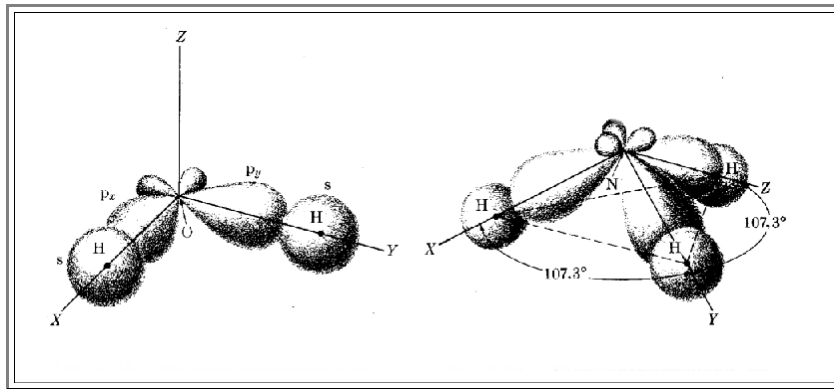


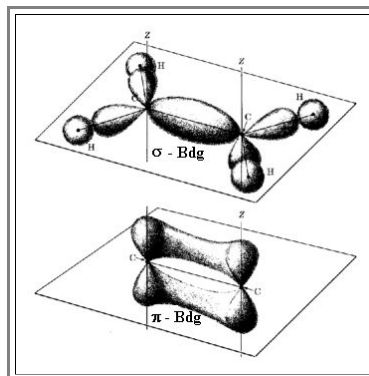
# Kovalente Bindungsbilder in Orbitaldarstellung

## Illustration

- Wir betrachten zunächst das Wasser- ( $\text{H}_2\text{O}$ ) und das Ammoniak- ( $\text{NH}_3$ ) Molekül. Die  $s$ -Orbitale der zwei Wasserstoffatome überlappen mit einem je  $p$ -Orbital des Sauerstoffs. Hier sind zwei Besonderheiten auffällig:
1. Die  $p$ -Orbitale sind verzerrt; sie sind auf der  $\text{H}$ -Atom Seite größer als auf der  $\text{O}$ -Atom Seite. Der Grund dafür ist, daß die Anwesenheit der  $\text{H}$ -Atome die Bewegung der  $p$ -Elektronen des  $\text{O}$ -Atoms etwas ändert oder **polarisiert**.
  2. Der Winkel zwischen den Bindungsachsen ist nicht  $90^\circ$ , wie er eigentlich bei  $p$ -Orbitalen sein sollte, sondern deutlich größer ( $104,5^\circ$ ). Das liegt daran, daß jetzt auf der Wasserstoffseite des Moleküls im Mittel **mehr** negative Ladungen sind, die sich abstoßen.
- Als Konsequenz fallen die Ladungsschwerpunkte nicht mehr zusammen, das Molekül ist **polarisiert** und bildet einen **elektrischen Dipol**.
- Das **Dipolmoment** (= Ladung mal Abstand) ist  $6,2 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$ ; es ist verantwortlich für die hohe **Dielektrizitätskonstante** ( $\epsilon_r = 81$ ) des Wassers.
  - Ähnlich beim Ammoniak. Statt rechter Winkel finden wir  $107,3^\circ$ .
  - Das Dipolmoment ist  $5,0 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$ .
- Aussehen tut das ganze so; links Wasser, rechts Ammoniak.

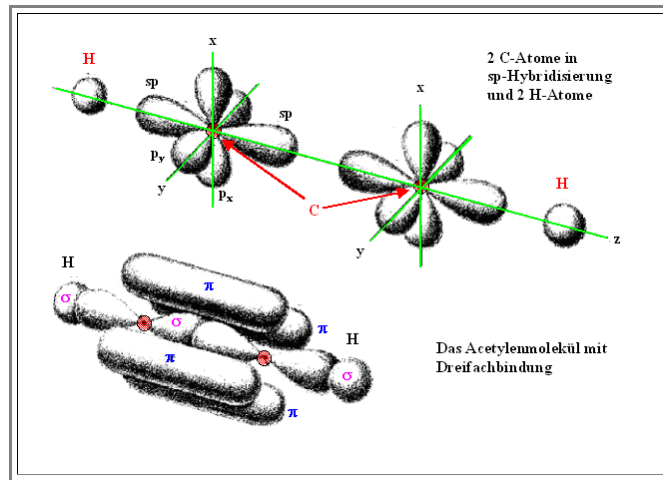


- Als nächstes betrachten wir Äthylen ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ). Die Kohlenstoffatome haben  $\text{sp}^2$ -Hybridorbitale gebildet, um die je zwei  $\text{H}$ -Atome binden zu können.
- Bei der  $\text{sp}^2$ -Hybridisierung werden die  $s$ -,  $p_x$ - und  $p_y$ -Wellenfunktionen kombiniert; die  $p_z$ -Wellenfunktion bleibt unverändert.
  - Damit entsteht eine  $\sigma$ -Bindung (in Richtung der Keulenachse) und eine  $\pi$ -Bindung (senkrecht zur Keulenachse) zwischen den Kohlenstoff-Atomen; die typische  **$\text{C}=\text{C}$  Doppelbindung**.



Es bleibt die **einfache** **sp**-Hybridisierung (auch **sp<sup>1</sup>** geschrieben) ; sie liegt z.B. beim Acetylen (**C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>**) vor.

- Das **sp** - Hybridorbital sieht aus wie einen verlängerte **p** - Keule. Wir haben die Kohlenstoff-Dreifachbindung; **1 x σ** und **2 x π**



Zum Schluß noch das schöne Benzolmolekül (**C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>**): Es sollte nun klar sein, dass wir hier eine **sp<sup>2</sup>** Hybridisierung haben.

