

Oktett-Theorie von Lewis



Gilbert Edward Lewis

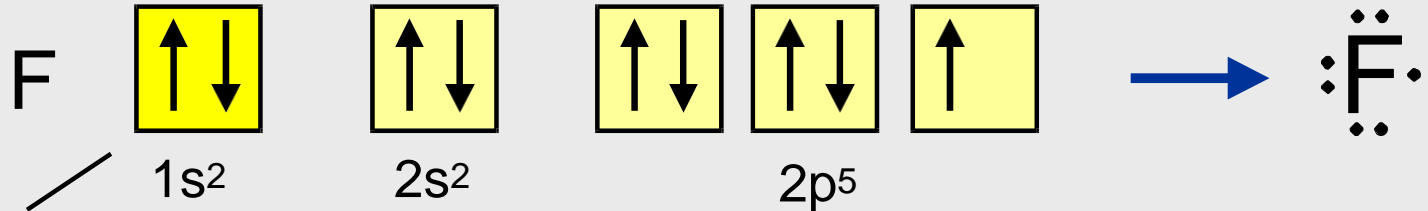
Oktettregel

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

allgemeiner: Edelgasregel

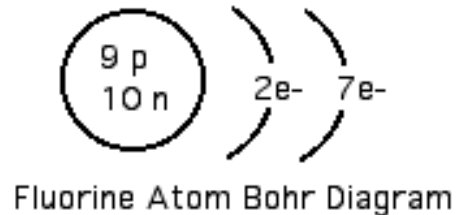
Atome streben durch Vereinigung mit Bindungspartnern an, eine edelgasanaloge Elektronenkonfiguration zu erlangen.

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

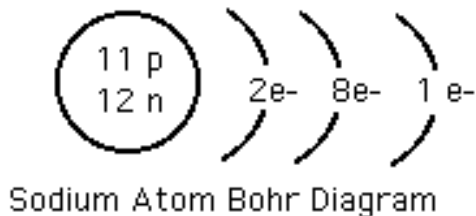
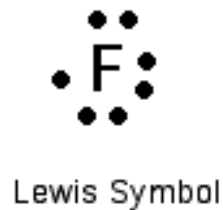


abgeschlossene Schale, Elektronen werden nicht dargestellt

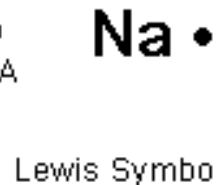
drei Elektronenpaare, ein isoliertes Elektron, Elektronenkonfiguration der äußeren Elektronen



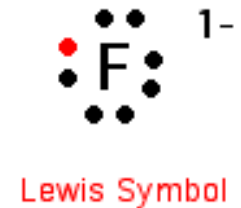
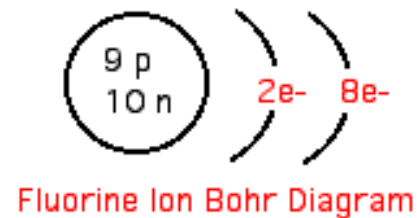
Group 17, VIIA, or 7



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).

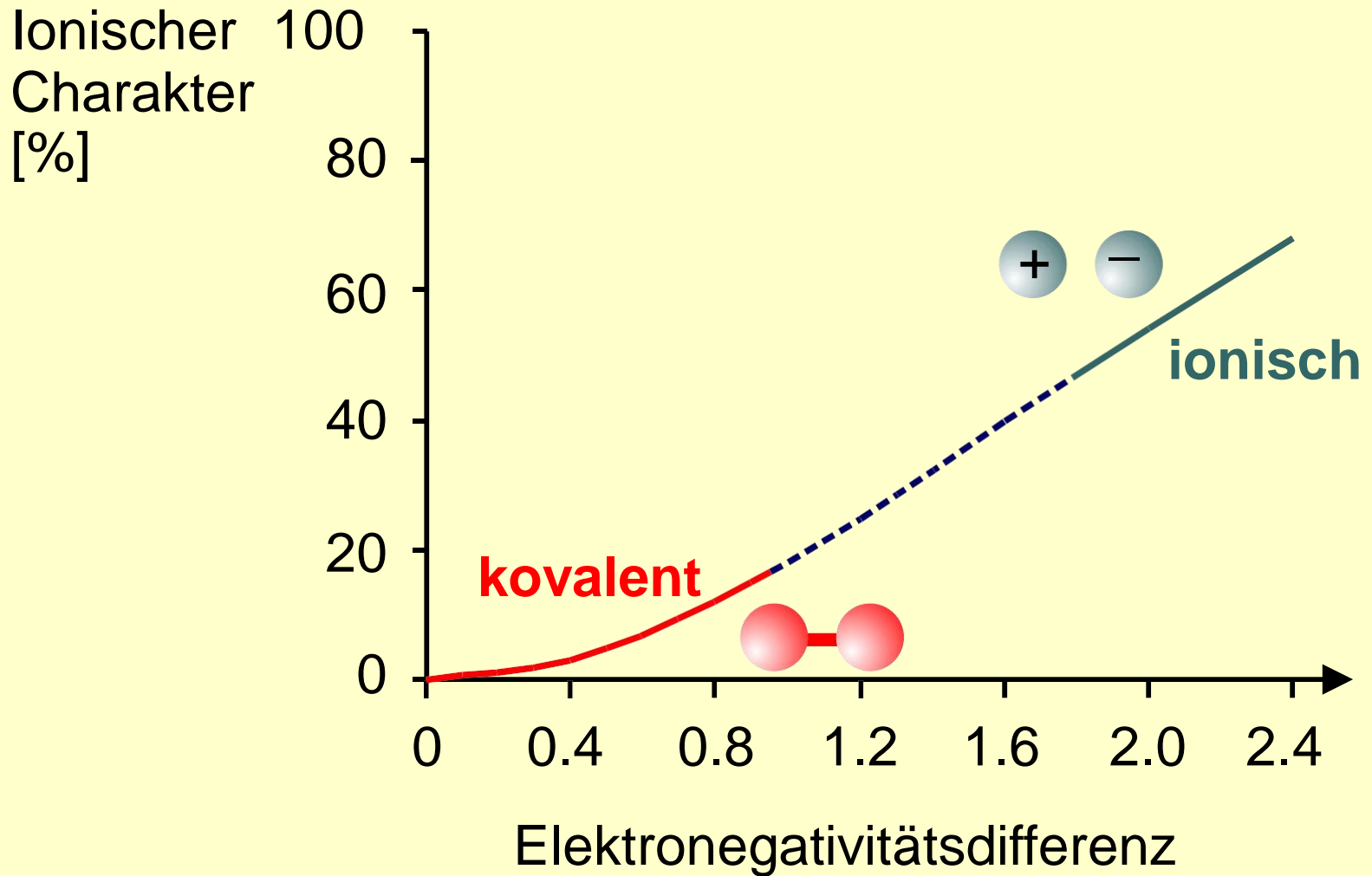
- **metallische Bindung**

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

| 1A 1 | 2A 2 | 8B 8 9 10 | | | | | | | | | | 3A 13 | 4A 14 | 5A 15 | 6A 16 | 7A 17 | 8A 18 |
|----------|----------|--------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 1 H | 4 Be | | | | | | | | | | | 5 B | 6 C | 7 N | 8 O | 9 F | 10 Ne |
| 3 Li | 12 Mg | 3B 3 | 4B 4 | 5B 5 | 6B 6 | 7B 7 | | | | 11B 11 | 12B 12 | 13A 13 | 14A 14 | 15A 15 | 16A 16 | 17A 17 | 18A 18 |
| 9 K | 20 Ca | 21 Sc | 22 Ti | 23 V | 24 Cr | 25 Mn | 26 Fe | 27 Co | 28 Ni | 29 Cu | 30 Zn | 31 Ga | 32 Ge | 33 As | 34 Se | 35 Br | 36 Kr |
| 19 Na | 38 Sr | 39 Y | 40 Zr | 41 Nb | 42 Mo | 43 Tc | 44 Ru | 45 Rh | 46 Pd | 47 Ag | 48 Cd | 49 In | 50 Sn | 51 Sb | 52 Te | 53 I | 54 Xe |
| 37 Rb | 86 Ba | 72 Hf | 73 Ta | 74 W | 75 Re | 76 Os | 77 Ir | 78 Pt | 79 Au | 80 Hg | 81 Tl | 82 Pb | 83 Bi | 84 Po | 85 At | 86 Rn | |
| 55 Cs | 88 Ra | 104 Rf | 105 Db | 106 Sg | 107 Bh | 108 Hs | 109 Mt | 110 Ds | 111 Rg | 112 | 113 | 114 | 115 | 116 | | | |

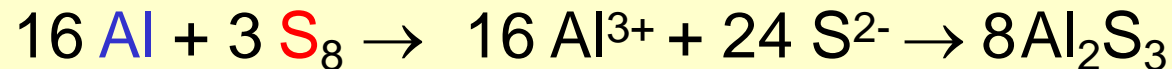
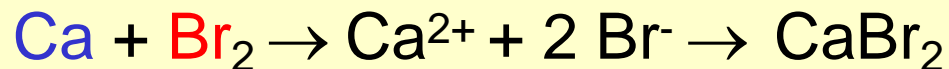
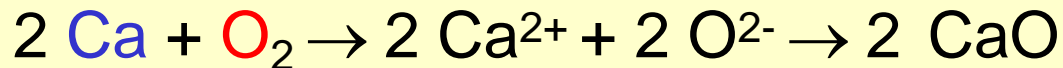
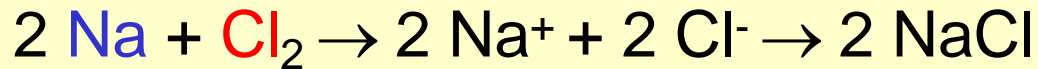
Periodensystem der Elemente

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

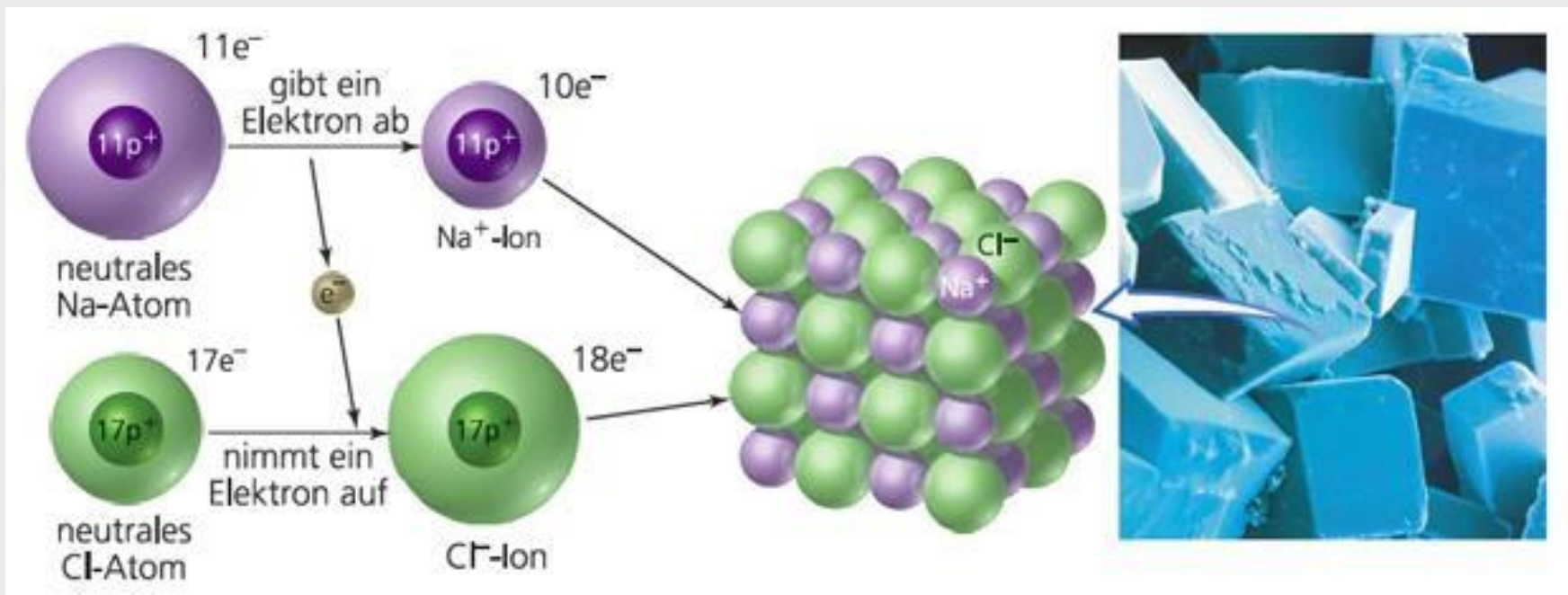
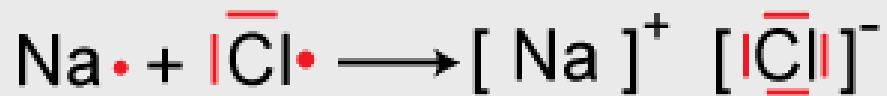
Die ionische Bindung

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

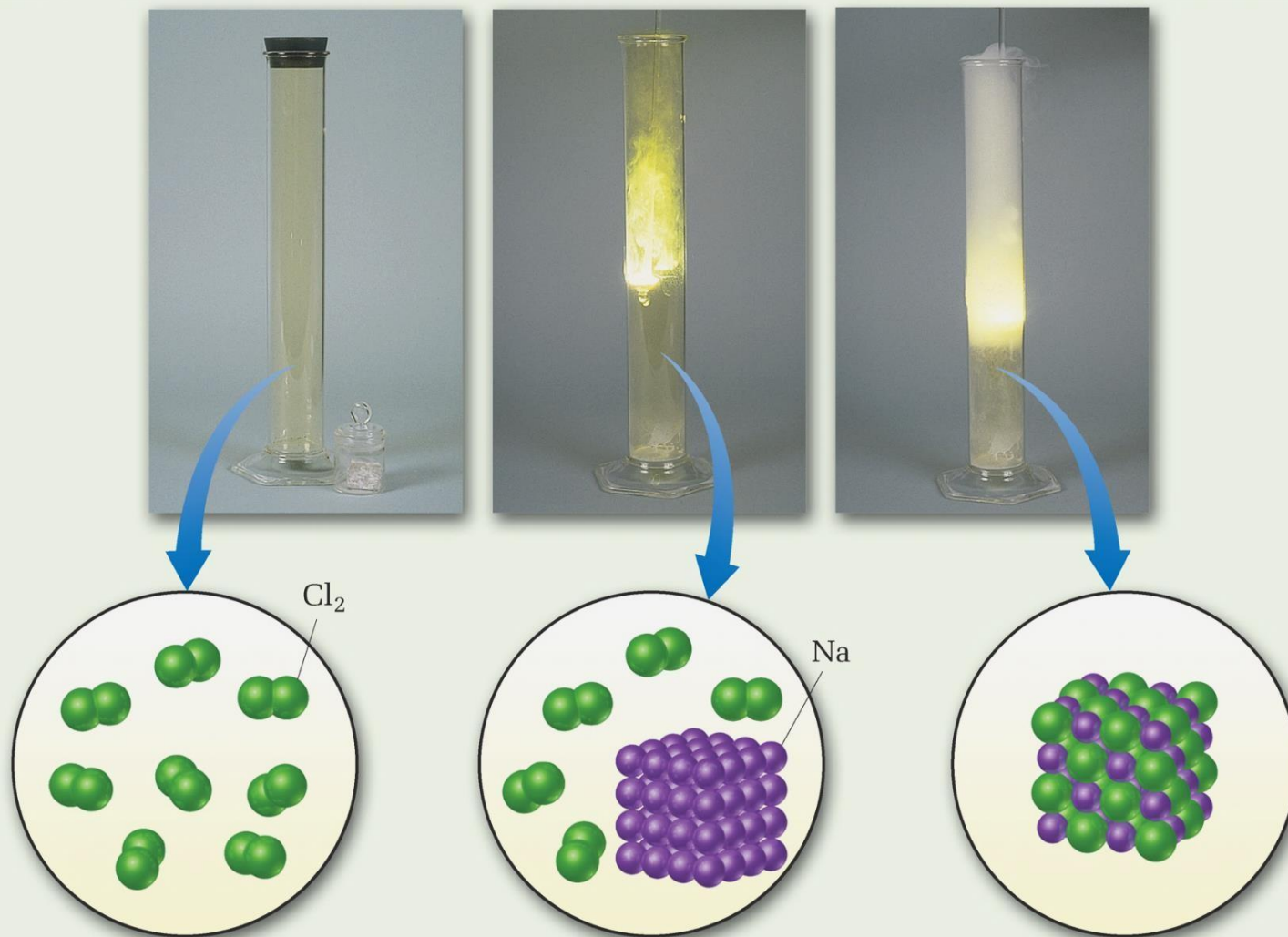
→ oft Reaktion von **Metall** und **Nichtmetall**, Bildung von Ionen



Die ionische Bindung

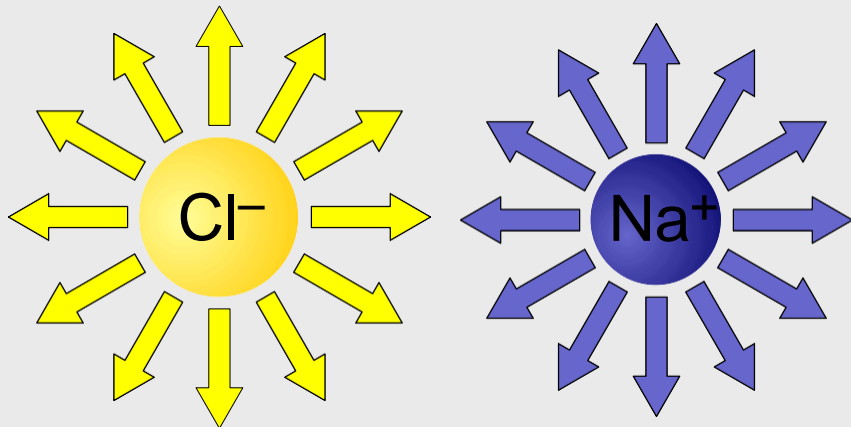


Die ionische Bindung



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.



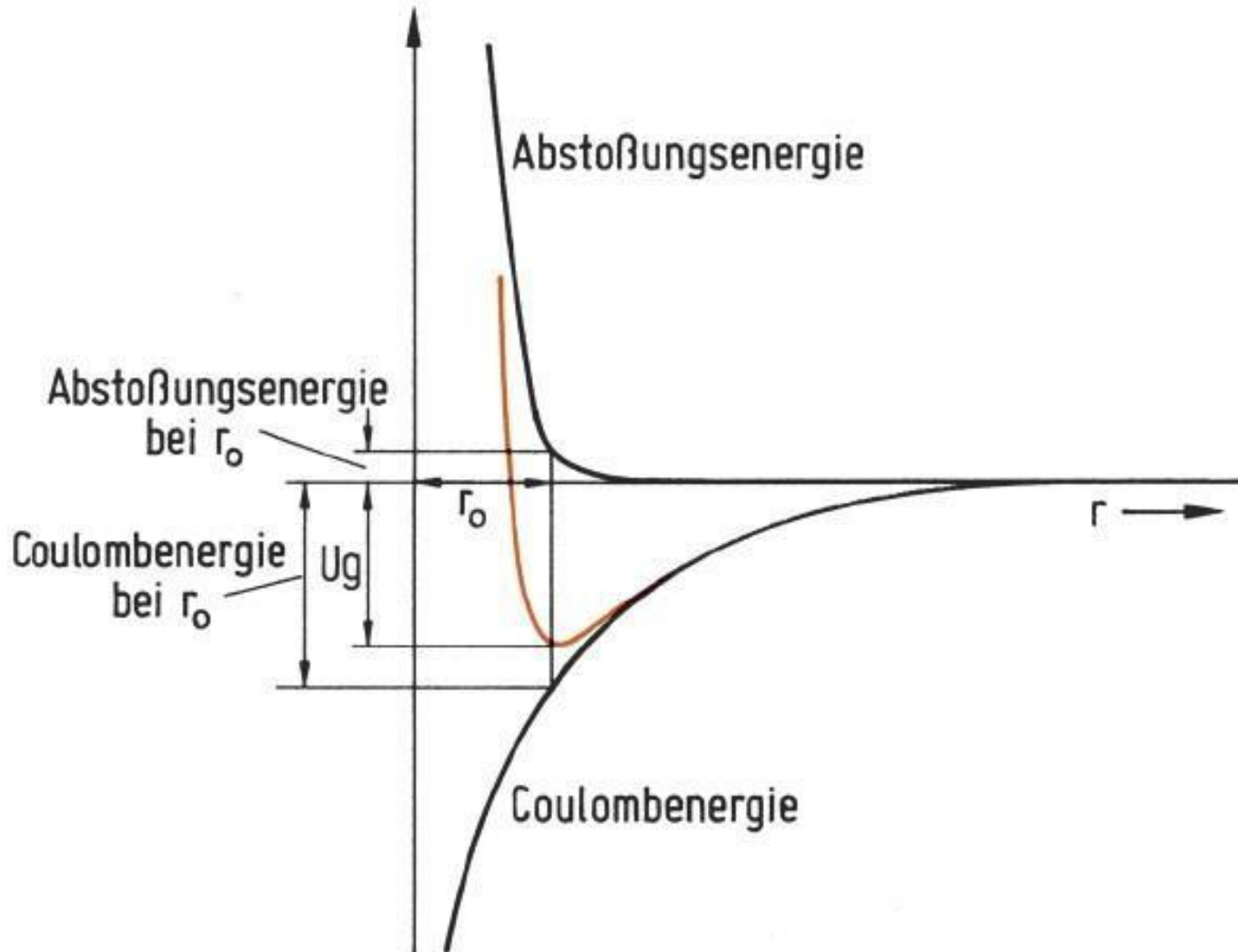
Coulomb'sches Gesetz:

Kraft zwischen zwei Punktladungen

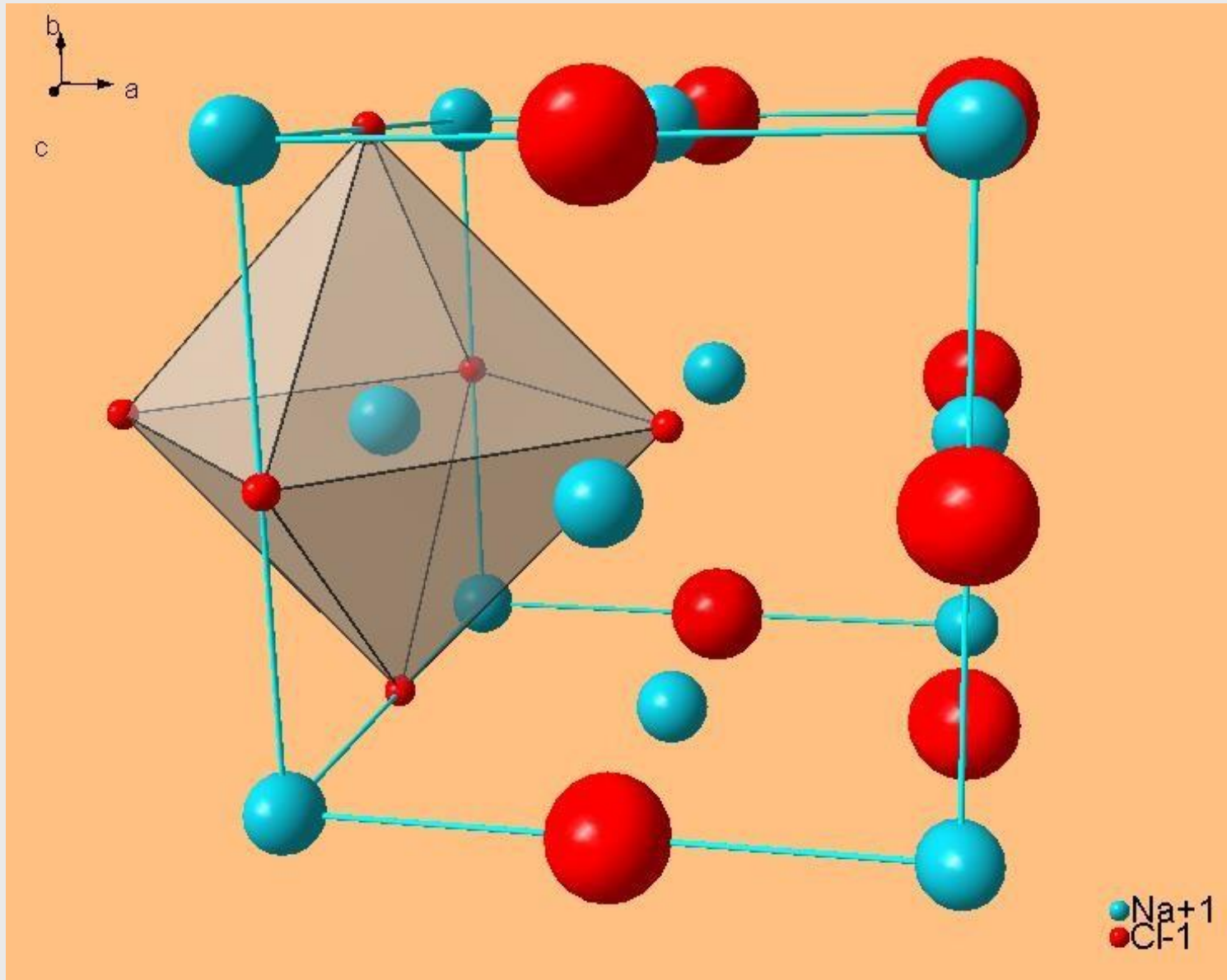
$$\mathbf{F} \propto \frac{Q_1 \cdot Q_2}{r^2}$$

| | |
|------------|------------------------------|
| F | Kraft |
| Q_1, Q_2 | Ladungen der beiden Teilchen |
| r | Teilchenabstand |

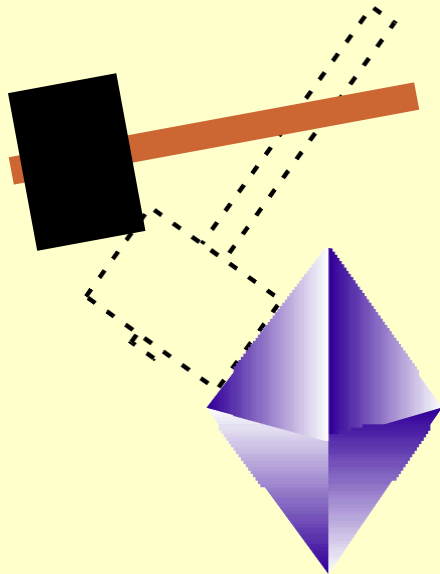
Änderung der potentiellen Energie bei Annäherung zweier entgegengerichtet geladener Ionen



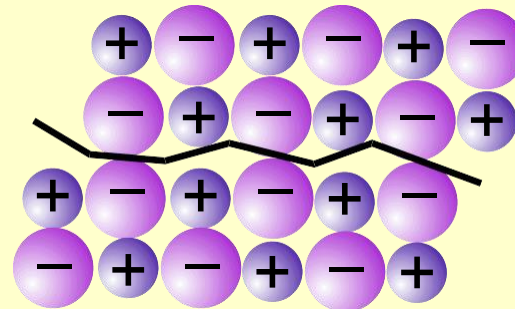
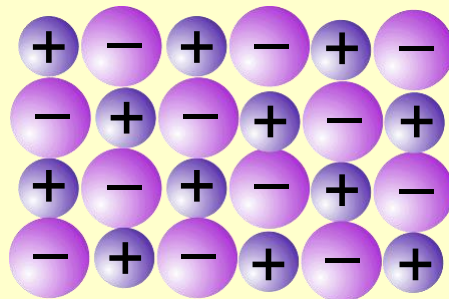
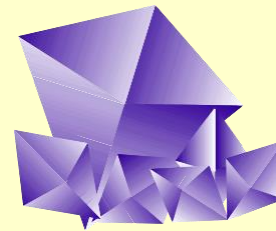
Natriumchlorid als Beispiel für einen Ionenverband



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**

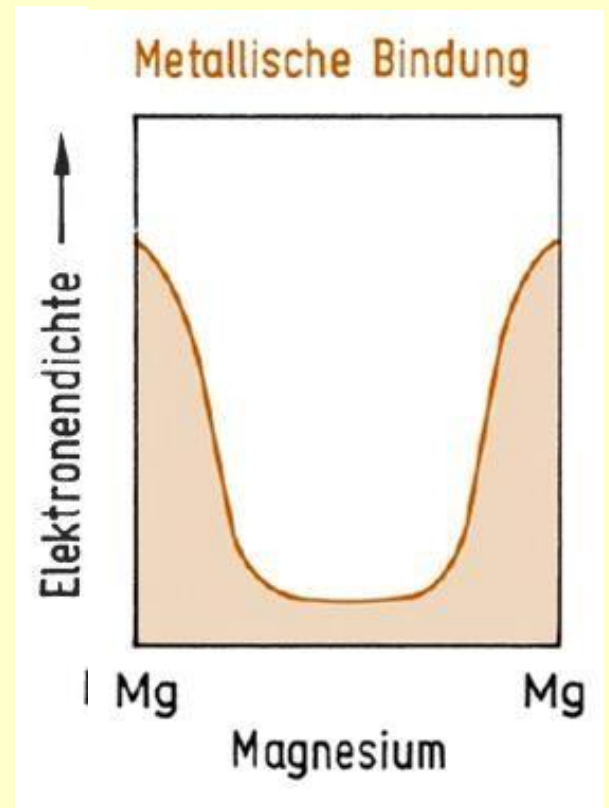
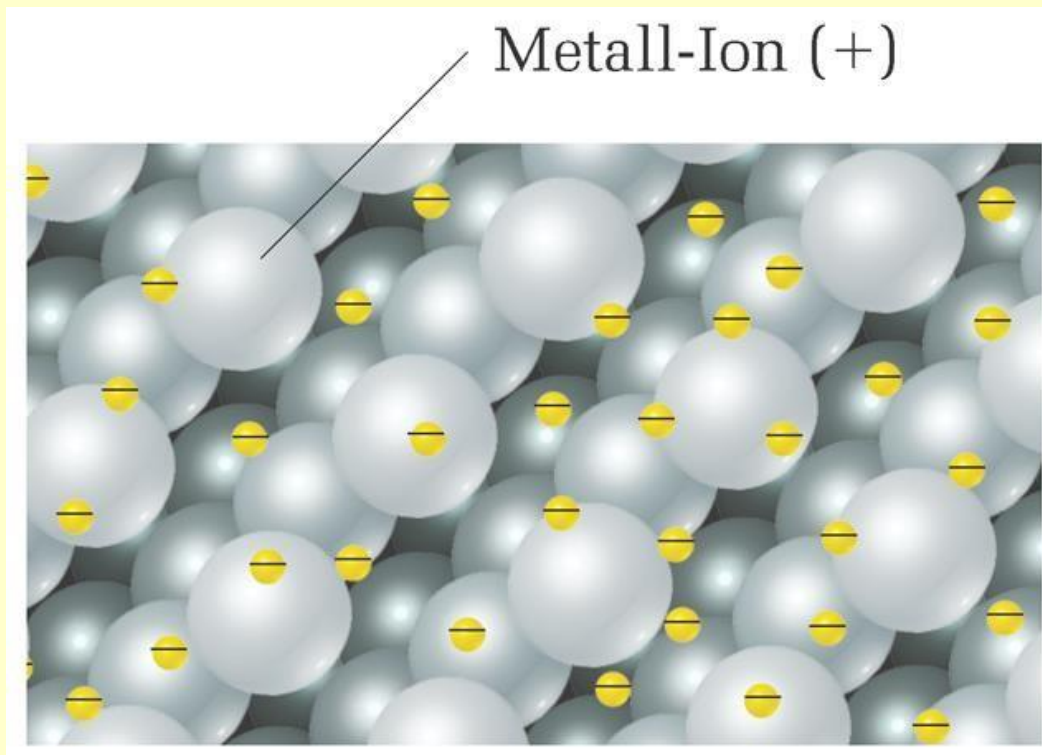
Abgabe der Valenzelektronen. Elektronen werden gleichmäßig zwischen Atomrümpfen verteilt ($\Delta\chi$ klein, nur Metalle beteiligt).

- **kovalente Bindung**

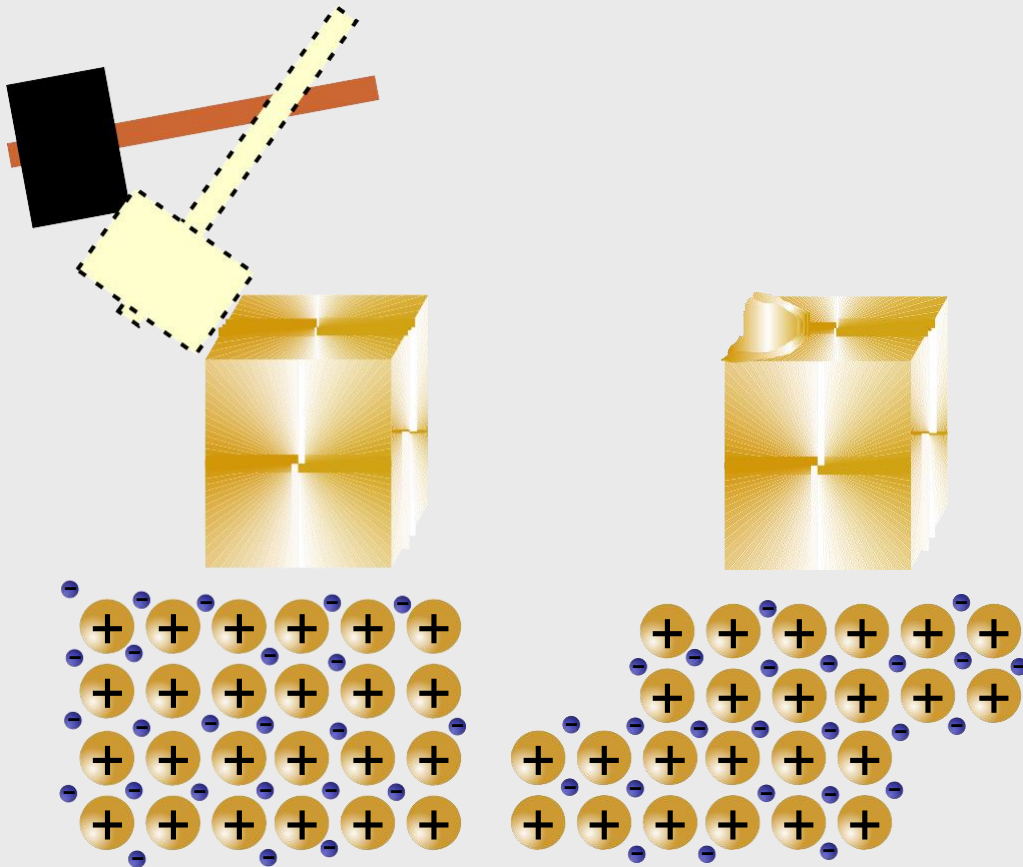
Zusammenhalt zweier oder mehrerer Atome durch Elektronen, die sich die beteiligten Atome „teilen“, Besetzung von Molekülorbitalen ($\Delta\chi$ klein, mindestens ein Nichtmetall an der Bindung beteiligt).

Die metallische Bindung

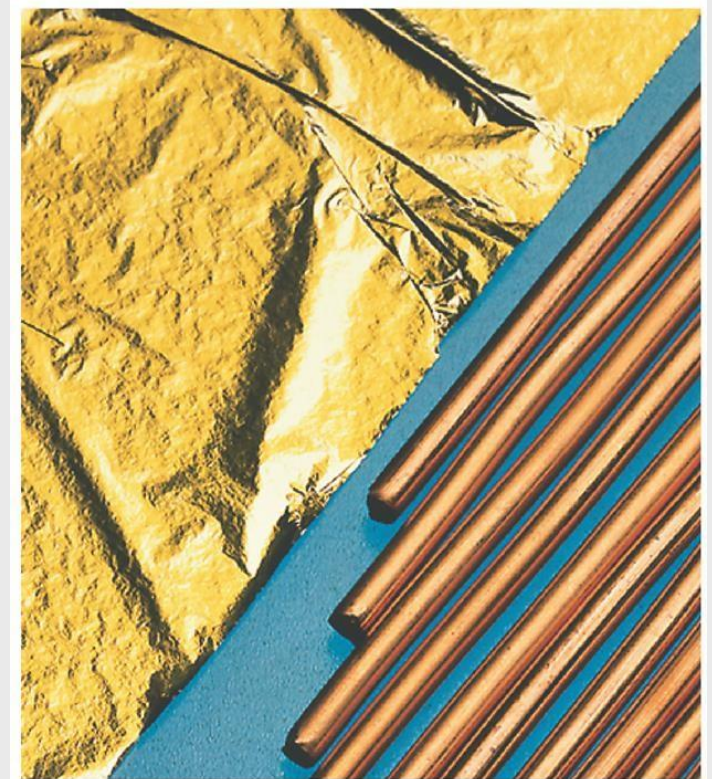
Elektronengas-Modell: kationische Atomrümpfe in einem „Elektronen-See“



Verformbarkeit von Metallen

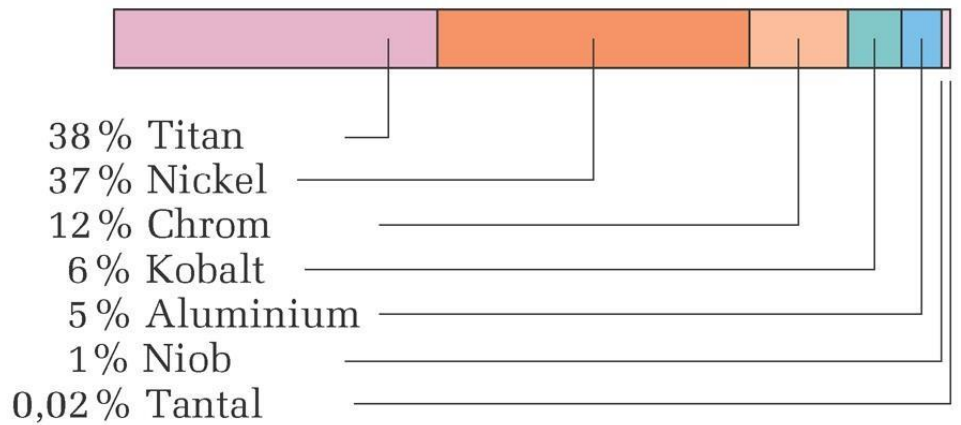


Gold



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.

Zahnamalgame 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**

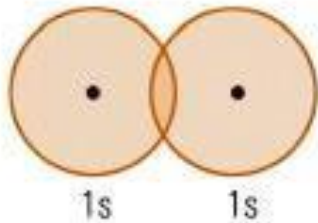
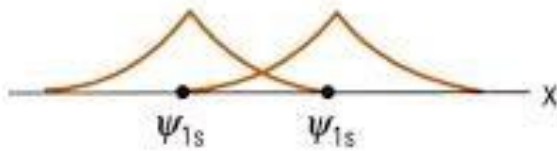
Zusammenhalt zweier oder mehrerer Atome durch Elektronen, die sich die beteiligten Atome „teilen“, Besetzung von Molekülorbitalen ($\Delta\chi$ klein, mindestens ein Nichtmetall an der Bindung beteiligt).

Molekülorbitale (MOs) zweiatomiger Moleküle

n AO



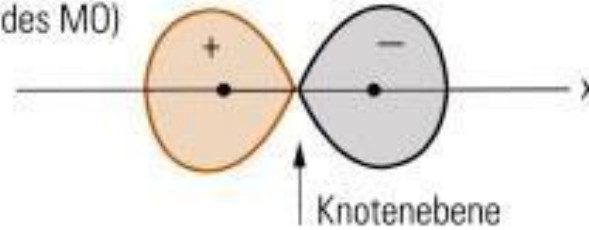
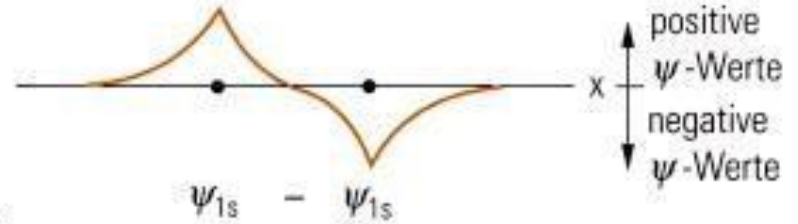
n MO



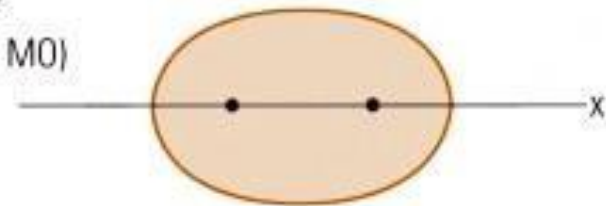
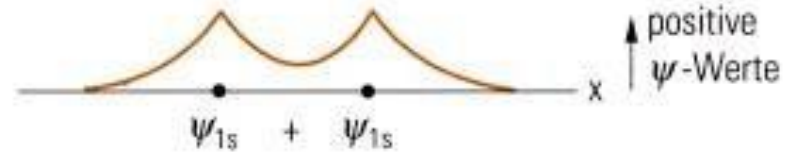
Subtraktion

Addition

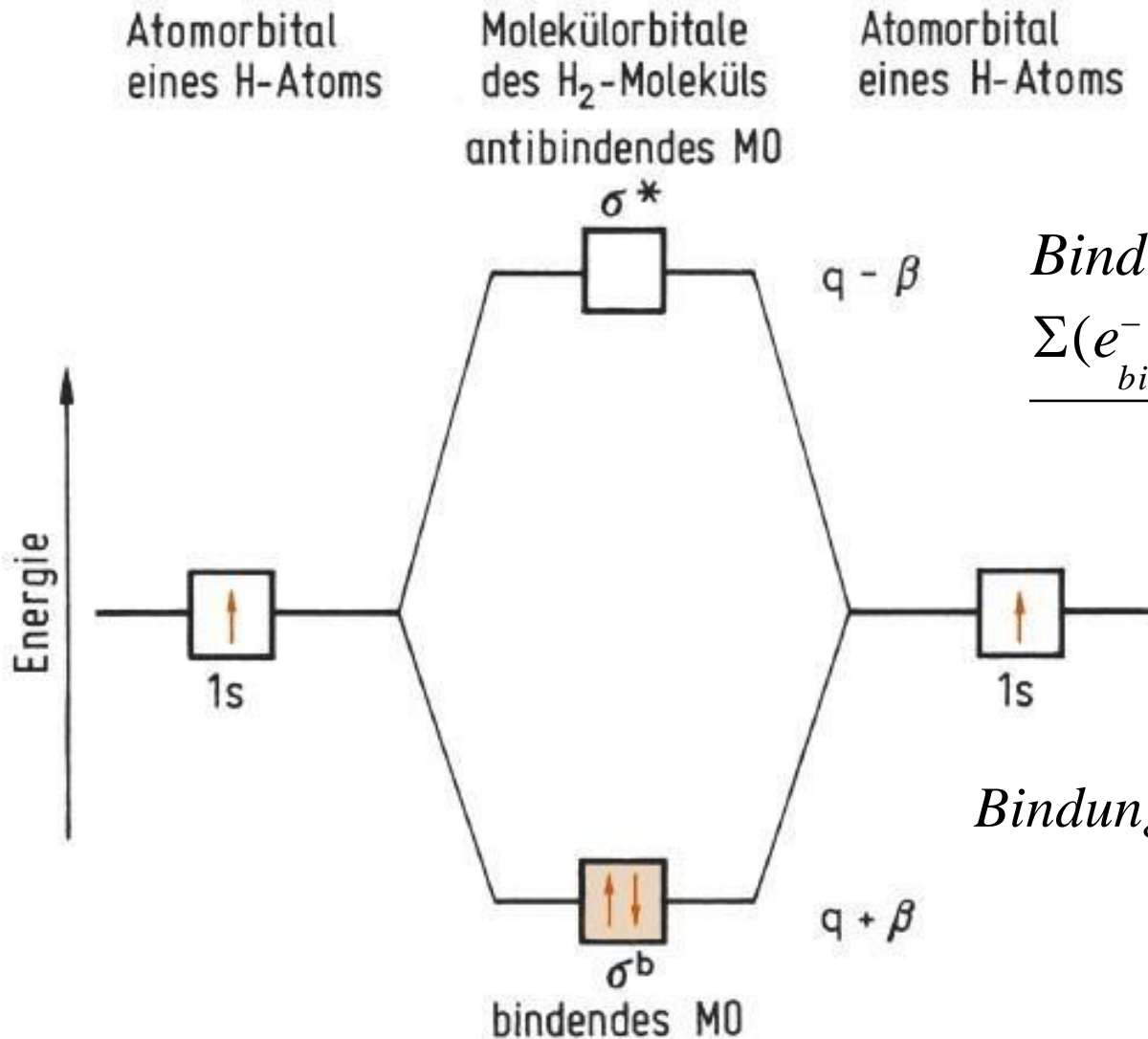
σ_s^* -MO
(antibindendes MO)



σ_s^b -MO
(bindendes MO)



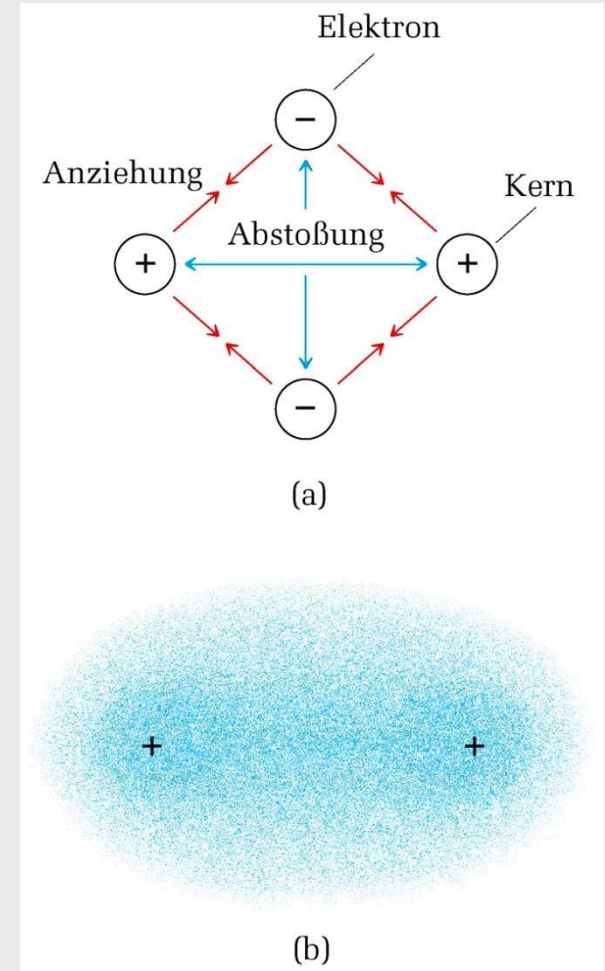
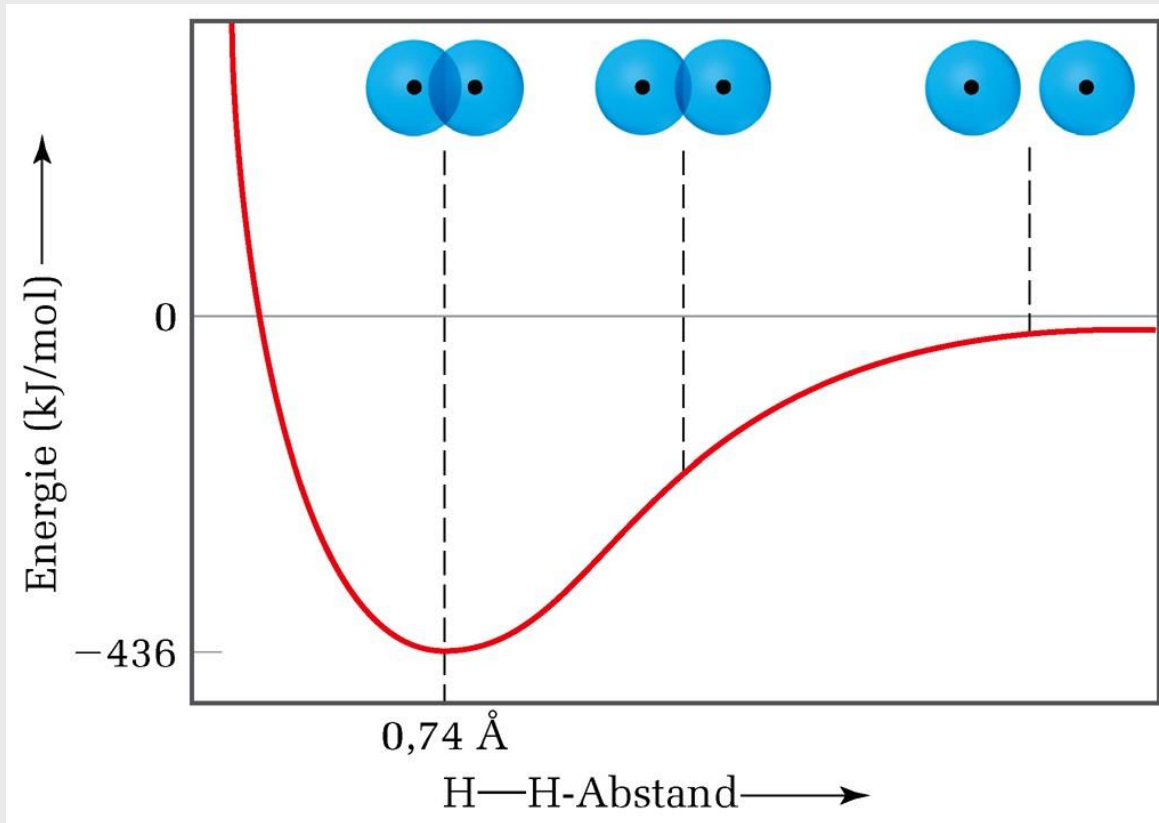
Elektronenkonfiguration des Wasserstoffmoleküls – die Einfachbindung



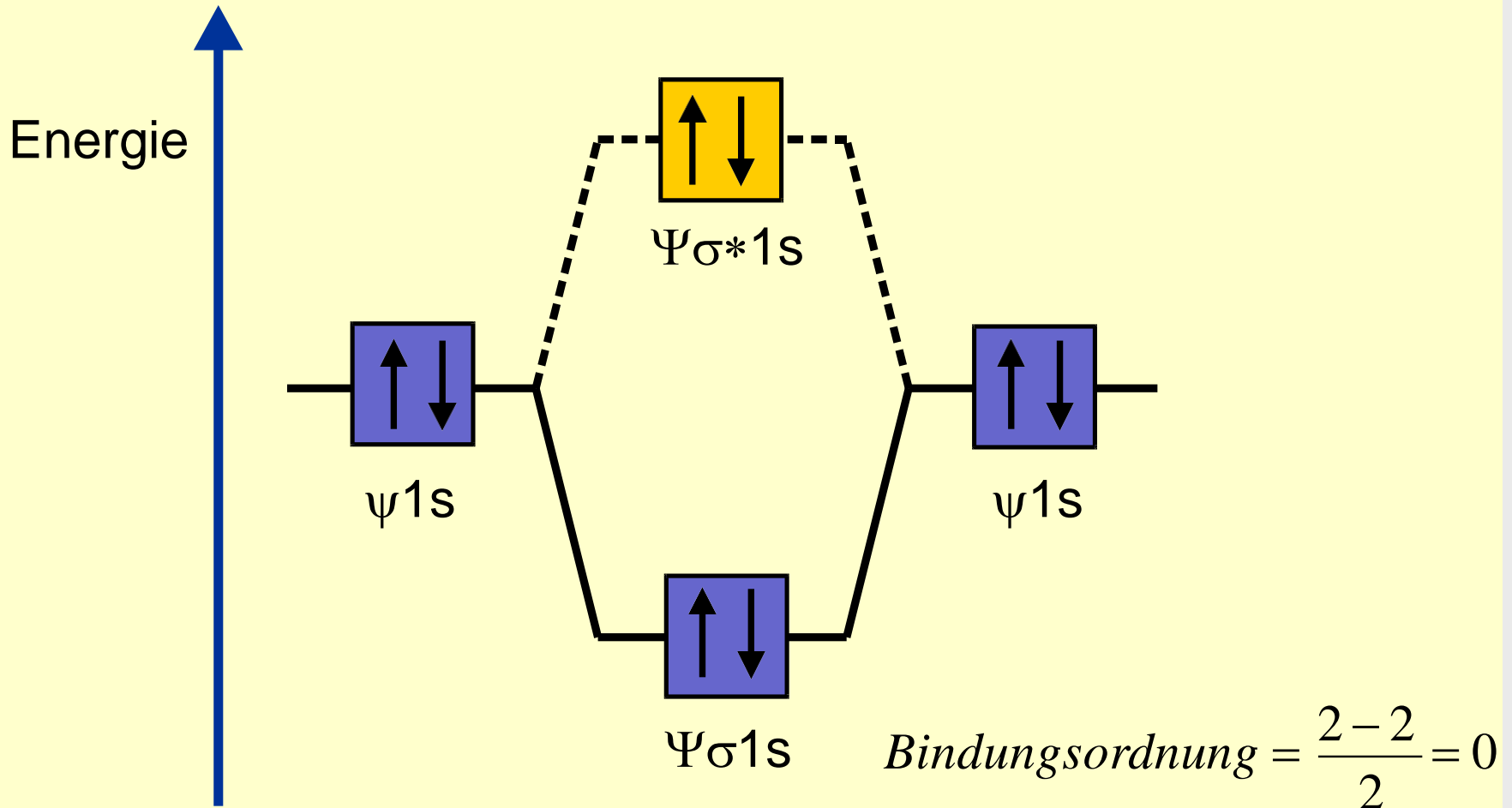
$$\text{Bindungsordnung} = \frac{\Sigma(e^-_{\text{bindend}}) - \Sigma(e^-_{\text{antibindend}})}{2}$$

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

Energie-Abstandsprofil des H₂-Moleküls



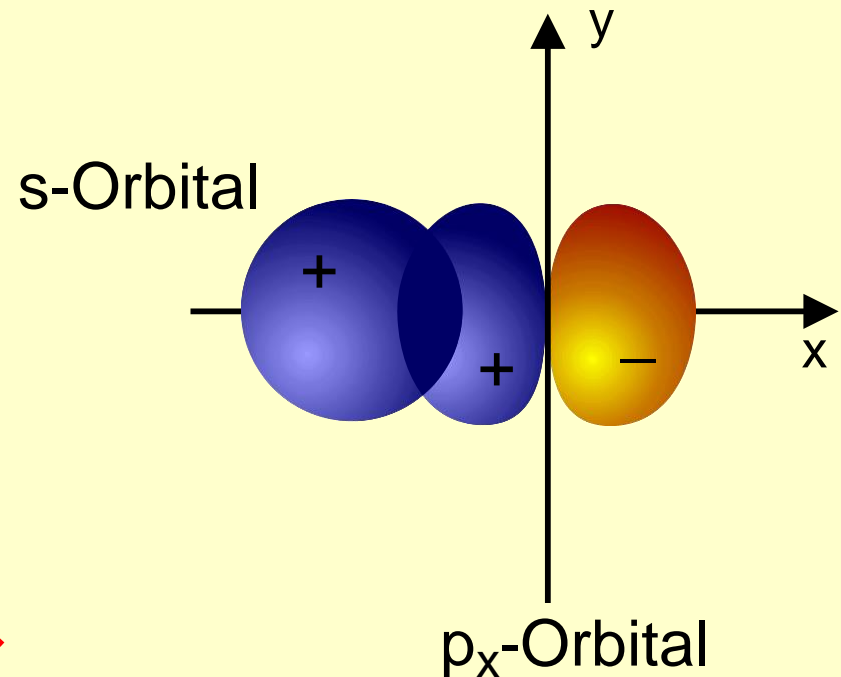
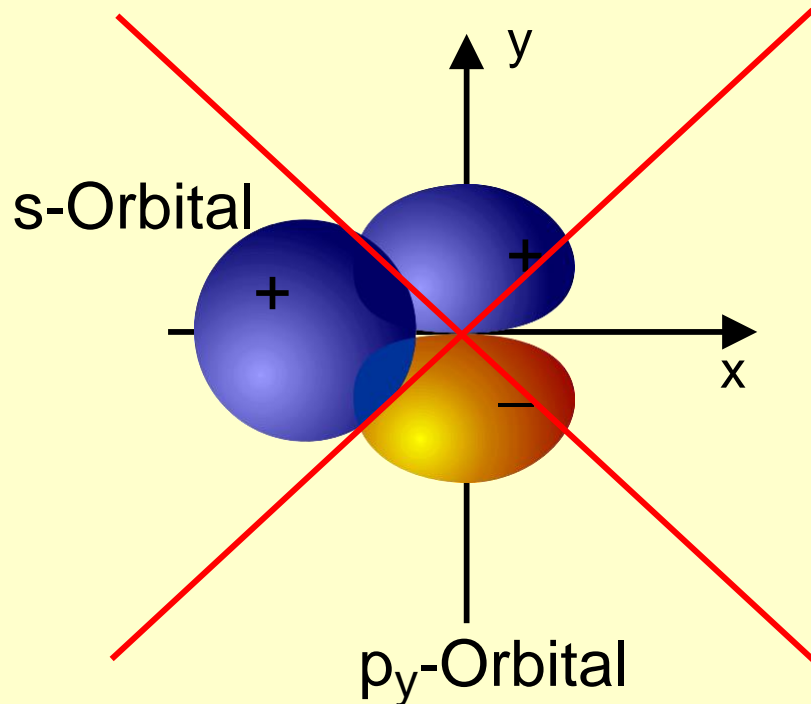
Warum gibt es kein Diheliummolekül, He₂?



Bindende und antibindende Wechselwirkungen heben sich genau auf!

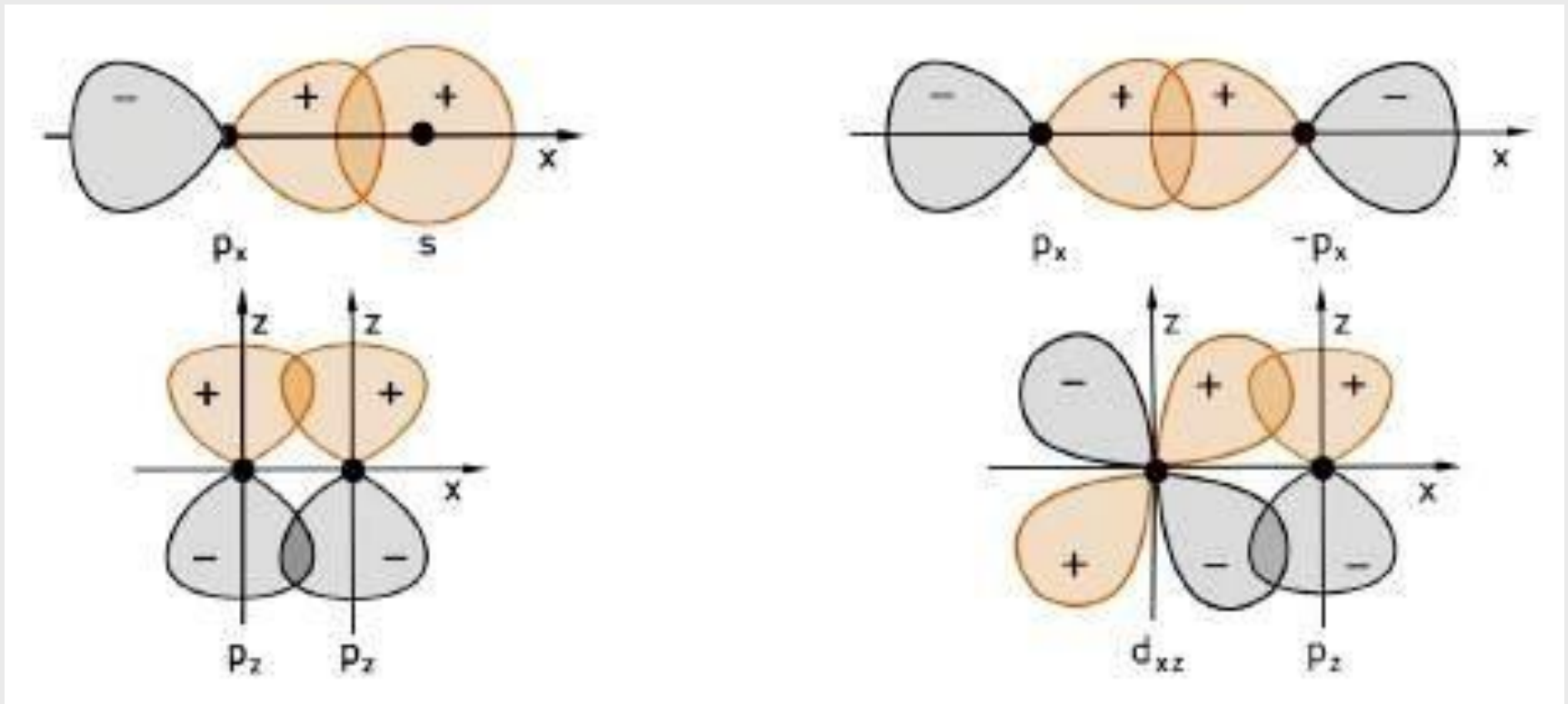
Bildung von Molekülorbitalen - Voraussetzungen

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



Bildung von Molekülorbitalen

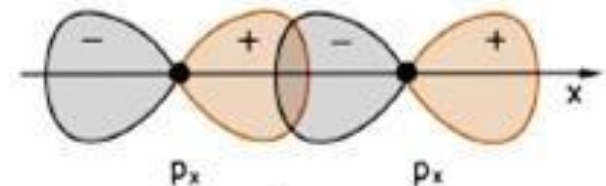
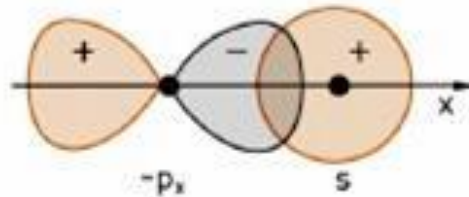
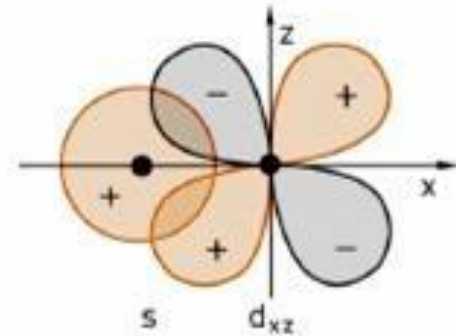
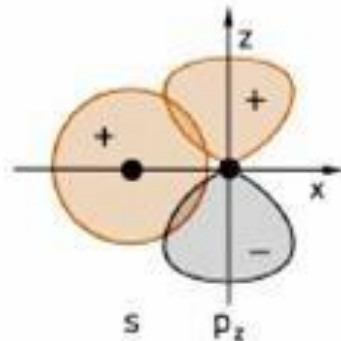
*energetisch günstige Überlappung von MOs –
bindende Molekülorbitale:*



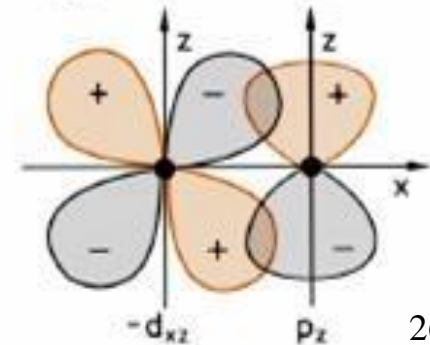
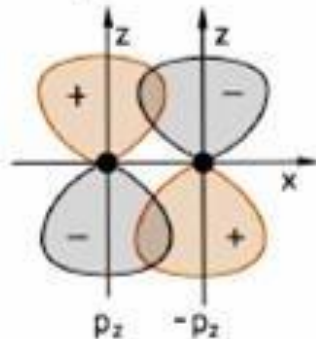
Bildung von Molekülorbitalen

energetisch ungünstige Überlappung von MOs:

nichtbindend

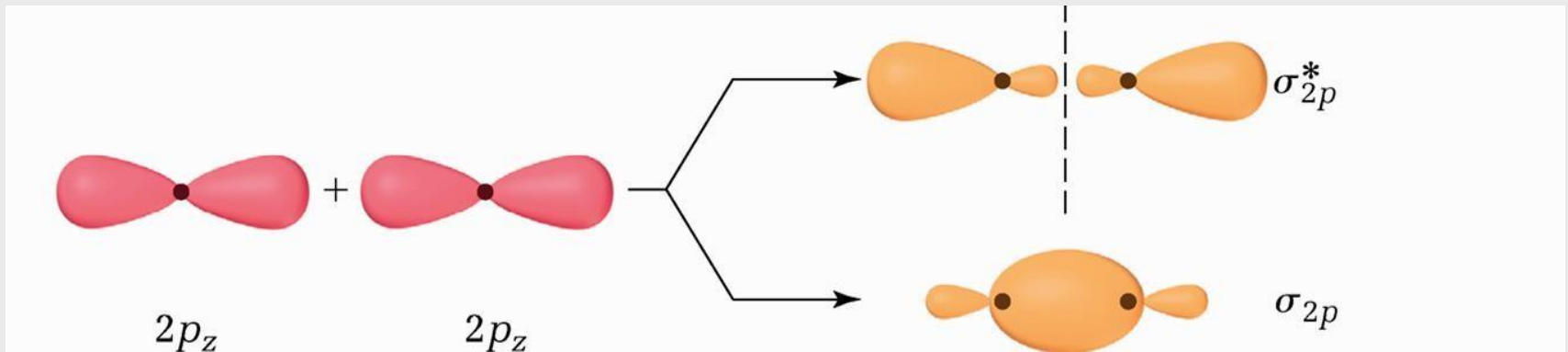


antibindend



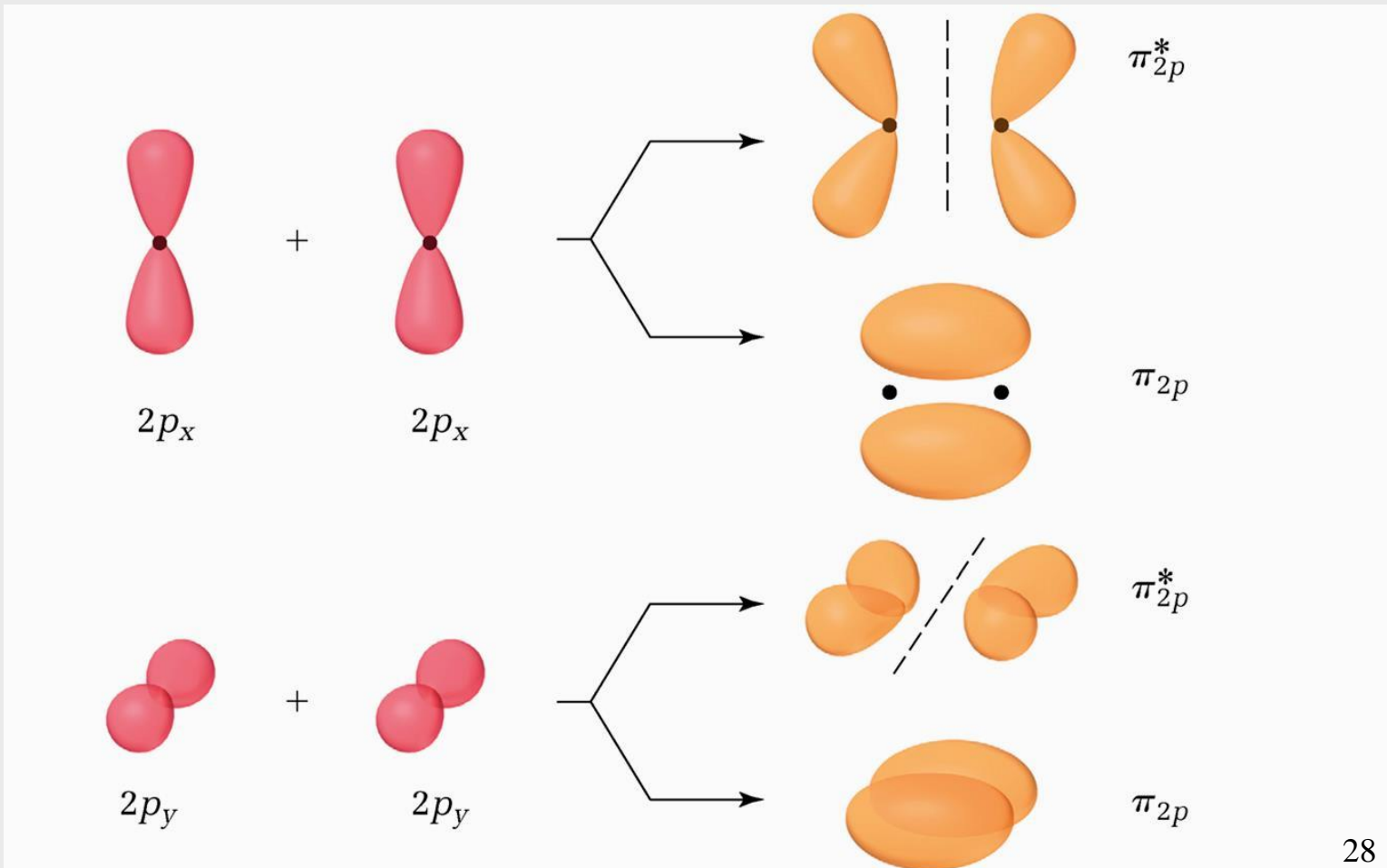
Bildung von Molekülorbitalen

Überlappung von p -Orbitalen entlang der Bindungsachse:
 σ -Molekülorbitale

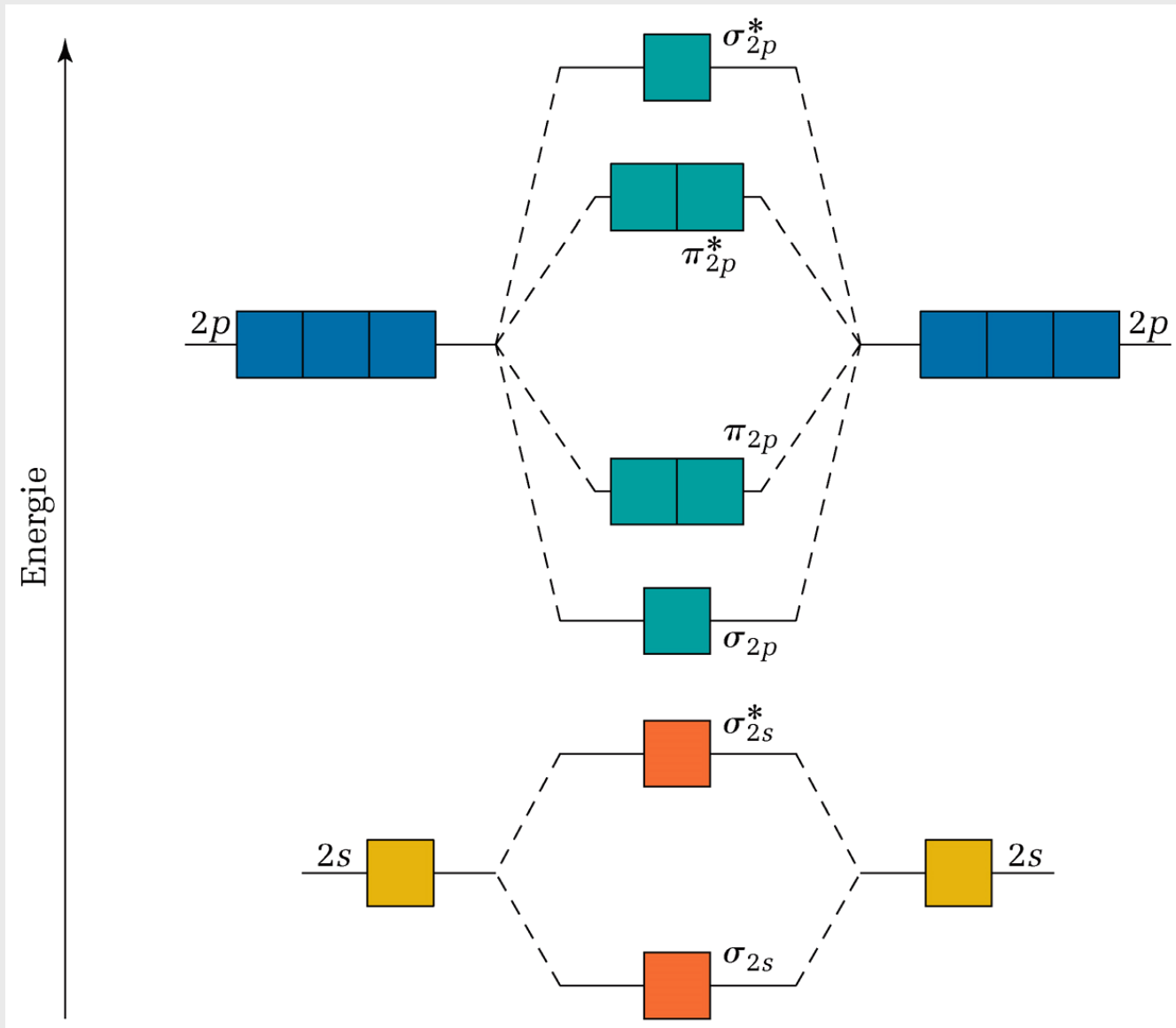


Bildung von Molekülorbitalen

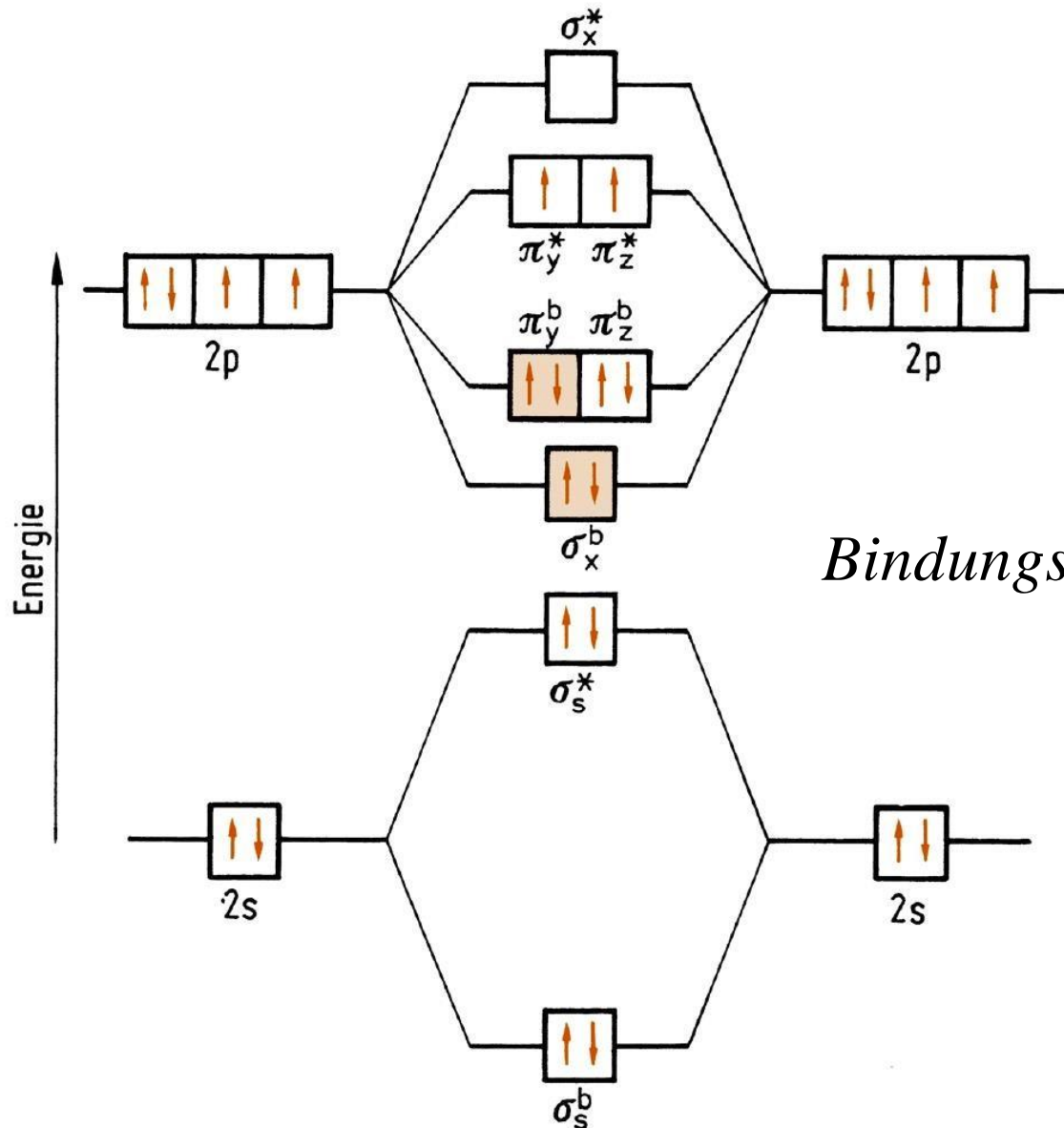
Überlappung von p -Orbitalen ober- und unterhalb der Bindungsachse: π -Molekülorbitale



Molekülorbitale für X_2 -Moleküle der 2. Periode



Elektronenbesetzung – Beispiel O₂



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

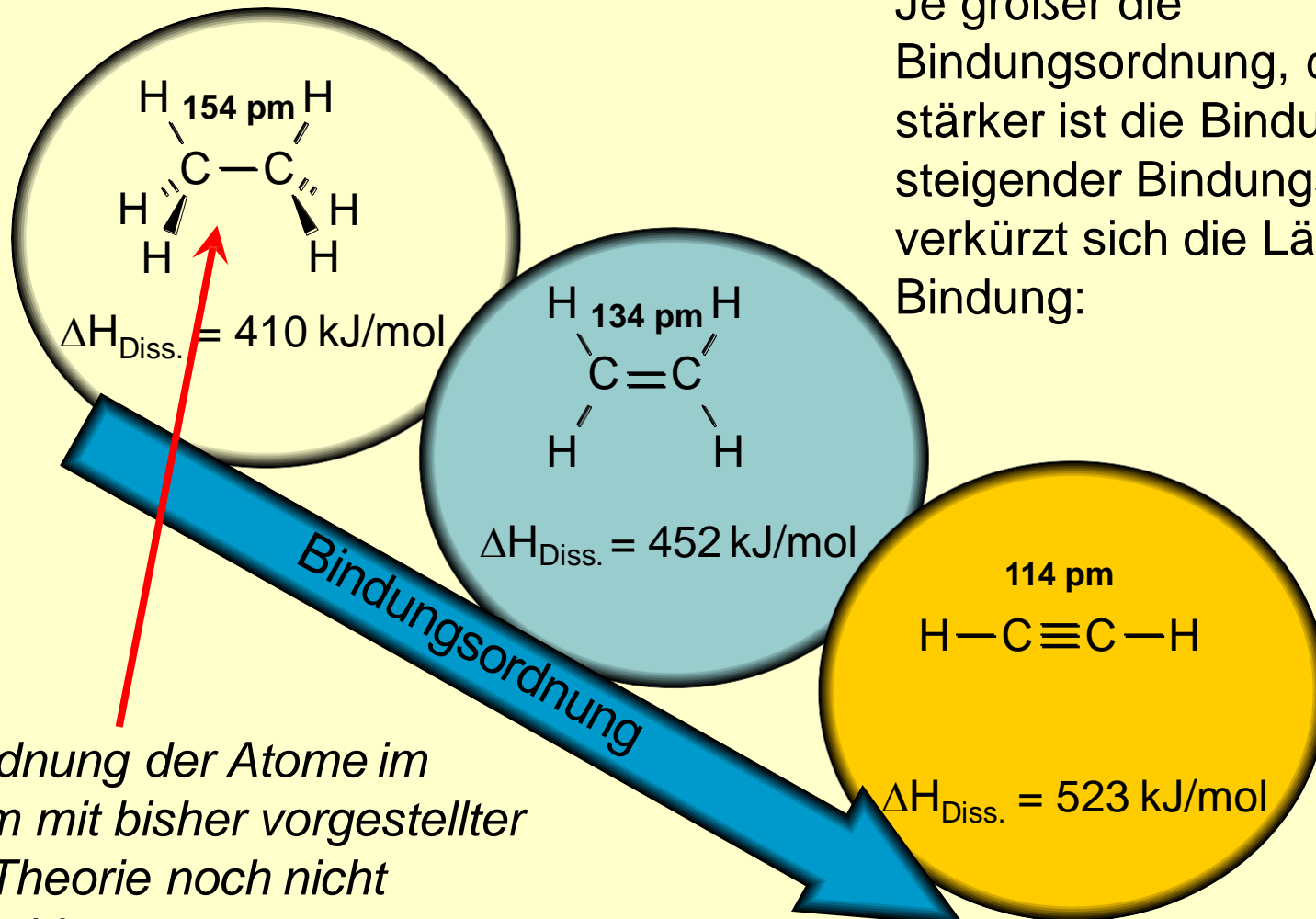
Kovalente Bindungstypen

In einer **Einfachbindung** besetzen zwei Elektronen ein bindendes σ -Molekülorbital → **2 Elektronen**

In einer **Doppelbindung** besetzt ein bindendes Elektronenpaar ein σ -Molekülorbital, ein weiteres Elektronenpaar ein π -Molekülorbital → **4 Elektronen**

In einer **Dreifachbindung** besetzt ein bindendes Elektronenpaar ein σ -Molekülorbital, zwei weitere Elektronenpaare jeweils ein π -Molekülorbital → **6 Elektronen**

Bindungsordnung - Tendenzen



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

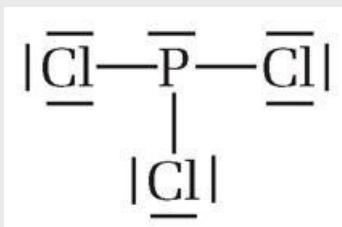
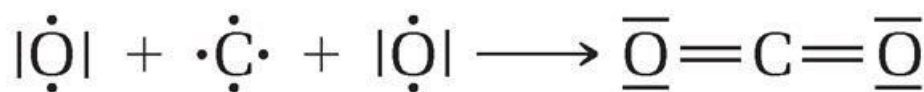
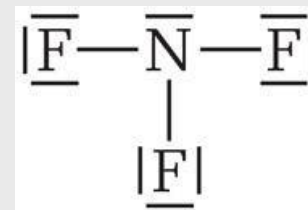
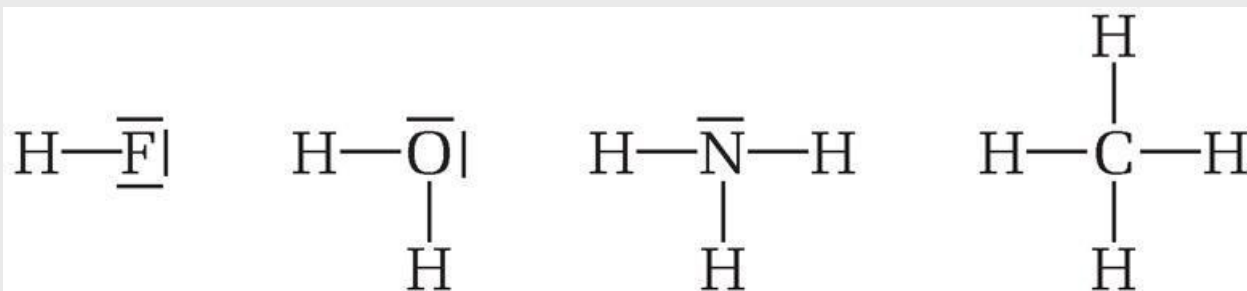
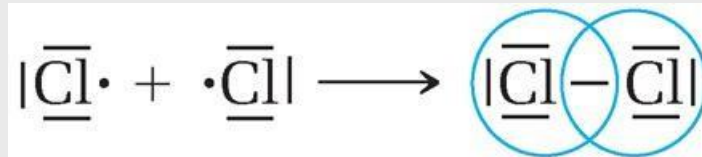
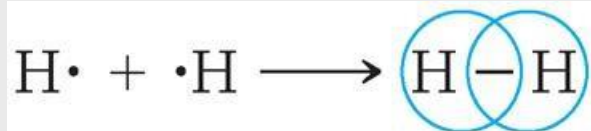
Anordnung der Atome im Raum mit bisher vorgestellter MO-Theorie noch nicht verstehbar

=> **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!

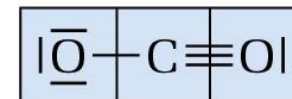
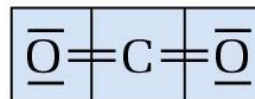
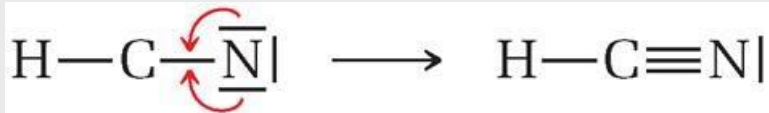
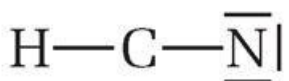
Konstruktion von Lewis-Formeln – einfache Beispiele



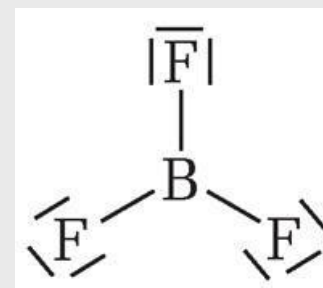
Konstruktion von Lewis-Formeln – Regeln II

- 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.³⁸

Konstruktion von Lewis-Formeln – weitere Beispiele



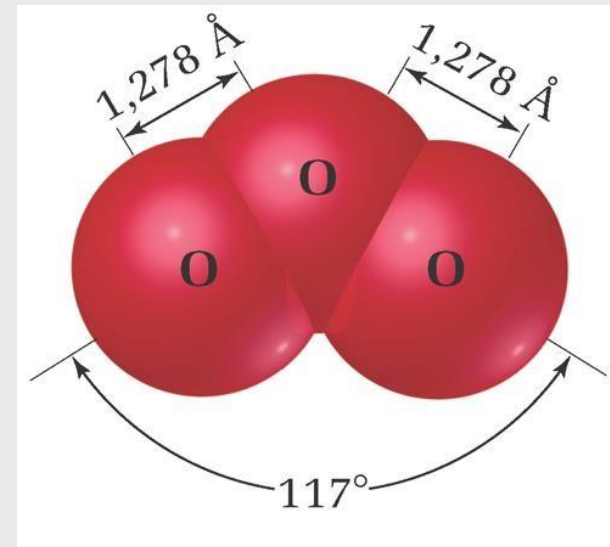
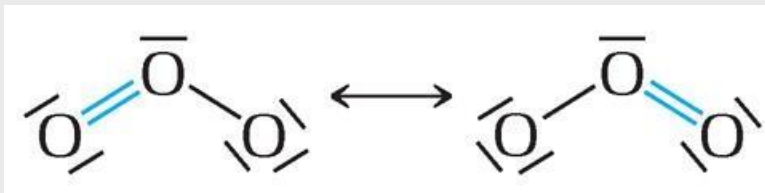
| | | | | | | |
|-------------------------------------|---|---|---|----|---|----|
| Valenzelektronen: | 6 | 4 | 6 | 6 | 4 | 6 |
| -(dem Atom zugeordnete Elektronen): | 6 | 4 | 6 | 7 | 4 | 5 |
| Formalladung: | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | +1 |



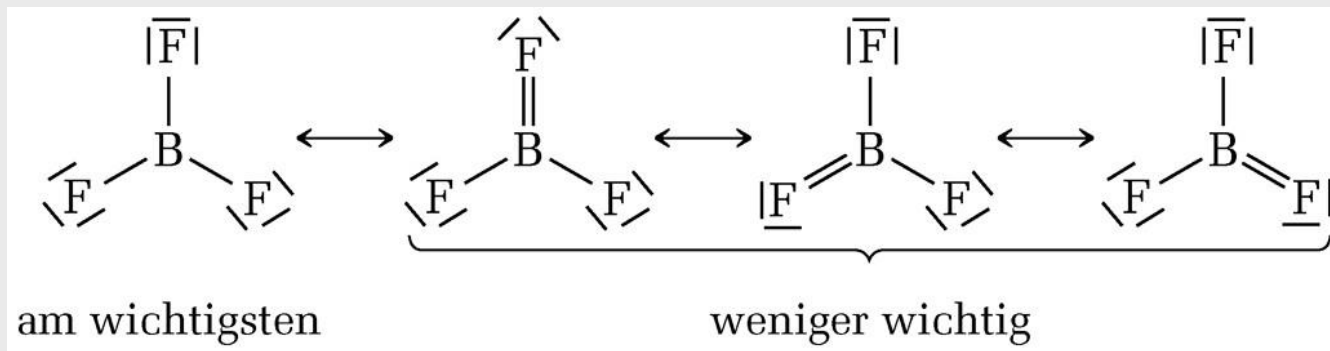
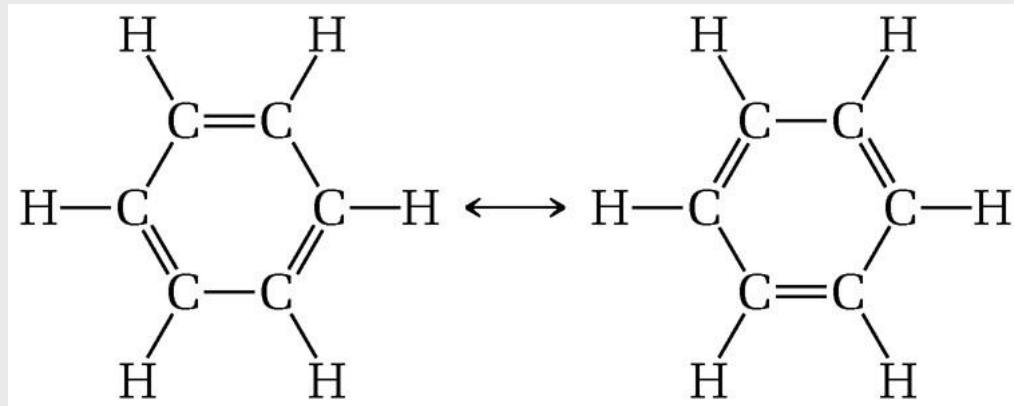
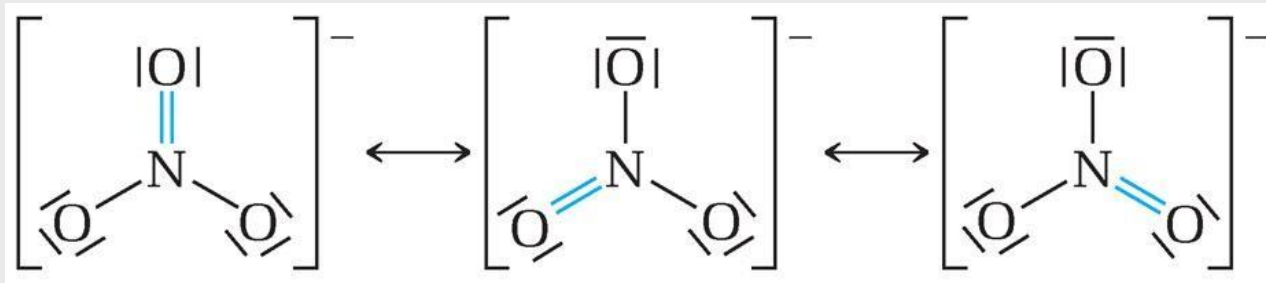
Oktettunterschreitung für Bor

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),

σ - / π - Orbitale, Bindungsordnung von X_2 -Molekülen, Dia- / Paramagnetismus

Konstruktion von Lewis-Formeln, Oktettunterschreitung / -erweiterung