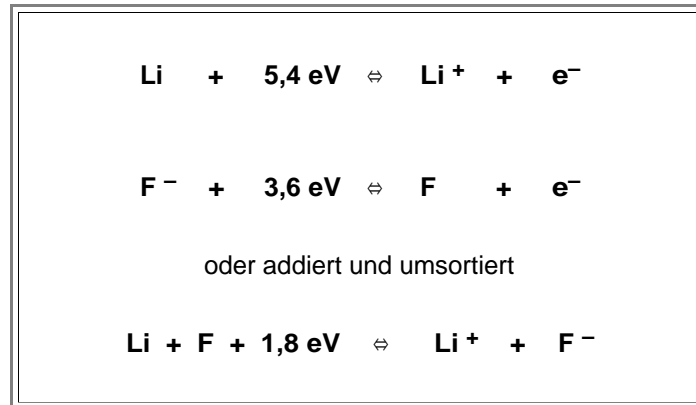


## 2.2. Bindungen

### 2.2.1 Ionenbindung

Die Ionenbindung ist die einfachste Bindungsart - sie läßt sich klassisch in guter Näherung durch die anziehende Wechselwirkung zweier ungleichnamig geladener "harter" Kugeln verstehen. Die anziehenden elektrostatischen Kräfte sind dabei *ungerichtet*. Egal in welche Raumrichtung  $r$  man schaut, die Kräfte sind immer dieselben. Auch bei exakter quantenmechanischer Betrachtung ändert sich kaum etwas gegenüber dem klassischen Bild.

- Wir bleiben beim Beispiel des **LiF** aus dem vorhergehenden Kapitel. Wir können die beiden Gedankenexperimente zusammenfassen: Erst wird dem **Li**-Atom ein Elektron entfernt (unter Aufwendung der Ionisationsenergie  $I$ ), danach wird dieses Elektron dem **F** - Atom übergeben, wobei die Elektronenaffinitätsenergie  $A$  frei wird.
- Die Gesamtbilanz sieht dann so aus



Durch die *reine Ionisierung* ist also noch keine Energie gewonnen; im Gegenteil: Die Gesamtbilanz ist negativ! Um beide Atome zu ionisieren muß erstmal Energie in das System hineingesteckt werden.

- Wir haben aber auch noch *kein LiF* gebildet, denn unsere beiden Ionen sind weit voneinander entfernt. Wenn wir sie jetzt gedanklich einander nähern, wird durch die elektrostatische Anziehung Energie frei. Sie ist identisch zu der Energie, die wir bräuchten um die beiden Ionen, nachdem sie sich auf die minimal mögliche Distanz  $a_0$  genähert haben - also **LiF** mit Bindungsabstand  $a_0$  geformt haben - wieder zu trennen. Wir nennen diese Energie die **Bindungsenergie  $E'_{\text{Bin}}$**  der *Ionen* (nicht zu verwechseln mit der Bindungsenergie  $E_{\text{Bin}}$  der *Atome!*).
- Beschreiben wir etwas unpräzise unsere Ionen als Kugeln, ist  $a_0$  natürlich nichts anderes als die Summe der beiden Kugelradien, also der **Ionenradien**  $r_1$  und  $r_2$ .
- $E'_{\text{Bin}}$  ist nun leicht zu erhalten. Wir müssen nur die Bindungsenergie berechnen, indem wir die Arbeit gegen die **Coulombkraft**  $(q_1 \cdot q_2)/4\pi\epsilon_0 r^2$  durch integrieren von  $r = a_0$  bis  $r = \infty$  berechnen. ( $q$  ist dabei die jeweilige Ladung). Es gilt

$$E'_{\text{Bin}} = \int_{a_0}^{\infty} \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2} \cdot dr$$

- Wir erhalten sofort

$$E'_{\text{Bin}} = - \frac{q^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot a_0}$$

- und konkret  $E'_{\text{Bin}}(\text{LiF}) = -7,2 \text{ eV}$  für **LiF** mit einem gemessenen  $a_0 = 0,2 \text{ nm}$ .

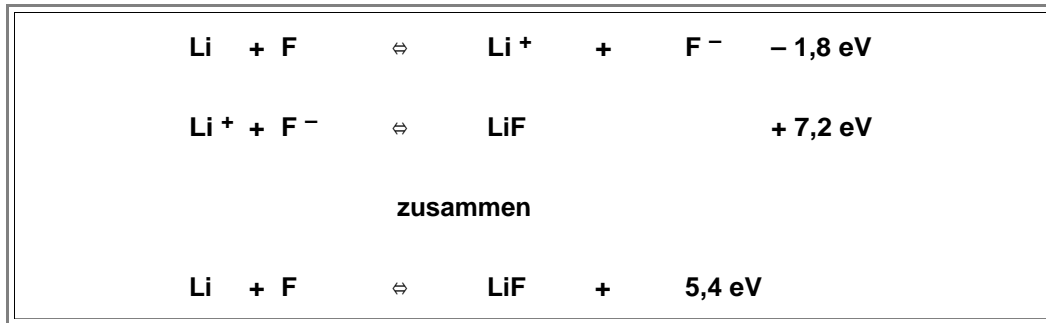
Dazu machen wir eine kleine Übung, um mit den elektrostatischen Maßeinheiten, mit dem elektrostatischen Potential und mit den Größenordnungen der betrachteten Energien etwas vertrauter zu werden.

### Übung 2.2-1

#### Bindungsenergie

Dabei sind folgende Beziehungen eingeflossen:

- Die beiden Ladungen sind je eine positive und eine negative **Elementarladung e**; damit ist  $q_1 \cdot q_2 = -e^2$
- Den Wert  $a_0 = 0,2 \text{ nm}$  muß man natürlich **kennen**. Entweder entnimmt man (bei entsprechendem Rechengeschick) die beiden Ionenradien der Schrödingergleichung, oder man mißt sie im Experiment. Das geht, wie wir in Mat-Wiss II lernen werden, ganz einfach wenn man nicht nur ein **LiF Molekül** hat, sondern einen ganzen **LiF Kristall**.
- Damit können wir die Bindungsreaktion vervollständigen:



In Worten bedeuten diese Gleichungen:

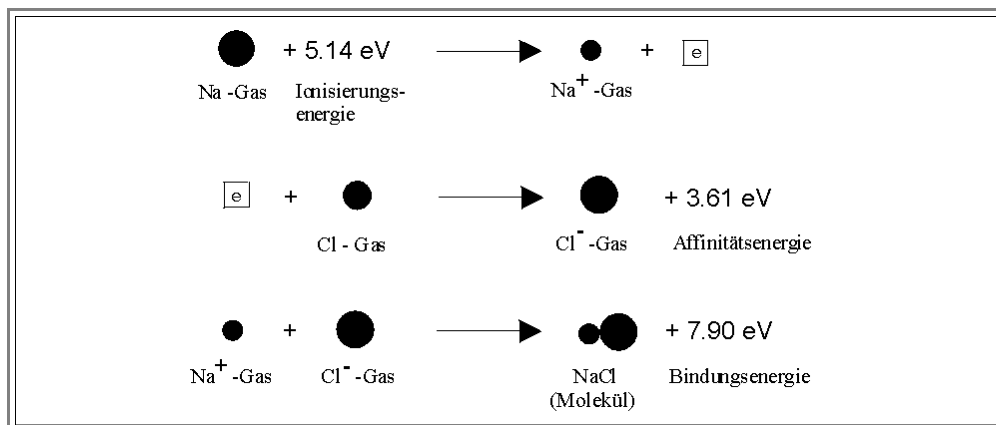
- Aus je einem **Li-** und **F- Atom** kann durch **Zufuhr** (Minuszeichen) von **(3,6 - 5,4) eV = - 1,8 eV** je ein **Li<sup>+</sup>-** und **F<sup>-</sup>- Ion** gemacht werden.
- Bei der Reaktion von **Li<sup>+</sup>** und **F<sup>-</sup>** zu einem **LiF Molekül** werden **+7,2 eV frei** (Pluszeichen), die mit den aufgewendeten **- 1,8 eV** für die Ionisation zu einer **Bindungsenergie** der Atome von **+5,4 eV** führen.
- Das ist eine **ganze Menge Energie** für zwei Atome, so daß wir mit einer kräftigen Reaktion rechnen dürfen, wenn **Li** und **F** in Kontakt kommen.

Allerdings wird die Reaktion nicht **von alleine** beginnen, denn zunächst werden die **- 1,8eV** benötigt um die Ionen zu erzeugen.

- In der Regel wird diese **Startenergie** durch die **thermische Energie** geliefert, die in einem **System** steckt, also in einer Ansammlung vieler Atome. Die **Energietönung** ist aber auf jeden Fall positiv (es wird Energie durch die Reaktion frei), so daß die Reaktion stattfinden "**möchte**".

Wir schauen und dies noch einmal für einen anderen Fall an: Die Bildung des **NaCl**-Moleküls aus **Na** und **Cl**.

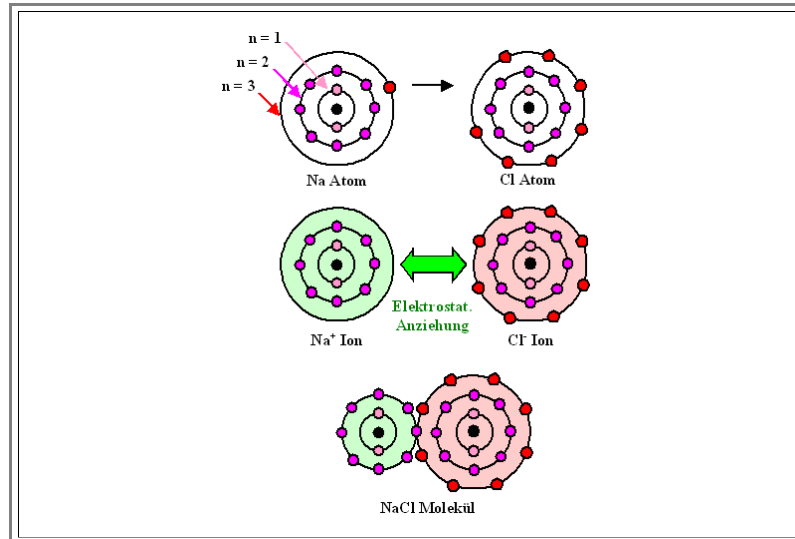
- Am Rande merken wir uns: Während **Na** und **Cl** in elementarer Form (**Cl** als **Cl<sub>2</sub>** Molekül und gasförmig; **Na** als festes Metall) **sehr reaktive** und **sehr gefährliche** Stoffe sind (**Cl<sub>2</sub>** wurde im 1. Weltkrieg als erstes Massenvernichtungsmittel der Menschheit eingesetzt; es ist ein Kampfgas!), ist **NaCl**, uns bekannt als **Kochsalz**, vergleichsweise harmlos.



Als Gedächtnisstütze bewähren sich häufig bewusst einfache (und damit in den Details unvollständige bis falsche Graphiken, die aber den **springenden Punkt** ganz deutlich herausarbeiten (bei der Ionenbindung kann man das fast wörtlich nehmen, denn der springende Punkt ist das vom Alkalimetall zum Halogen springende Elektron).

- Zunächst malen wir die Elektronenverteilung auf die diversen Schalen - ganz schematisch!
- Dann verteilen wir die Elektronen neu - **Li** verliert eines und **Na** gewinnt eines.
- Schließlich schematisieren wir den Endzustand.

Im "**Schalenbild**" malen wir für jede Hauptquantenzahl **n** einen Kreis, und symbolisieren die insgesamt zu dieser Hauptquantenzahl vorhandenen Elektronen mit kleinen Kreisen. Das sieht für die Ionenbindung **Na - Cl** dann so aus:



Das kann man sich spaßeshalber [im Link](#) auch mal animiert anschauen

Um zu sehen, wie man mit solchen schematisierten Graphiken umgeht, machen wir dazu eine kleine Übung.

## Übung 2.2-3

Schema für andere Ionenkristalle

Wir haben jetzt verstanden, wie bei Vorliegen der Ionenbindung aus Atomen Ionen werden, die dann elektrostatisch zusammenhalten und Moleküle bilden. In der obigen Übung wird das Prinzip auch auf Moleküle mit mehr als **2** Atomen ausgeweitet - z.B. **CaF<sub>2</sub>** .

- Aber ein Material, das nur aus **einzelnen Molekülen** besteht, ist, bei genauer Betrachtung, **immer** ein **Gas** . Denn wenn es flüssig oder fest werden soll, müssen Bindungskräfte **zwischen** den Molekülen wirksam werden, sonst halten sie nicht zusammen.
- Wir müssen uns also anschauen, wie man von **zwei** Ionen zu **vielen** kommt, vom **LiF - Molekül** zum **LiF - Festkörper**, oder, um einen Begriff schon vorwegzunehmen, der uns noch viel beschäftigen wird, zum **LiF - Kristall**.

## Fragebogen

Multiple Choice Fragen zu 2.2.1