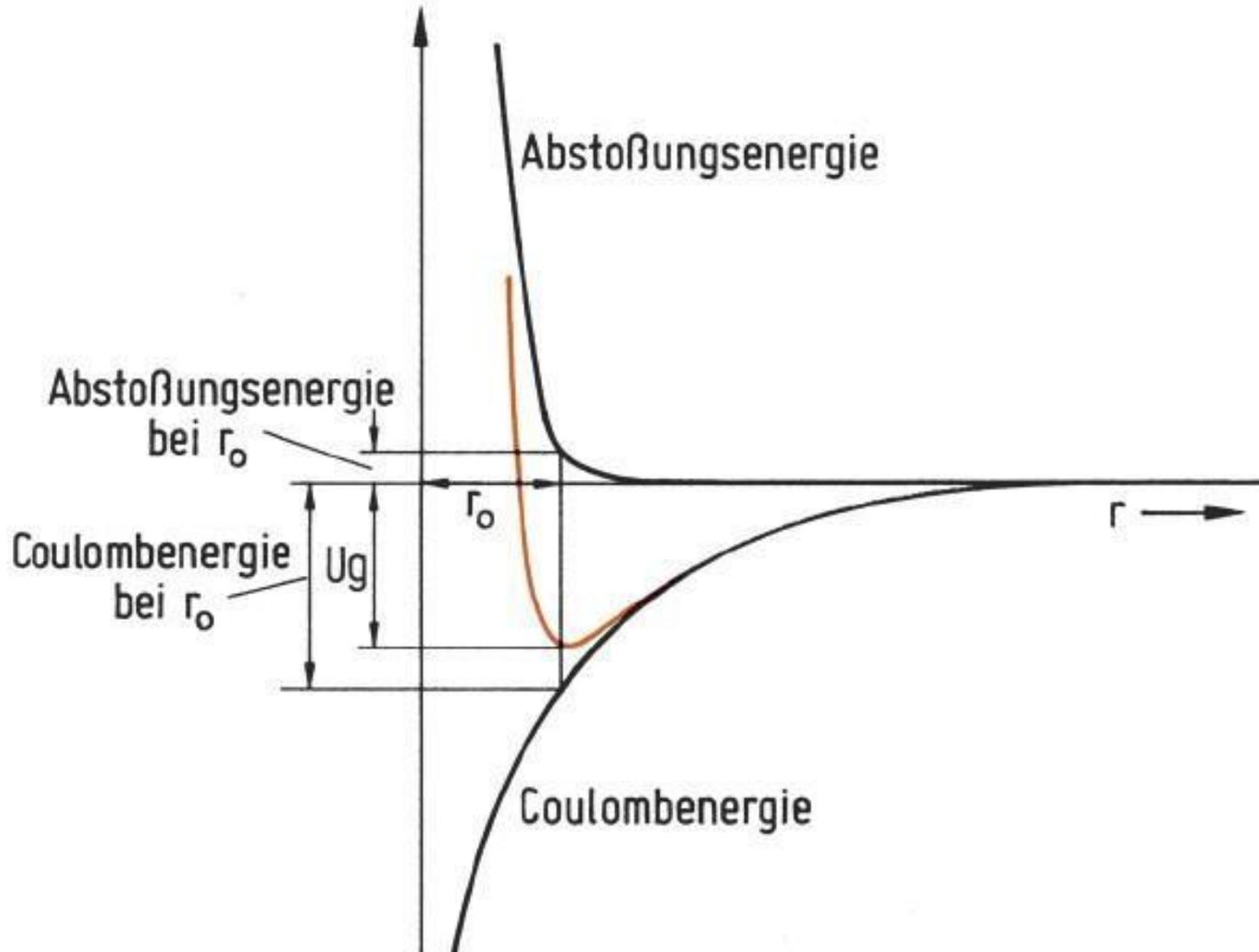
Coulomb'sches Gesetz:

Kraft zwischen zwei Punktladungen

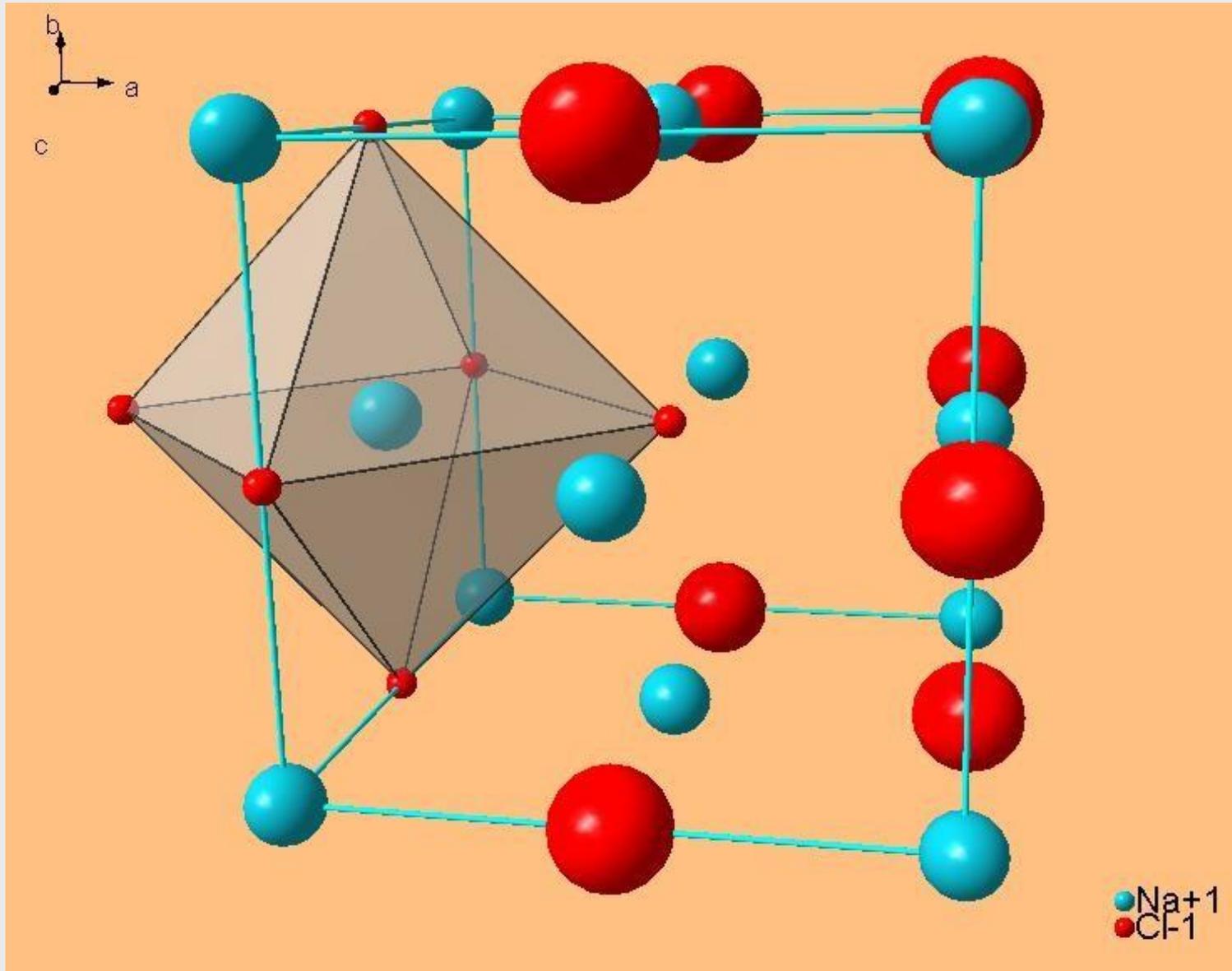
$$\mathbf{F} \propto \frac{Q_1 \cdot Q_2}{r^2}$$

F	Kraft
$Q_1, Q_2$	Ladungen der beiden Teilchen
r	Teilchenabstand

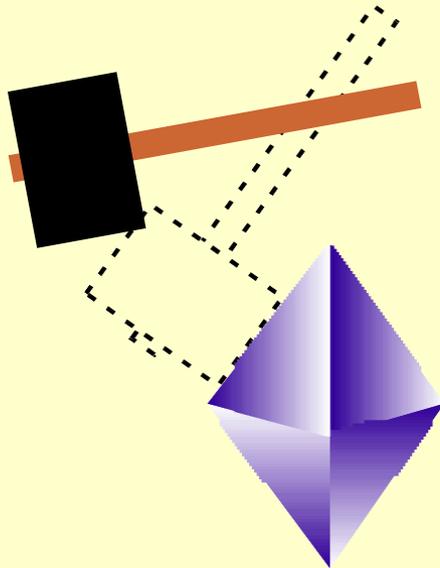
# Änderung der potentiellen Energie bei Annäherung zweier entgegengerichtet geladener Ionen



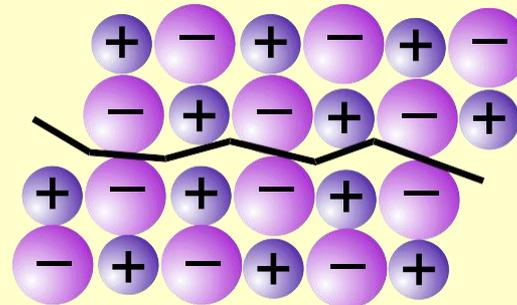
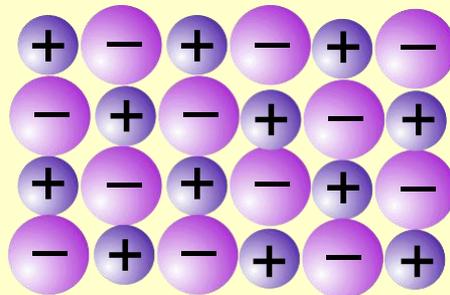
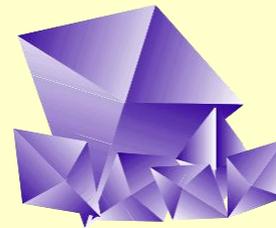
# Natriumchlorid als Beispiel für einen Ionenverband



# Mechanische Eigenschaften von Salzen



**Bruch**



# Die Chemische Bindung - Grenztypen

## • ionische Bindung

Vollständiger Übertrag der Valenzelektronen auf den elektronegativeren Partner ( $\Delta\chi$  groß, oft Metall + Nichtmetall).

## • metallische Bindung

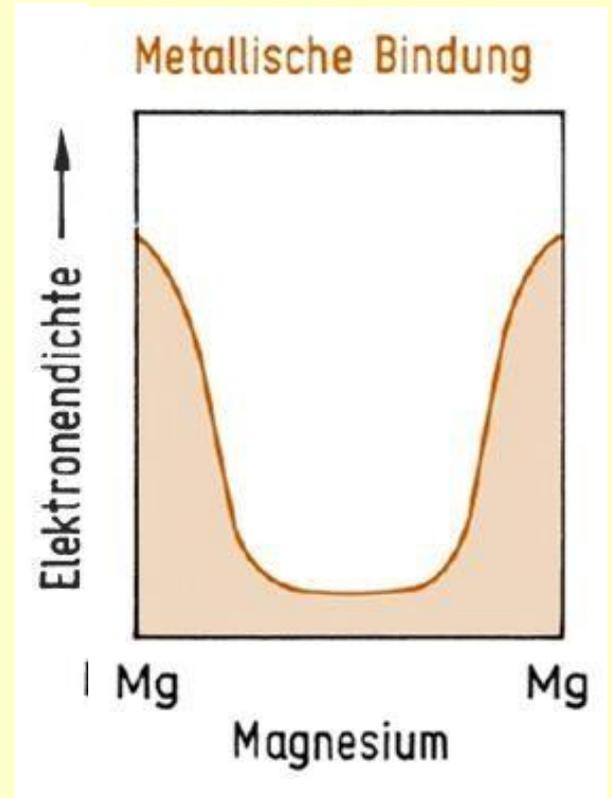
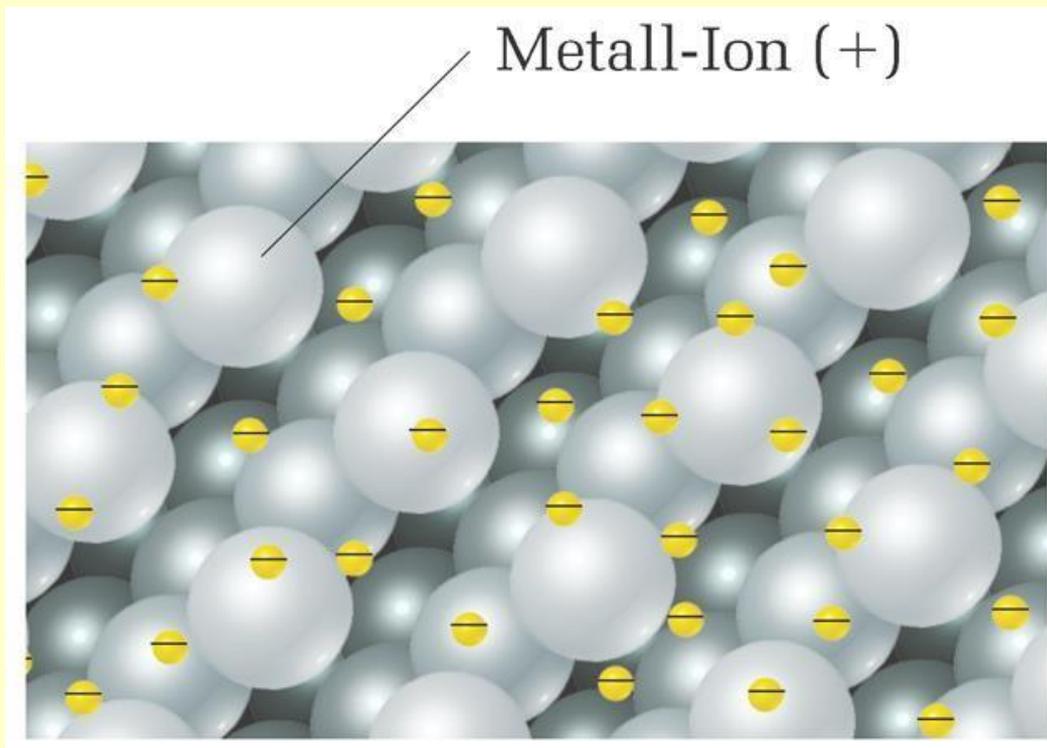
Abgabe der Valenzelektronen. Elektronen werden gleichmäßig zwischen Atomrümpfen verteilt ( $\Delta\chi$  klein, nur Metalle beteiligt).

## • kovalente Bindung

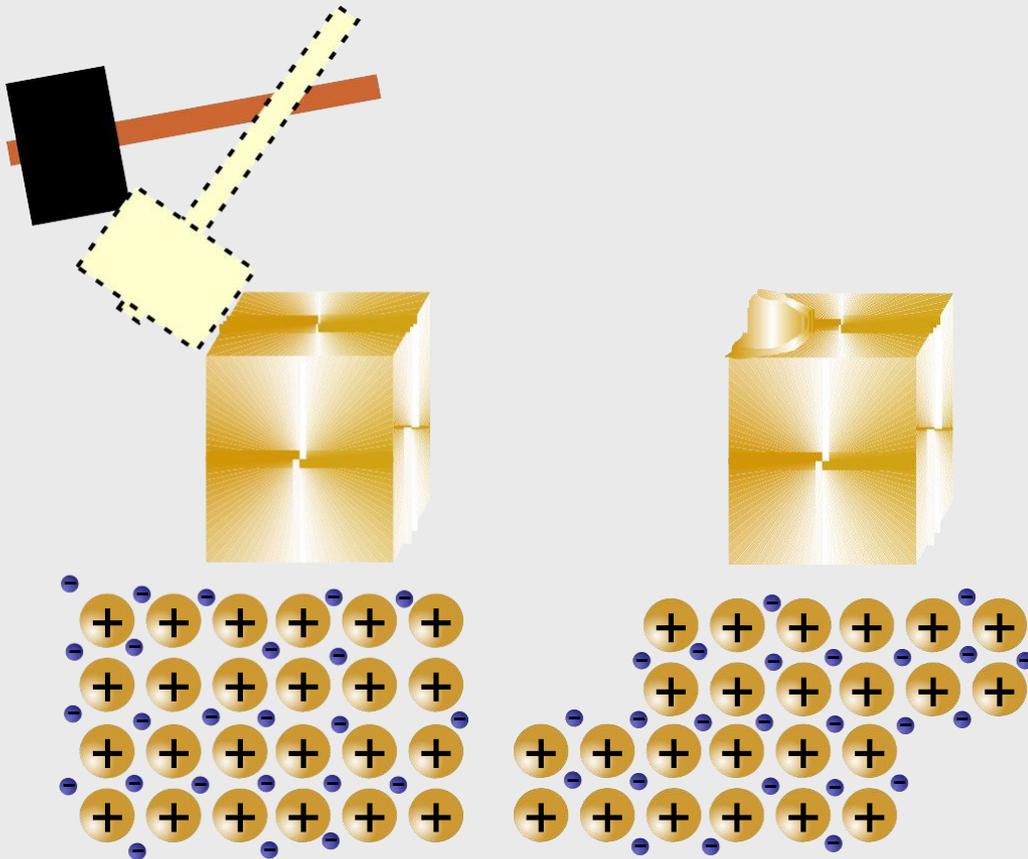
Zusammenhalt zweier oder mehrerer Atome durch Elektronen, die sich die beteiligten Atome „teilen“, Besetzung von Molekülorbitalen ( $\Delta\chi$  klein, mindestens ein Nichtmetall an der Bindung beteiligt).

# Die metallische Bindung

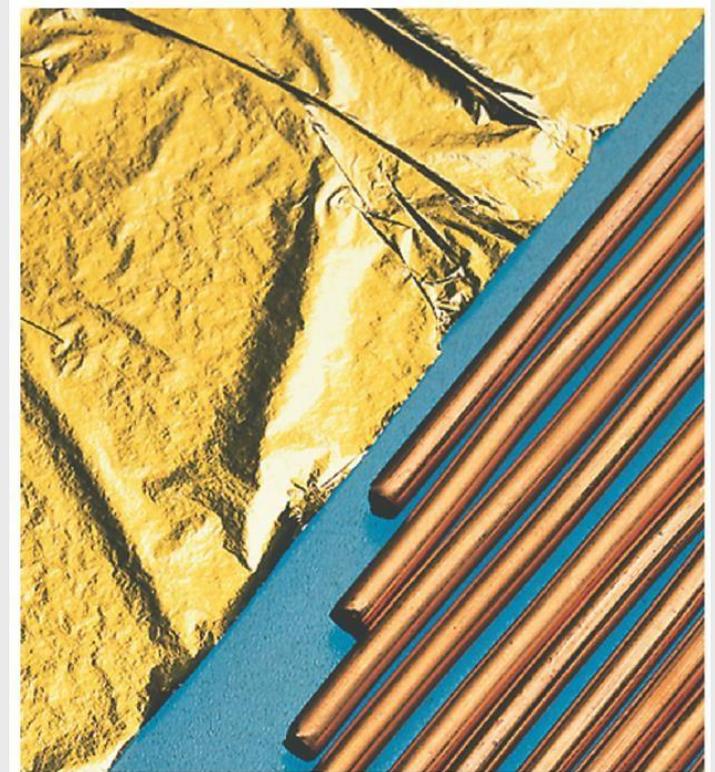
**Elektronengas-Modell:** kationische Atomrümpfe in einem „Elektronen-See“



# Verformbarkeit von Metallen

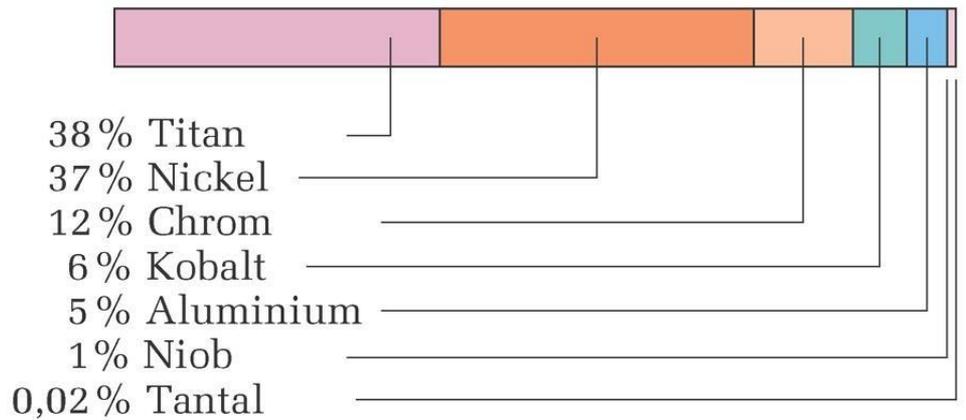


**Gold**



**Kupfer**

# Legierungen – wichtige Werkstoffe

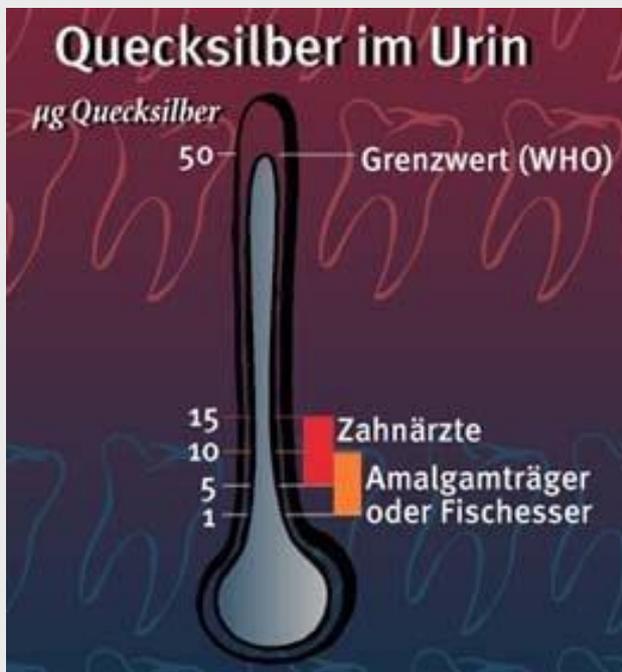


**Elementare Zusammensetzung eines Flugzeugtriebwerks**

# Legierungen – Amalgame



Amalgame: Legierungen des Quecksilbers. Viele Metalle sind mit Hg in beliebigem Verhältnis kombinierbar. Da Hg flüssig ist, lassen sich Amalgame zudem leicht herstellen.



Amalgam hat als Legierung im Vergleich zu den Ausgangsmetallen verbesserte Eigenschaften.

**Zahn amalgam** ist ein Gemisch aus:

- ~50% Quecksilber
- ~22-32% Silber, ~14% Zinn, ~8% Kupfer + anderen Metallen

# Die Chemische Bindung - Grenztypen

- **ionische Bindung**

Vollständiger Übertrag der Valenzelektronen auf den elektronegativeren Partner ( $\Delta\chi$  groß, oft Metall + Nichtmetall).

- **metallische Bindung**

Abgabe der Valenzelektronen. Elektronen werden gleichmäßig zwischen Atomrümpfen verteilt ( $\Delta\chi$  klein, nur Metalle beteiligt).

- **kovalente Bindung**

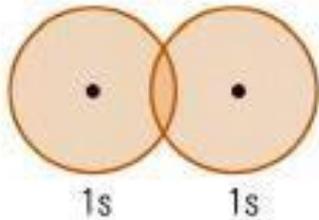
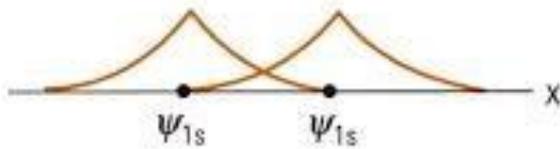
Zusammenhalt zweier oder mehrerer Atome durch Elektronen, die sich die beteiligten Atome „teilen“, Besetzung von Molekülorbitalen ( $\Delta\chi$  klein, mindestens ein Nichtmetall an der Bindung beteiligt).

# Molekülorbitale (MOs) zweiatomiger Moleküle

n AO



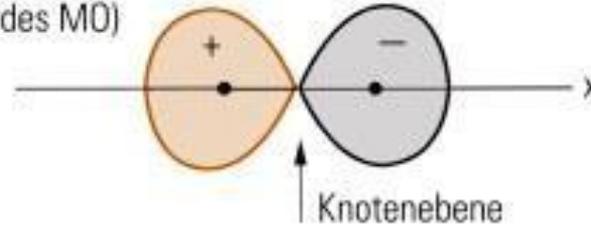
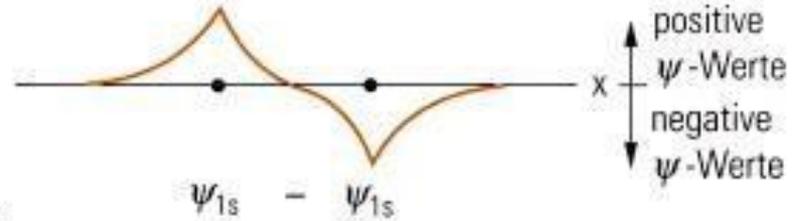
n MO



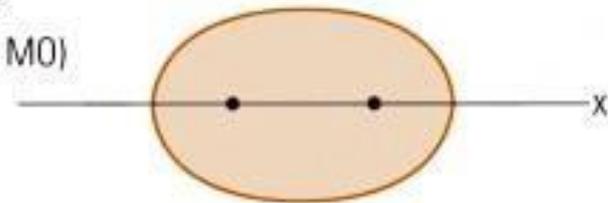
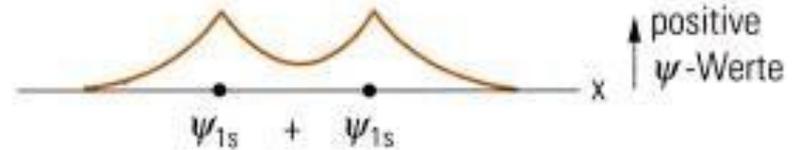
Subtraktion

Addition

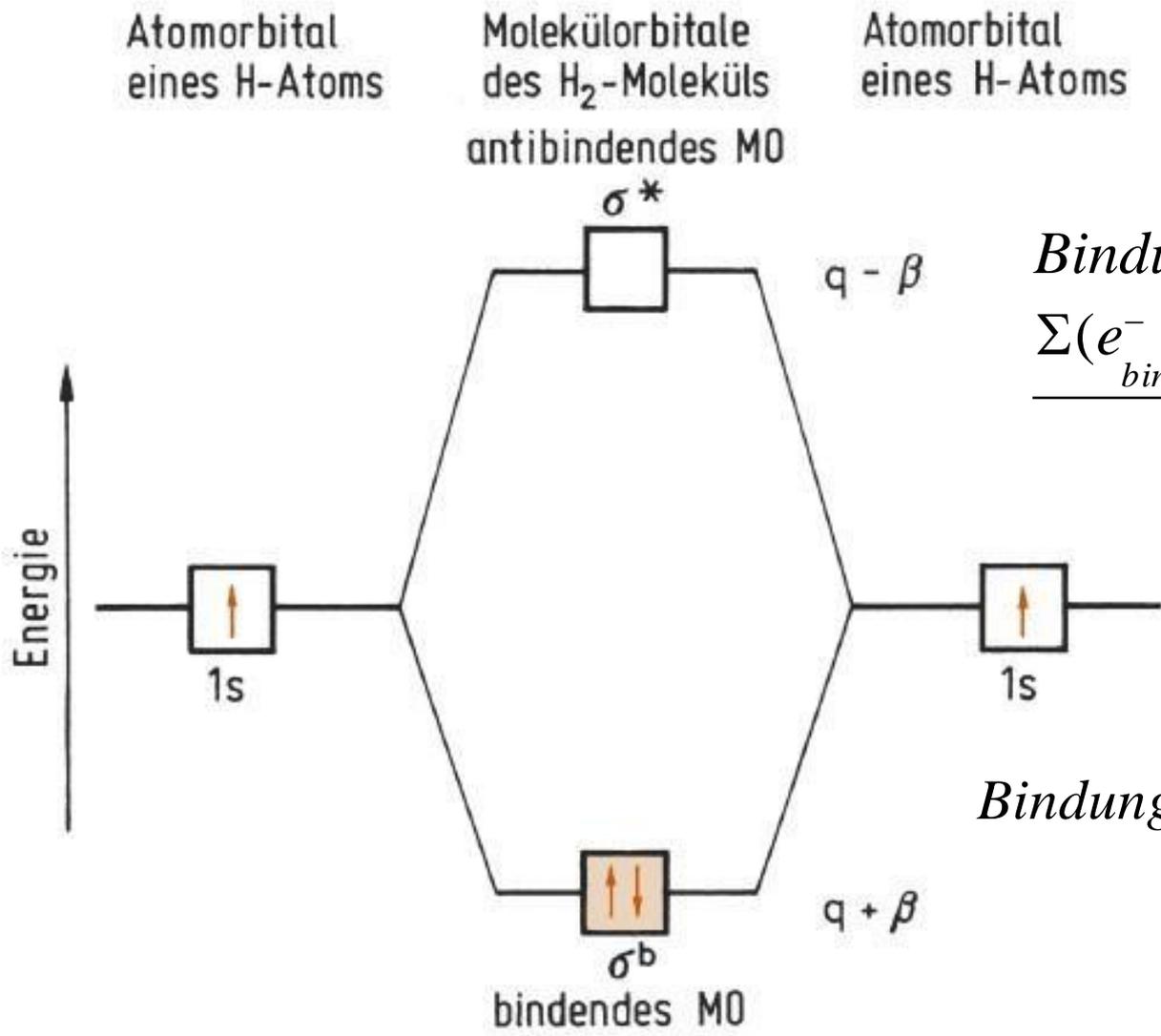
$\sigma_s^*$ -MO  
(antibindendes MO)



$\sigma_s^b$ -MO  
(bindendes MO)



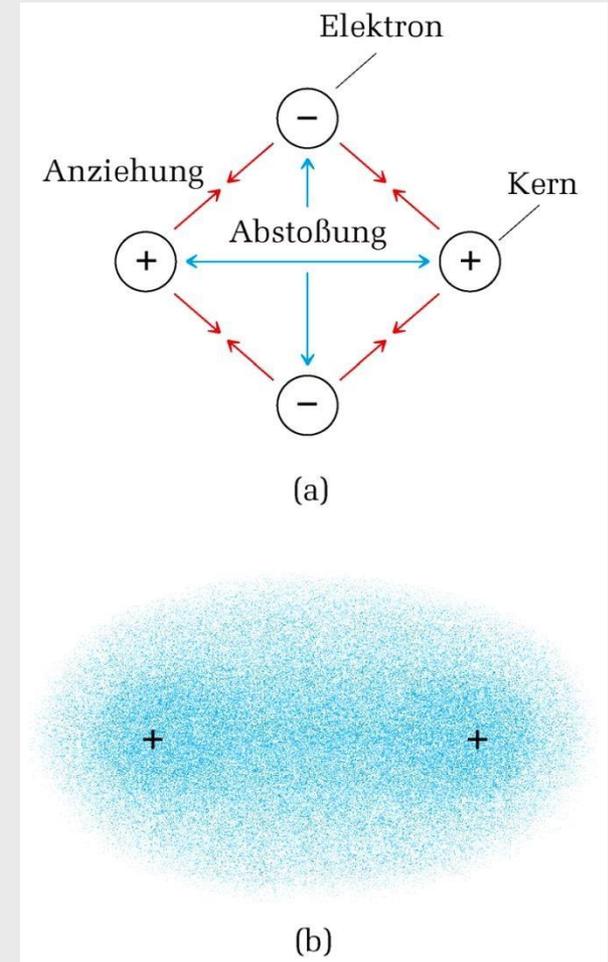
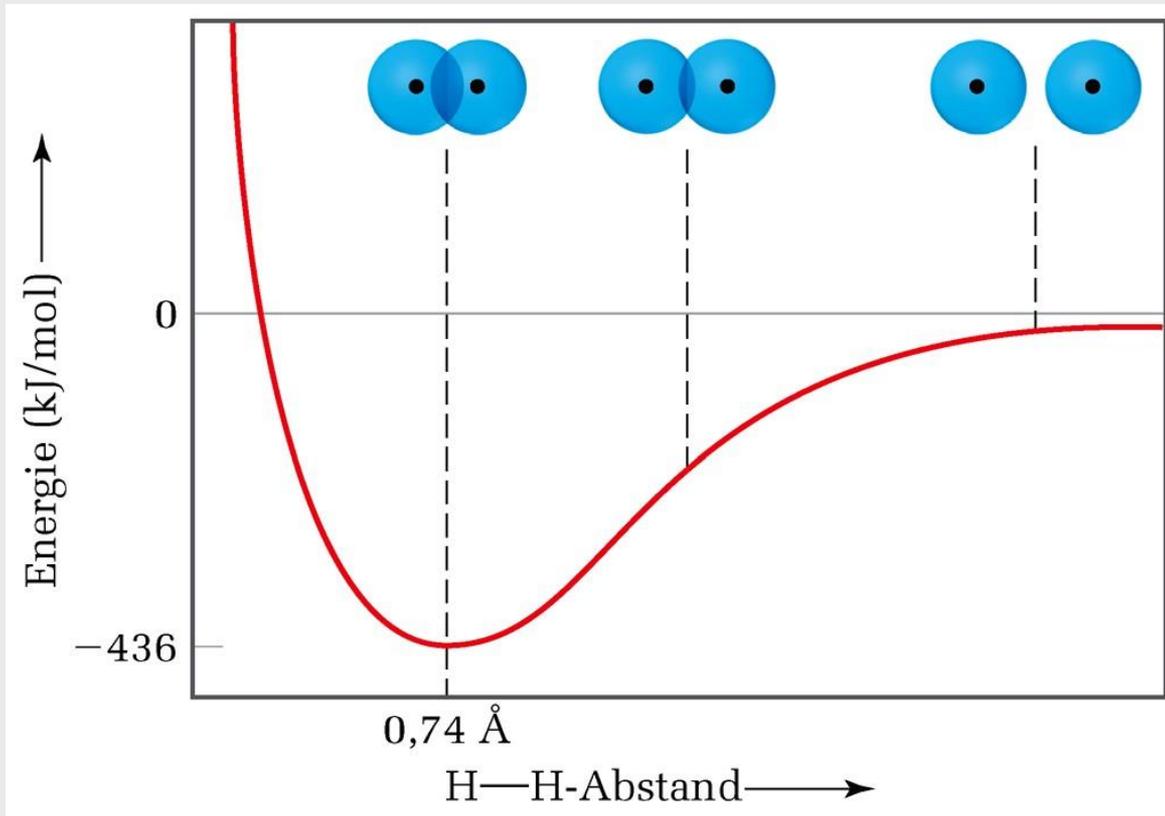
# Elektronenkonfiguration des Wasserstoffmoleküls – die Einfachbindung



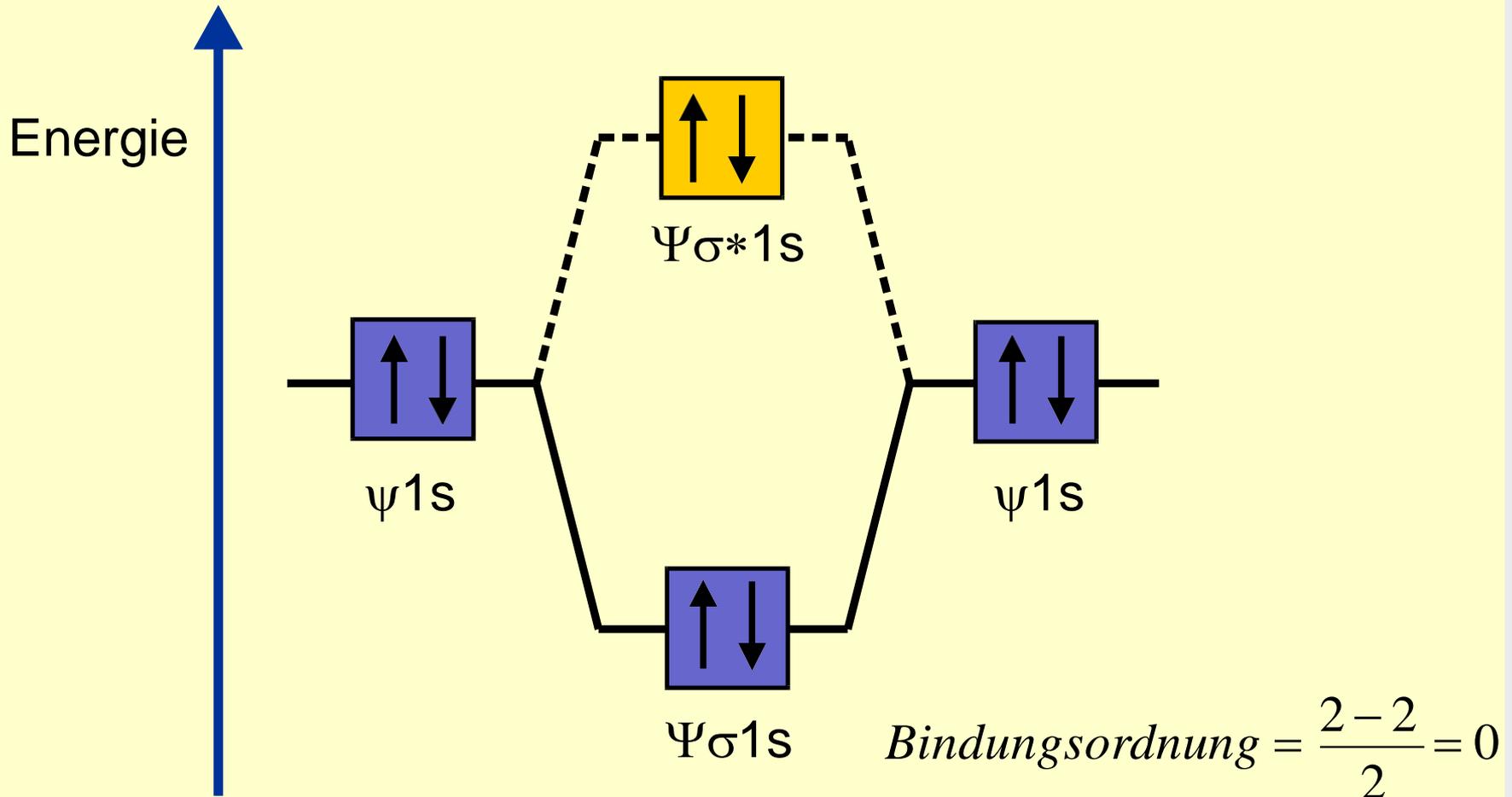
$$\text{Bindungsordnung} = \frac{\Sigma(e^-_{\text{bindend}}) - \Sigma(e^-_{\text{antibindend}})}{2}$$

$$\text{Bindungsordnung} = \frac{2 - 0}{2} = 1$$

# Energie-Abstandsprofil des H<sub>2</sub>-Moleküls



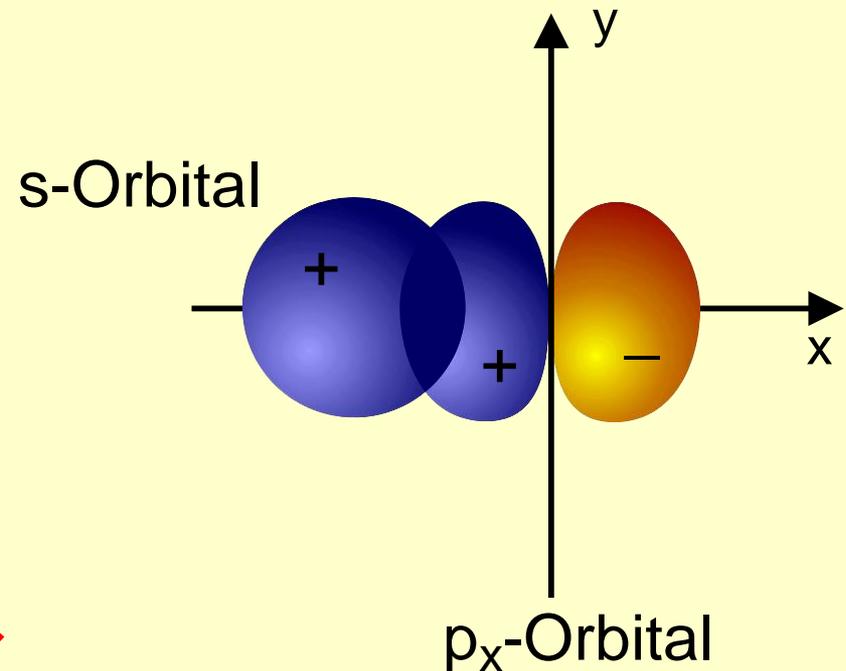
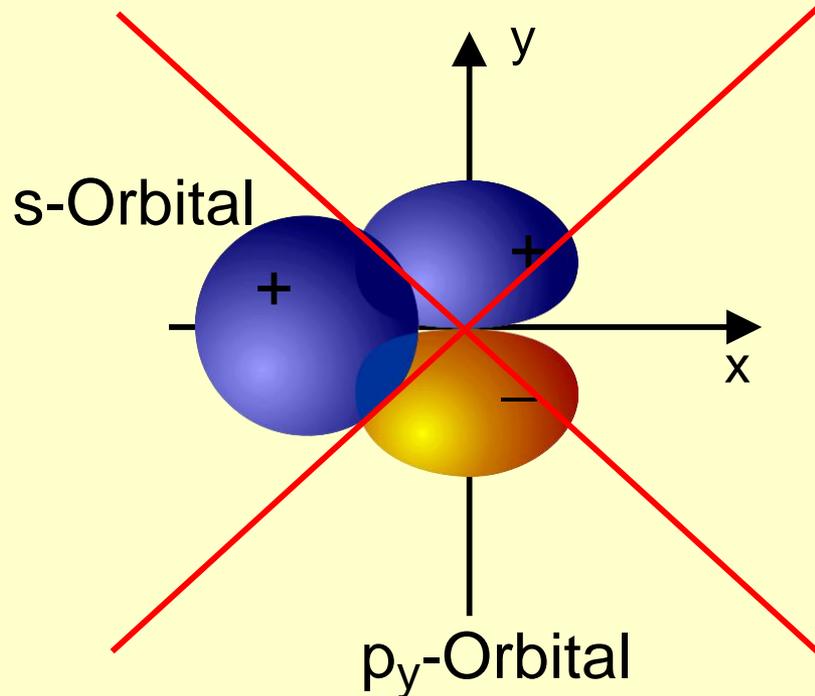
# Warum gibt es kein Diheliummolekül, He<sub>2</sub>?



Bindende und antibindende Wechselwirkungen heben sich genau auf!

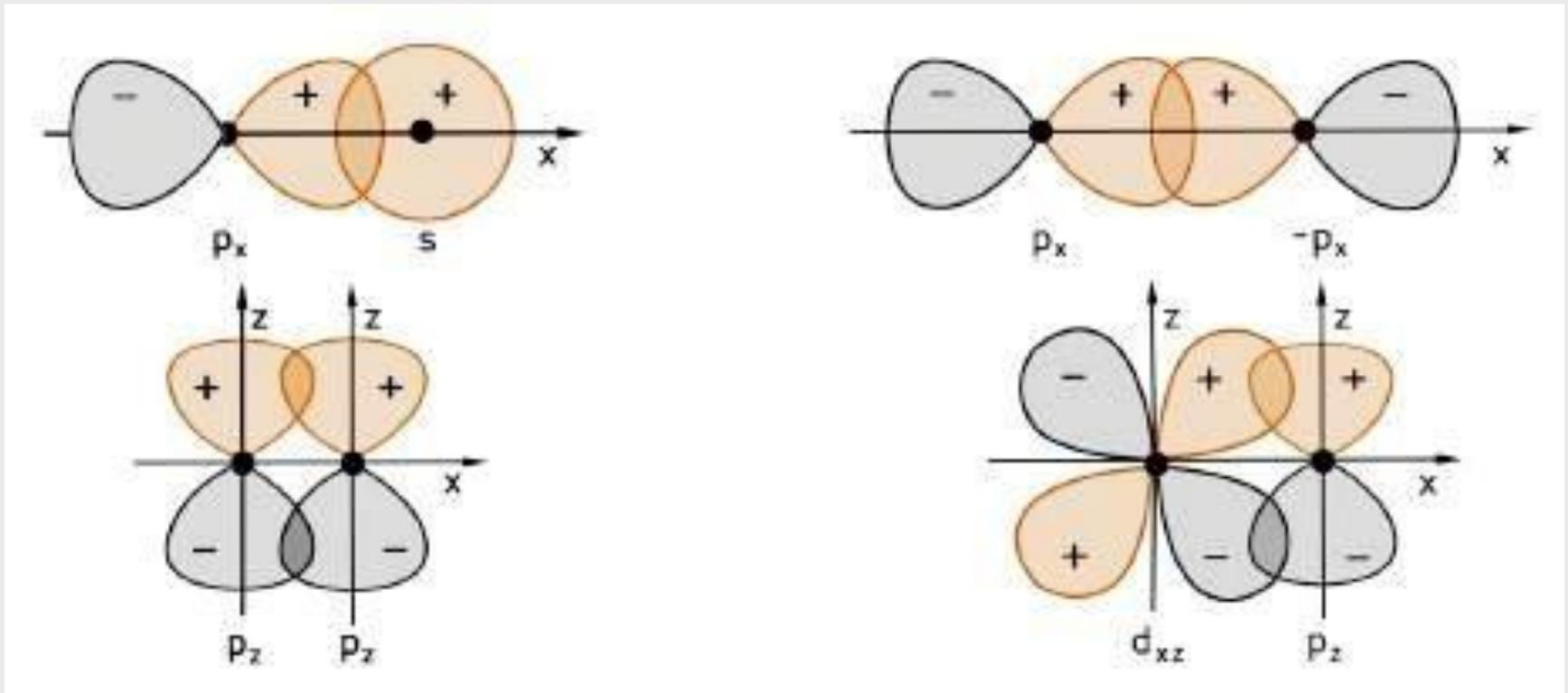
# Bildung von Molekülorbitalen - Voraussetzungen

- vergleichbare Energien der Atomorbitale
- passende räumliche Orientierung der Atomorbitale
- Vorzeichen der wechselwirkenden Atomorbitale



# Bildung von Molekülorbitalen

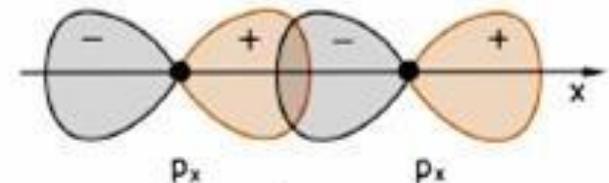
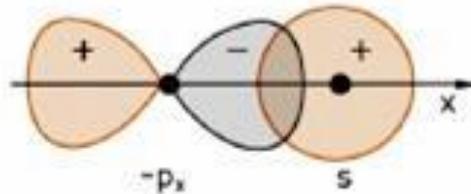
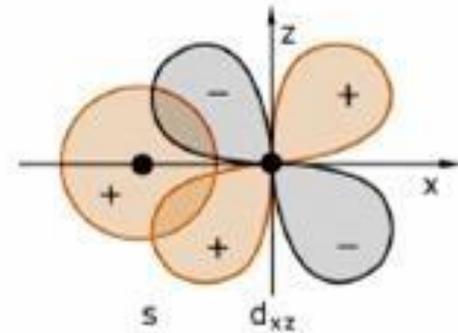
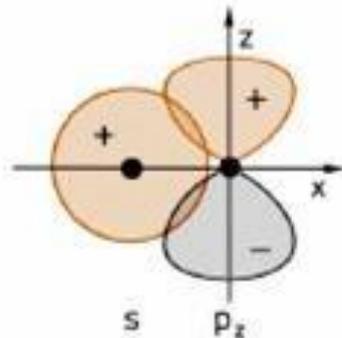
*energetisch günstige Überlappung von MOs –  
bindende Molekülorbitale:*



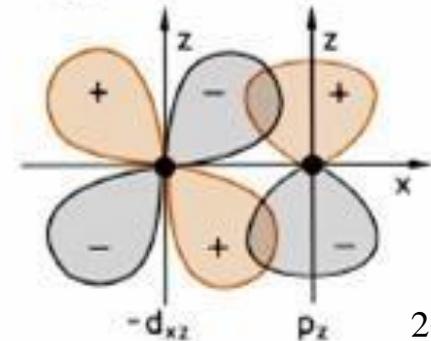
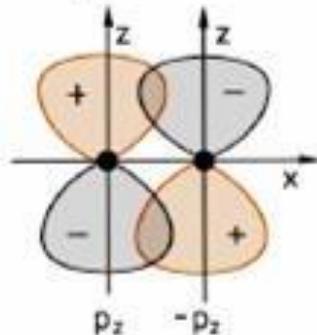
# Bildung von Molekülorbitalen

*energetisch ungünstige Überlappung von MOs:*

nichtbindend

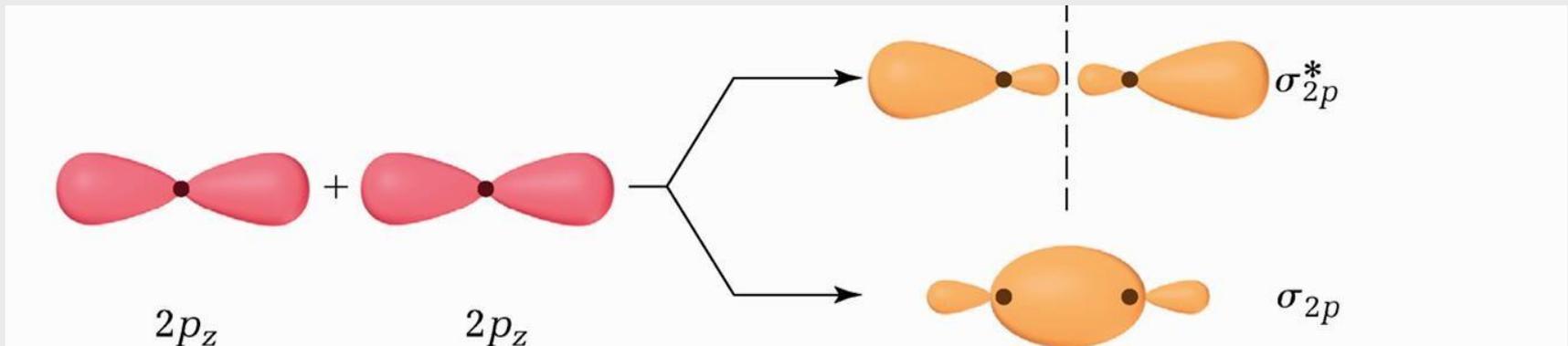


antibindend



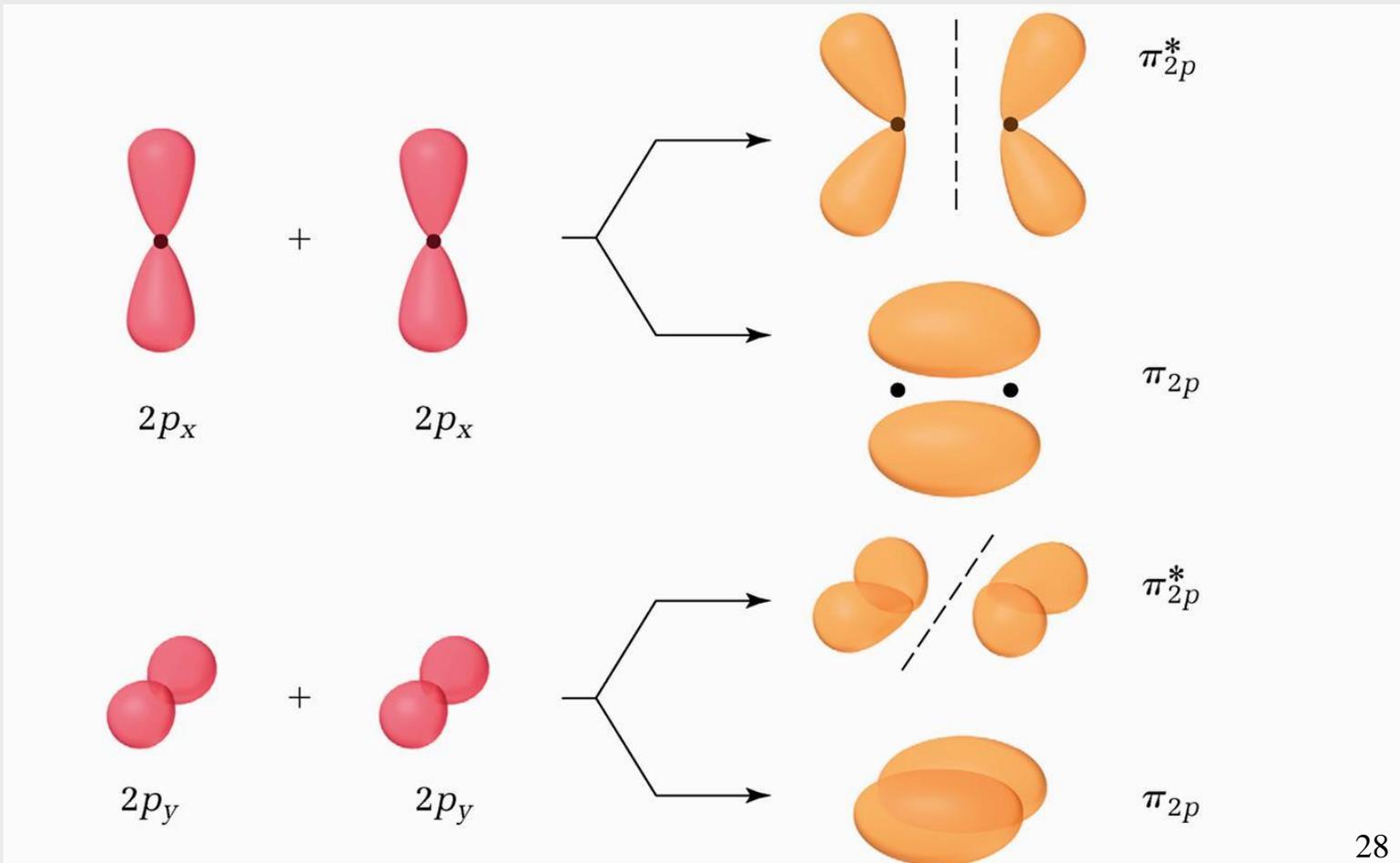
# Bildung von Molekülorbitalen

Überlappung von  $p$ -Orbitalen entlang der Bindungsachse:  
 $\sigma$ -Molekülorbitale

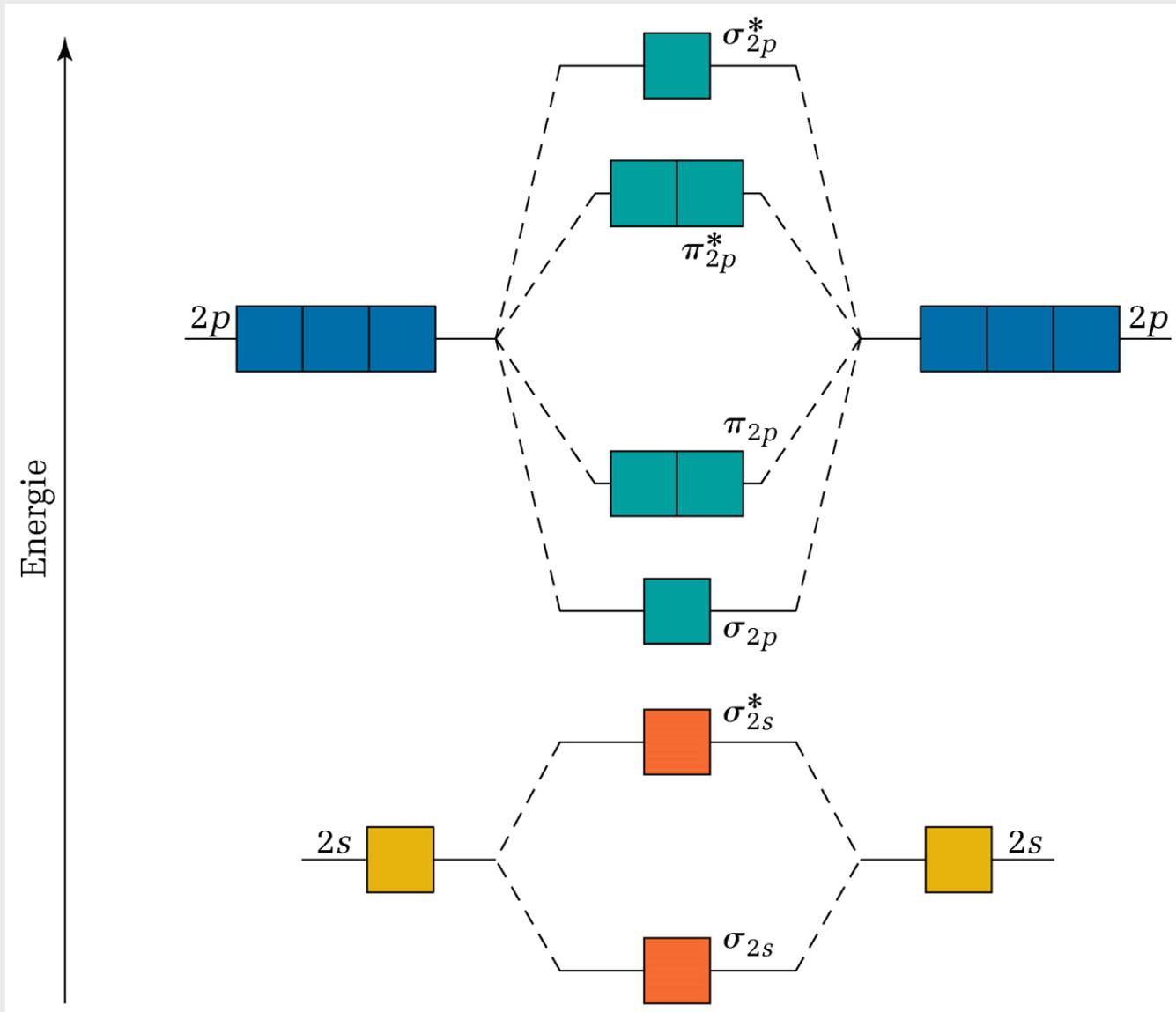


# Bildung von Molekülorbitalen

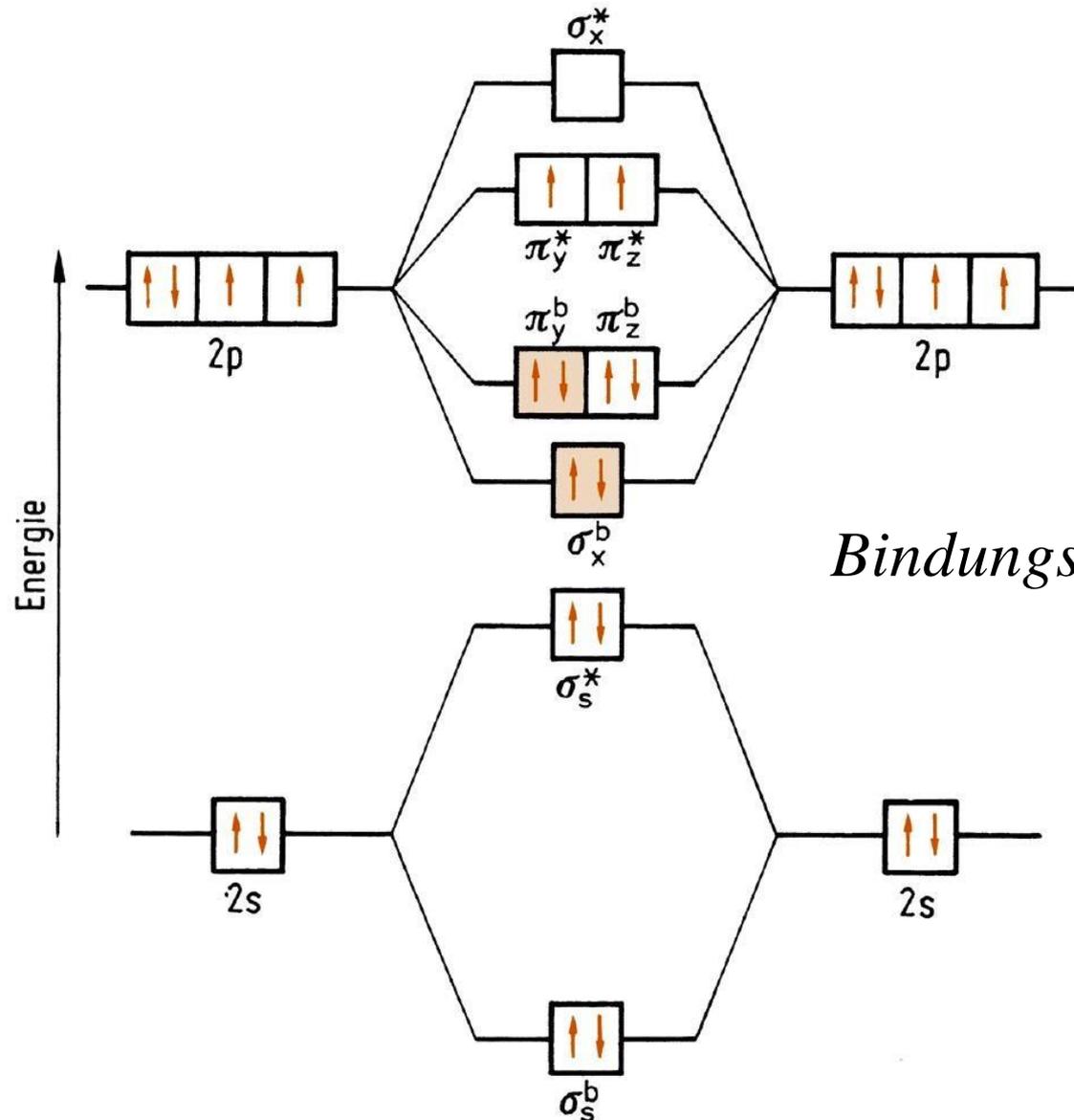
Überlappung von  $p$ -Orbitalen ober- und unterhalb der Bindungsachse:  $\pi$ -Molekülorbitale



# Molekülorbitale für $X_2$ -Moleküle der 2. Periode



# Elektronenbesetzung – Beispiel O<sub>2</sub>



$$\text{Bindungsordnung} = \frac{8 - 4}{2} = 2$$

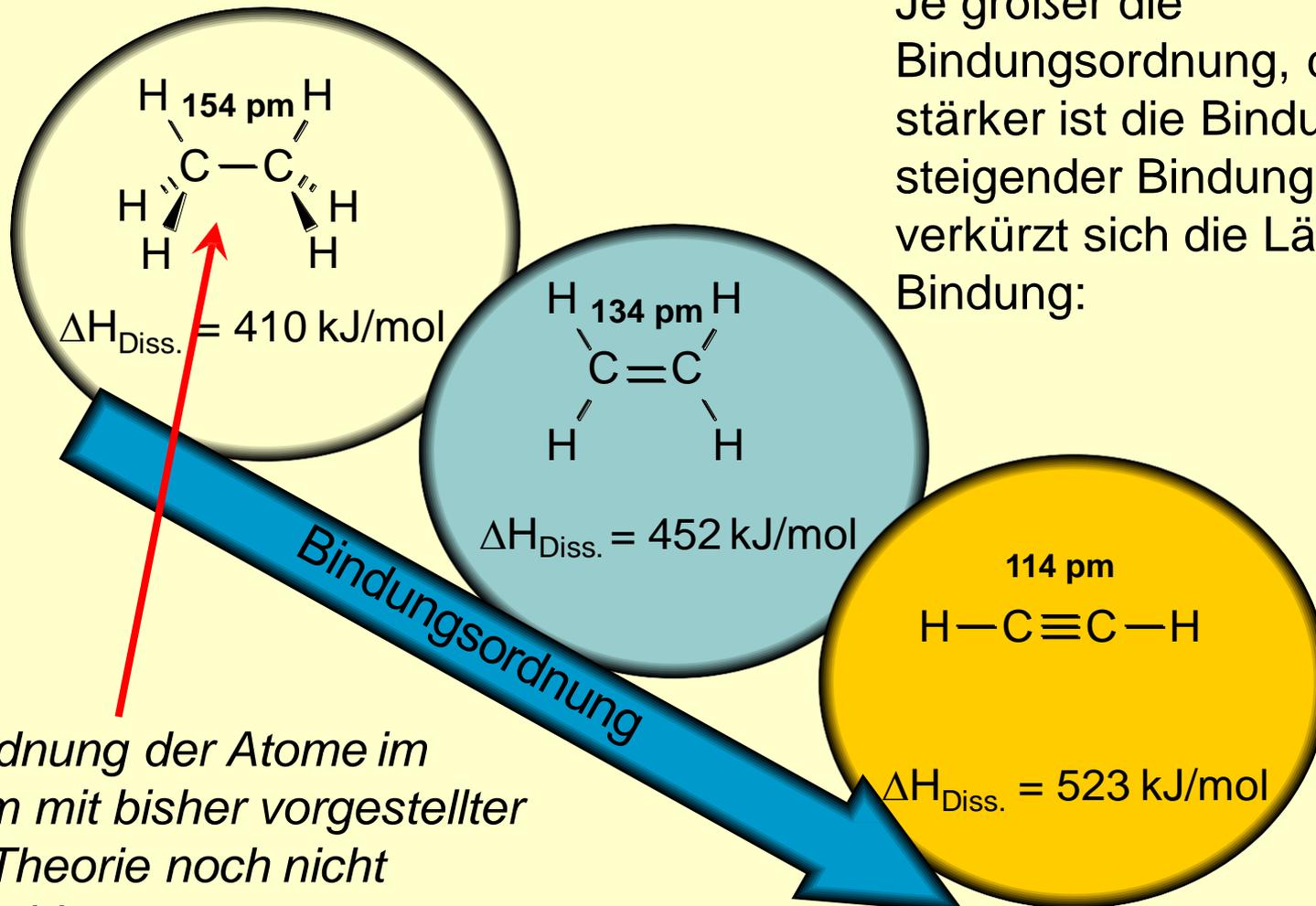
## Kovalente Bindungstypen

In einer **Einfachbindung** besetzen zwei Elektronen ein bindendes  $\sigma$ -Molekülorbital  $\rightarrow$  **2 Elektronen**

In einer **Doppelbindung** besetzt ein bindendes Elektronenpaar ein  $\sigma$ -Molekülorbital, ein weiteres Elektronenpaar ein  $\pi$ -Molekülorbital  $\rightarrow$  **4 Elektronen**

In einer **Dreifachbindung** besetzt ein bindendes Elektronenpaar ein  $\sigma$ -Molekülorbital, zwei weitere Elektronenpaare jeweils ein  $\pi$ -Molekülorbital  $\rightarrow$  **6 Elektronen**

# Bindungsordnung - Tendenzen



Je größer die Bindungsordnung, desto stärker ist die Bindung. Mit steigender Bindungsordnung verkürzt sich die Länge einer Bindung:

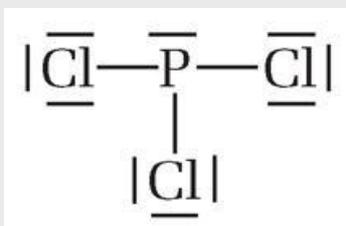
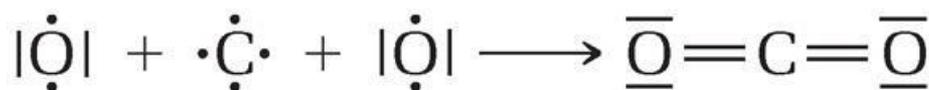
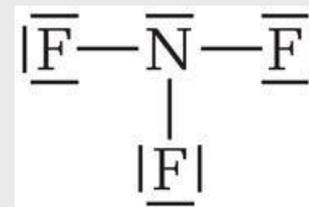
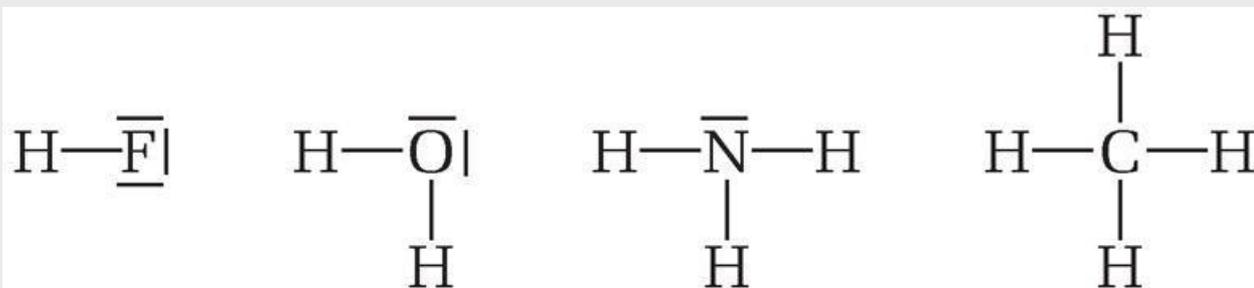
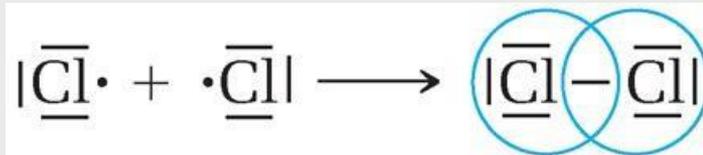
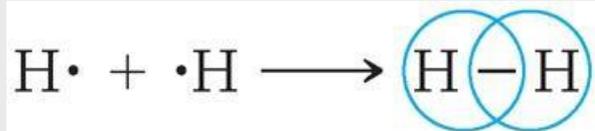
Anordnung der Atome im Raum mit bisher vorgestellter MO-Theorie noch nicht verstehbar

=> **Hybridisierung / VSEPR**

## Konstruktion von Lewis-Formeln – Regeln I

- ein Strich zwischen zwei Elementensymbolen entspricht einem bindenden Elektronenpaar.
- ein Strich neben / über / unter einem Elementensymbol entspricht einem „nichtbindenden / freien“ Elektronenpaar.
- die Bindigkeit folgt für s- und p- Block Elemente der Anzahl ungepaarter Elektronen, also: Fluor – einbindig, Sauerstoff – zweibindig, Stickstoff – dreibindig...
- „Ziel“ ist es für jedes beteiligte Atom, an vier Elektronenpaaren teilzuhaben (Ausnahme H: nur ein Elektronenpaar).
- unter Berücksichtigung der Molekülladung muss die Summe der Valenzelektronen stimmen!

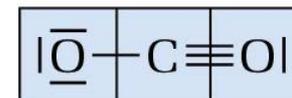
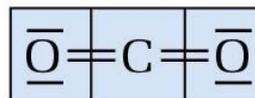
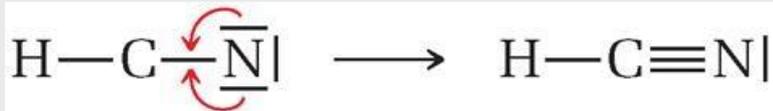
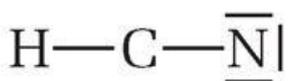
# Konstruktion von Lewis-Formeln – einfache Beispiele



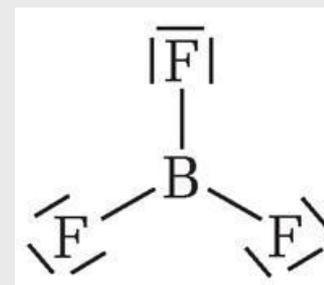
## Konstruktion von Lewis-Formeln – Regeln II

- bei mehreren möglichen Lewis-Formeln ist diejenige mit der größten Anzahl Bindungen und der kleinsten Anzahl Formalladungen zu wählen.
- besitzt ein Atom unbesetzte d-Orbitale, kann die Zahl von acht Außenelektronen, überschritten werden. Für p-Blockelemente ab der 2. Periode werden so dann oft 10 oder 12 Außenelektronen erreicht
- die frühen Elemente der zweiten Periode (Li, Be, B) bilden häufig Verbindungen mit  $<8$  Außenelektronen, man spricht dann von Oktettunterschreitung.
- bei einer ungeraden Zahl von Elektronen werden ungepaarte Elektronen mit einem Punkt gekennzeichnet.<sup>38</sup>

# Konstruktion von Lewis-Formeln – weitere Beispiele



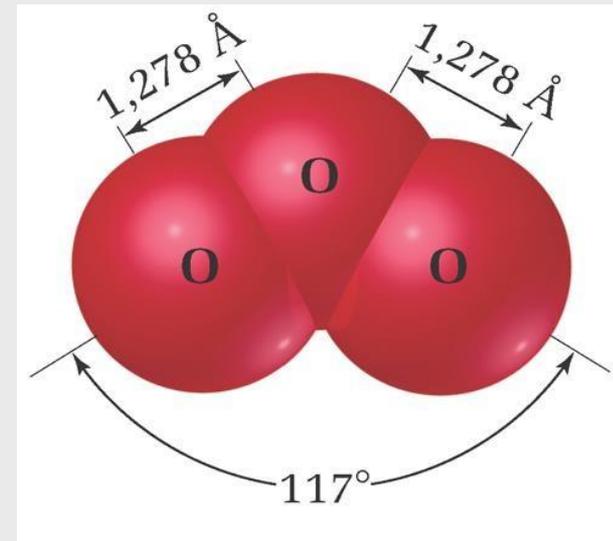
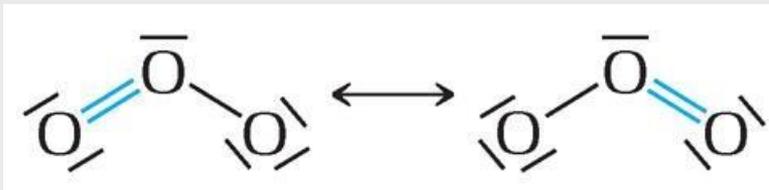
Valenzelektronen:	6	4	6	6	4	6
-(dem Atom zugeordnete Elektronen):	6	4	6	7	4	5
Formalladung:	0	0	0	-1	0	+1



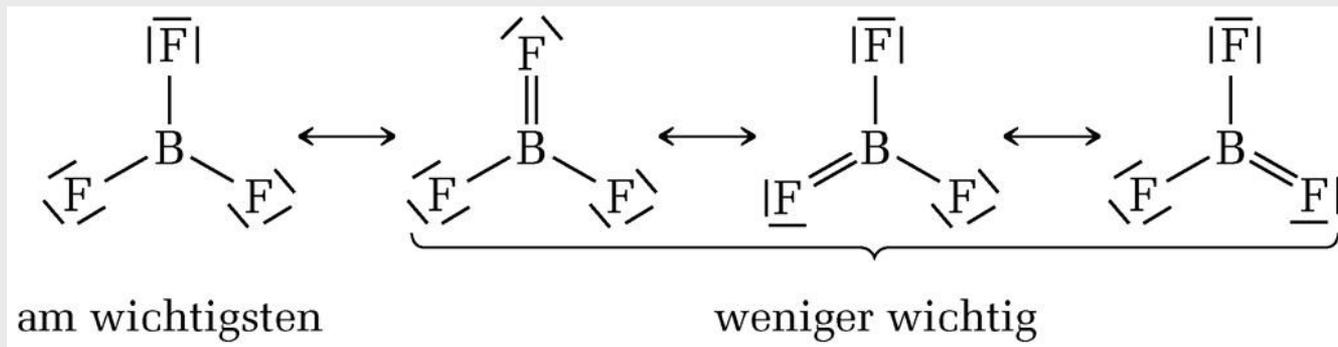
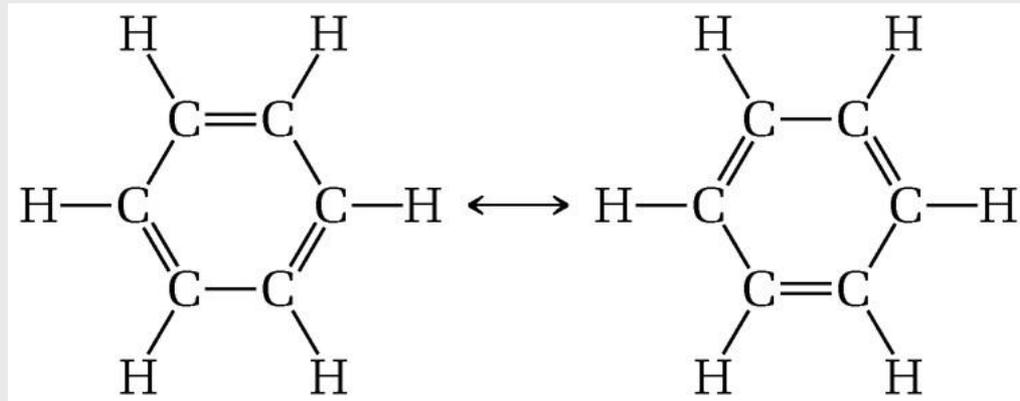
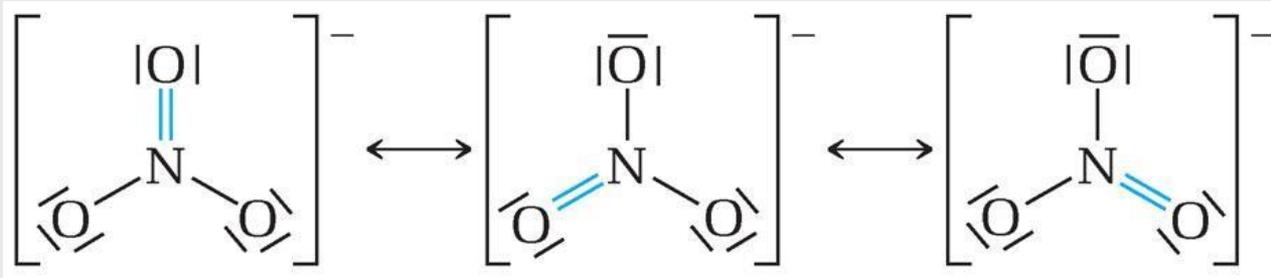
Oktettunterschreitung für Bor

## Konstruktion von Lewis-Formeln – Mesomerie

- manchmal sind mehrere, gleich wahrscheinliche Lewis-Formeln für eine Verbindung möglich. Sie stellen mesomere Grenzstrukturen der Bindungsverhältnisse dar, die „Wahrheit“ ist oft einer Überlagerung der möglichen Strukturen ähnlich. Beispiel: Ozon ( $O_3$ )



# Konstruktion von Lewis-Formeln – Mesomerie



# Wichtige Begriffe

Lewis-Symbol

Ionische Bindung, Coulomb-Wechselwirkung, Ionengitter, Ionenradius

Metallische Bindung, Elektronengas, Legierung

Kovalente Bindung, Molekülorbital, Linearkombination von Atomorbitalen (LCAO),

$\sigma$ - /  $\pi$ - Orbitale, Bindungsordnung von  $X_2$ -Molekülen, Dia- / Paramagnetismus

Konstruktion von Lewis-Formeln, Oktettunterschreitung / -erweiterung