

Kovalente Bindungsbilder in Orbitaldarstellung

Illustration

Wir betrachten zunächst das Wasser- (H_2O) und das Ammoniak- (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 H -Atom Seite größer als auf der O -Atom Seite. Der Grund dafür ist, daß die Anwesenheit der H -Atome die Bewegung der p -Elektronen des O -Atoms etwas ändert oder **polarisiert**.
2. Der Winkel zwischen den Bindungsachsen ist nicht 90° , 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.

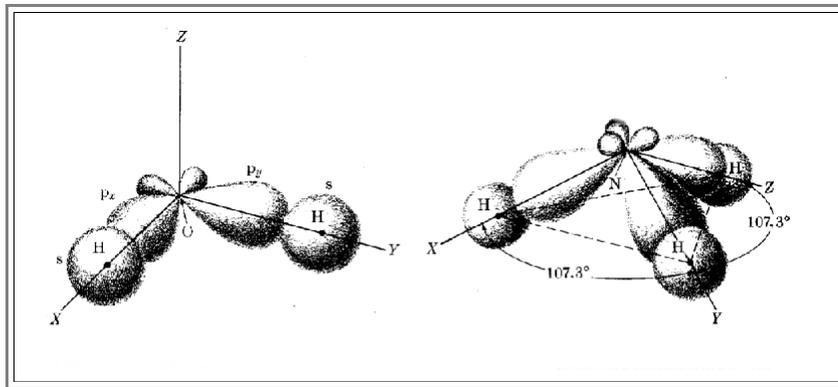
Als Konsequenz fallen die Ladungsschwerpunkte nicht mehr zusammen, das Molekül ist **polarisiert** und bildet einen **elektrischen Dipol**.

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 $107,3^\circ$.

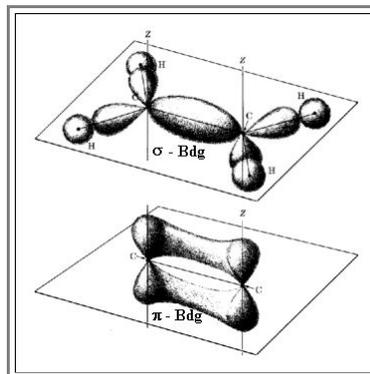
Das Dipolmoment ist $5,0 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$.

Aussehen tut das ganze so; links Wasser, rechts Ammoniak.



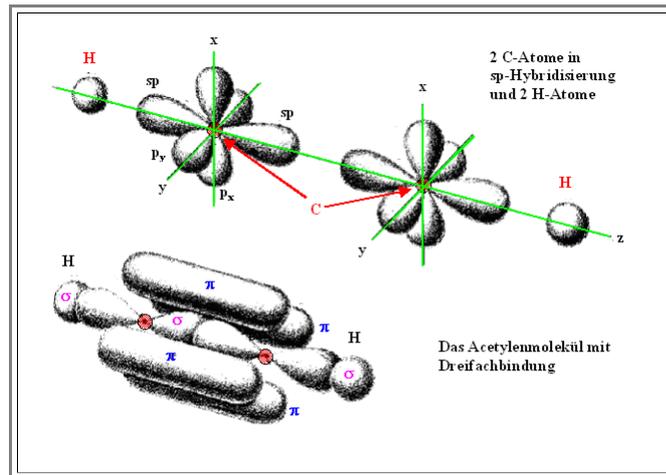
Als nächstes betrachten wir Äthylen (C_2H_4). Die Kohlenstoffatome haben sp^2 -Hybridorbitale gebildet, um die je zwei H -Atome binden zu können.

1. Bei der sp^2 -Hybridisierung werden die s -, p_x - und p_y -Wellenfunktionen kombiniert; die p_z -Wellenfunktion bleibt unverändert.
2. Damit entsteht eine σ -Bindung (in Richtung der Keulenachse) und eine π -Bindung (senkrecht zur Keulenachse) zwischen den Kohlenstoff-Atomen; die typische **C=C** Doppelbindung.



Es bleibt die *einfache* sp -Hybridisierung (auch sp^1 geschrieben) ; sie liegt z.B. beim Acetylen (C_2H_2) vor.

Das sp -Hybridorbital sieht aus wie einen verlängerte p -Keule. Wir haben die Kohlenstoff-Dreifachbindung; $1 \times \sigma$ und $2 \times \pi$



Zum Schluß noch das schöne Benzolmolekül (C_6H_6): Es sollte nun klar sein, dass wir hier eine sp^2 Hybridisierung haben.

