



Aufbau der Atome

- Die zwei grundlegende Atommodelle und die Unterschiede zwischen diese Modelle
- Die Hauptenergiecharakteristiken der Atome
- Die starke und schwache Bindungen
- Der Zusammenhang zwischen der Atomare Anziehungskräfte und der makroskopische Eigenschaften.

Anfang: der Big Bang vor $13,7 \times 10^9$ Jahren

Weitert sich und wird kühler, es werden
Strukturen gebildet

Kühlen und Fusion, Atomkerne

Sterne: $3/4$ H + $1/4$ He

+später 1% schwerere Atomkerne

Zusammenstehen durch Gravitation:

Galaxien und Sterne, sichtbare

Materien

Dunkle Materie und Energie:

ca.25 fache der sichtbare Materie

Folie: 3

Von der Materie des Universums ist:

73% dunkle Energie,

23% dunkle Materie,

4% atomare Materie aber

99% der atomare Materie ist Plasma und

1% feste Materie. Davon der größere Teil sind

Sterne, interplanetare Staub,

kleinere Teil sind Planeten (Kern, Mantel, Kruste).

Der größere Teil der Kruste ist Abraum der

Rest ist für uns Menschen brauchbare

Materie.

Folie: 4

Womit wir uns beschäftigen werden sind sehr seltene Materien.

Es gibt noch seltenere Materien, sowie lebendige Materien:

Pflanzen, Tiere, Menschen...usw.

Bescheidenheit des Ingenieurs:

Die Materien womit wir uns beschäftigen werden, ermöglichen uns unendliche technische Möglichkeiten um brauchbare Produkte zu erzeugen.

- **Atomkern:** besteht aus Partikeln (aus Nukleonen)
 - Proton:** hat positive Ladung und die gleiche Masse als die Neutronen
 - Neutron:** hat neutrale Ladung
- **Elektron:** hat gleichwertige negative Ladung als die Protonen, die Masse ist um vier Größenordnungen kleiner als die von Atomkern

➤ **Atomzahl (Z)**

Z – Anzahl der Protonen

➤ **Massenzahl (A)**

A=Z+N wo **N** – ist der Anzahl der Neutronen

➤ **Nuklid:** Atome mit gleicher Protonenzahl und Neutronenzahl

➤ In jeder Atom eines Elements ist die gleiche Anzahl von Protonen.

Folie: 7

➤ **Isotop:** Ein Atom mit gleicher Protonenzahl aber mit unterschiedlichen Anzahl von Neutronen

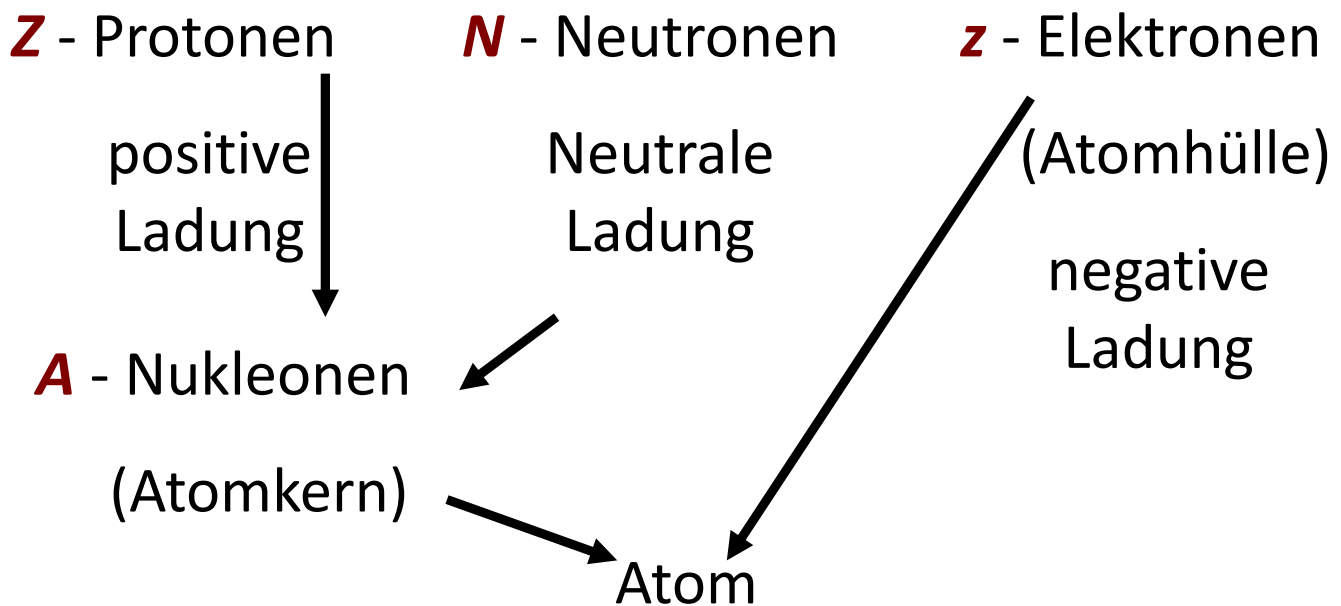
➤ **Relative Atommasse (A_r):** Proportionalitätsfaktor, was zeigt, dass ein Nuklid einer Element um wieviel mal größere Masse hat als die 1/12 der Masse von ^{12}C -Isotop. (Im Periodischen System steht für gegebenes Element die relative Masse für die verschiedene Isotopen im natürlichen Verhältnis)

➤ **Avogadro Zahl, Chemische Werkstoffmasse (mol):**

$N_A = 6,023 \times 10^{23}$ stück Atom oder Molekül

➤ **Äußeres / Valenz Elektron:** auf der äußeren Elektronenhülle befindliche Elektronen, die im Bildung von Bindungen mit anderen Atomen eine Rolle spielen.

Folie: 8



Atomzahl, Ordnungszahl = Anzahl der Protonen (**Z**)

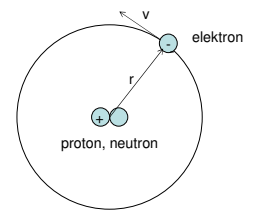
Massenzahl **A = Z+N** $m_{\text{A.kern}} = 10^4 \times m_{\text{Elektronen}}$

	Proton	Neutron	Elektron
Ladung e_p, e_n, e_e	$1.6 \cdot 10^{-19} \text{ As}$	0	$-1.6 \cdot 10^{-19} \text{ As}$
Ruhemasse m_p, m_n, m_e	$1.7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$	$1.7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$	$0.9 \cdot 10^{-30} \text{ kg}$
Drehimpuls s_p, s_n, s_e	$5.3 \cdot 10^{-35} \text{ Js}$	$5.3 \cdot 10^{-35} \text{ Js}$	$5.3 \cdot 10^{-35} \text{ Js}$
magnet. Moment μ_p, μ_n, μ_e	$1.4 \cdot 10^{-26} \text{ Am}^2$	$-1.0 \cdot 10^{-26} \text{ Am}^2$	$-9.3 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2$



In den Atomen sind stationär Schalen (Orbitale), an der ein Elektron ohne Strahlung zirkulieren kann.

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$



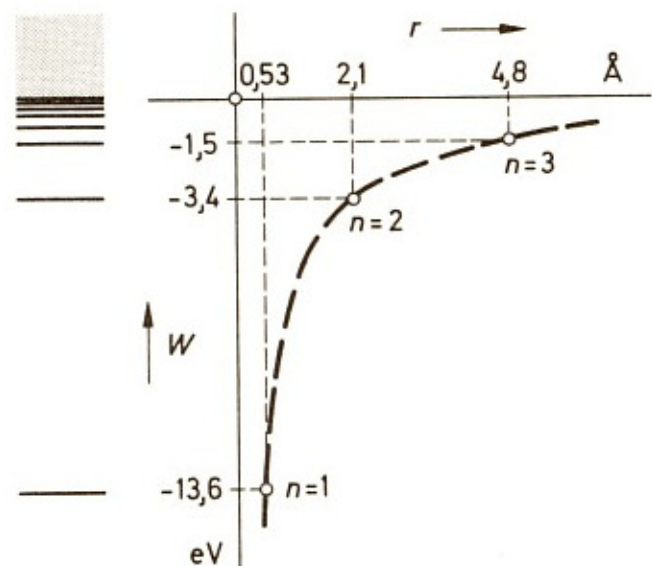
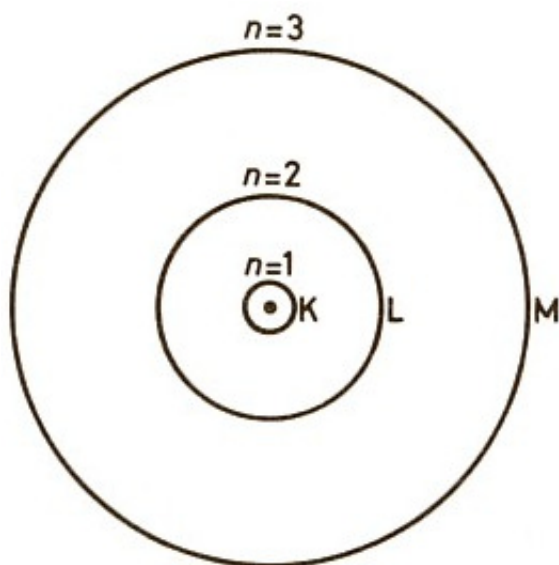
Die Zentrifugalkraft ist betragsmäßig gleich der Coulomb-Kraft. :

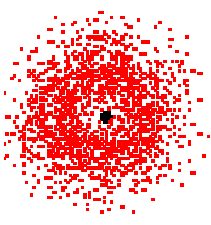
$$\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \rightarrow v = \frac{e^2}{n\hbar}, \quad r = \frac{n^2\hbar^2}{me^2}, \quad E_n = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{n^2\hbar^2}$$

Wenn das Elektron sein Bahn ändert, geschieht Energieabsorption oder Energieabgabe in Energiakvantumform:

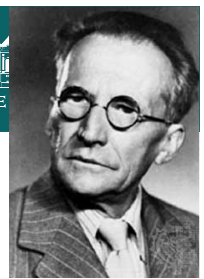
$$E_{n+1} - E_n = h\nu$$

h: Planck-konstante, **m**: Elektronmasse, **v**: Elektrongeschwindigkeit, **r**: Radius der Schale, **n**: Ganzzahl, **e**: Elektronladung, **ν**: Frequenz





Schrödinger-Gleichung



$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U\psi = E\psi$$

- \hbar** : Planck-konstante, **m** : Teilchenmasse
 U : Potentialenergie, **E** : Gesamtenergie
 ψ : Wellenfunktion, **x, y, z** : Koordinatenachsen

Das Elektron kann statt definierter Schale überall sein, aber die Wahrscheinlichkeit nicht gleich ist.

Elektronenhülle: Gesamtheit der Elektronenpositionen im Atom.

Die Dichte der Elektronenwolke ist von Wahrscheinlichkeit der Elektronenaufenthalt definiert.

$\psi^2 dV$: Die Wahrscheinlichkeit der Elektronenaufenthalt der untersuchen Teilchen im **dV** Elementarvolumen.



Quantenzahlen



Quantenzahl	Zeichnen	Wert	Bedeutung
Haupt~	n	1,2,3,4,5,6,7 K,L,M,N,O,P,Q	Orbitmasse $r \sim n^2$
Neben~	l	$l=0,1,2..(n-1)$ s, p, d, f	Orbitale Impulsmoment $M = \hbar \sqrt{l(l+1)}$
Magnet.~	m	$m=-l..0..+l$	$M_z = \hbar m$
Spin~	m_s	$m_s = -1/2, +1/2$	

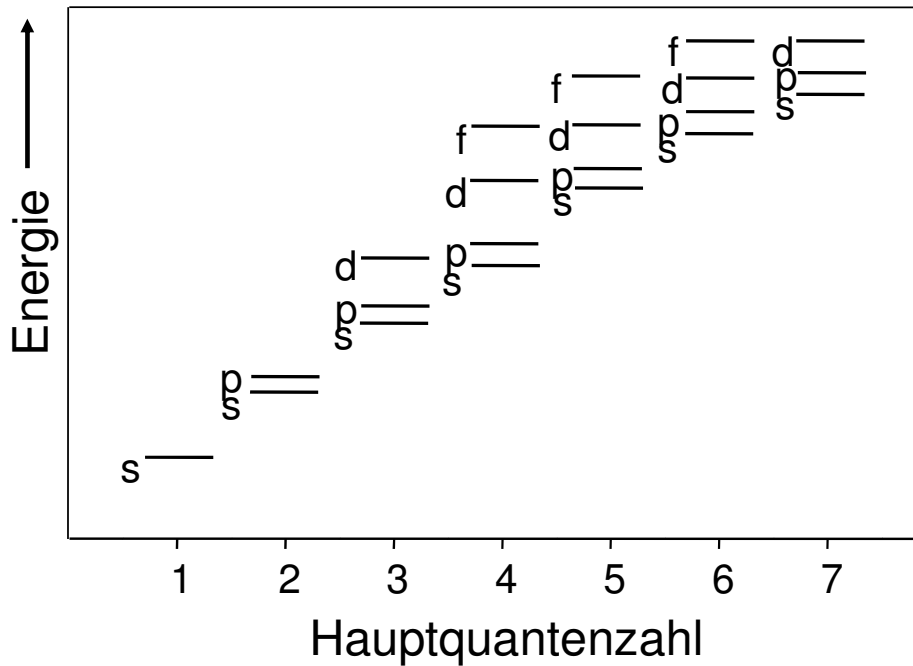
Pauli-Prinzip: ein Atom enthält kein zweites Elektron, wo die vier Quantenzahlen gleich sein können.

n	Haupt- schale	Neben- schale	Zahl der Zustände	El.zahl (Nebenschale)	Elektronzahl Elektronhülle $2n^2$
1	K	s	1	2	2
2	L	s p	1 3	2 6	8
3	M	s p d	1 3 5	2 6 10	18
4	N	s p d f	1 3 5 7	2 6 10 14	32

Folie: 15

Element	Symbol	Ordnungsz.	Elektronenkonfig.
Wasserstoff	H	1	$1s^1$
Helium	He	2	$1s^2$
Lithium	Li	3	$1s^2 2s^1$
Beryllium	Be	4	$1s^2 2s^2$
Bor	B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$
Karbon	C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$

Folie: 16



Atom im Grundzustand:

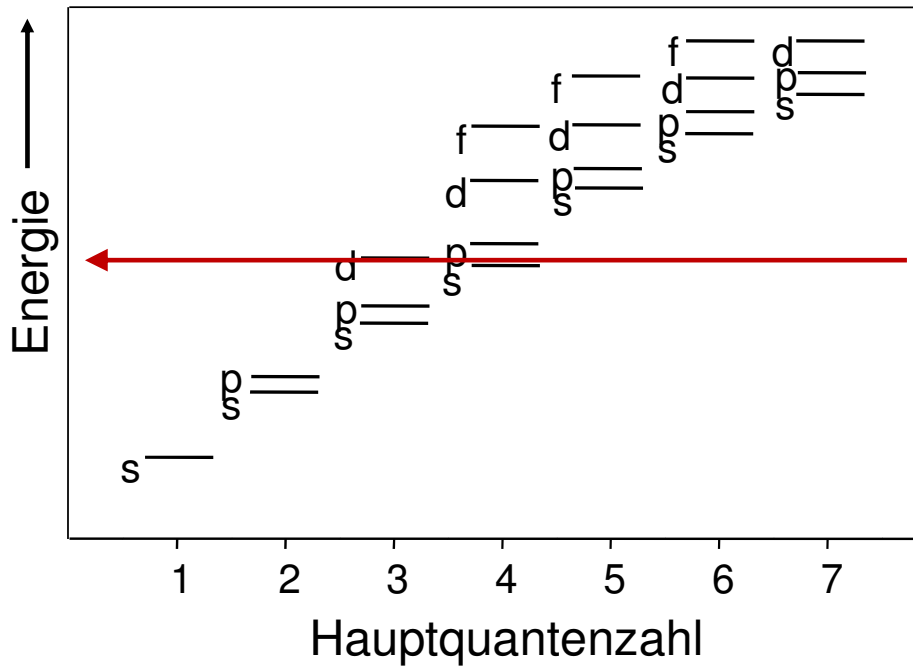
Ein Atom, das die kleinste Energie hat.

Die Elektronen sind am nächsten zum Atomkern.

Folie: 17

z	Element	K-Schale 1s	L-Schale 2s 2p	M-Schale 3s 3p 3d	N-Schale 4s 4p	O-Schale 5s			
1	H	1							
2	He	2 + K-Schale gefüllt							
3	Li	2	1						
4	Be	2	2						
5	B	2	2	1					
6	C	2	2	2					
7	N	2	2	3					
8	O	2	2	4					
9	F	2	2	5					
10	Ne	2	2	6	+ L-Schale gefüllt				
11	Na	2	2	6	1				
12	Mg	2	2	6	2				
13	Al	2	2	6	2	1			
14	Si	2	2	6	2	2			
15	P	2	2	6	2	3			
16	S	2	2	6	2	4			
17	Cl	2	2	6	2	5			
18	Ar	2	2	6	2	6			
19	K	2	2	6	2	6	1		
20	Ca	2	2	6	2	6	2		
21	Sc	2	2	6	2	6	1	3d-Über- gangs- metalle	
22	Ti	2	2	6	2	6	2		
23	V	2	2	6	2	6	3		
24	Cr	2	2	6	2	6	5		
25	Mn	2	2	6	2	6	5		
26	Fe	2	2	6	2	6	6		
27	Co	2	2	6	2	6	7		
28	Ni	2	2	6	2	6	8		
29	Cu	2	2	6	2	6	10		
30	Zn	2	2	6	2	6	10		
31	Ga	2	2	6	2	6	10	1	
32	Ge	2	2	6	2	6	10	2	
33	As	2	2	6	2	6	10	3	
34	Se	2	2	6	2	6	10	4	
35	Br	2	2	6	2	6	10	5	
36	Kr	2	2	6	2	6	10	6	
37	Rb	2	2	6	2	6	10	6	1

Folie: 18

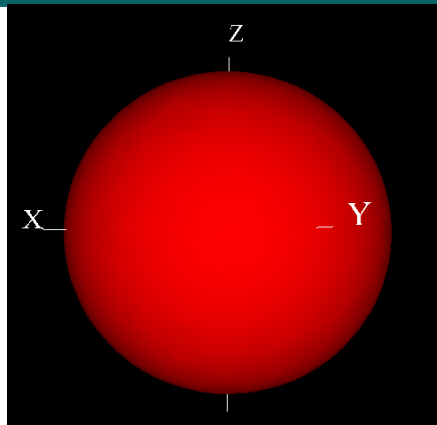


Atom im Grundzustand:

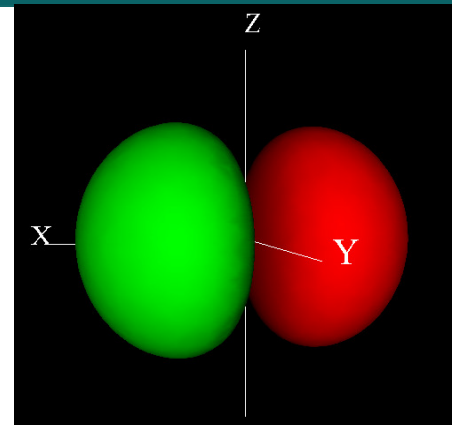
Ein Atom, das die kleinste Energie hat.

Die Elektronen sind am nächsten zum Atomkern.

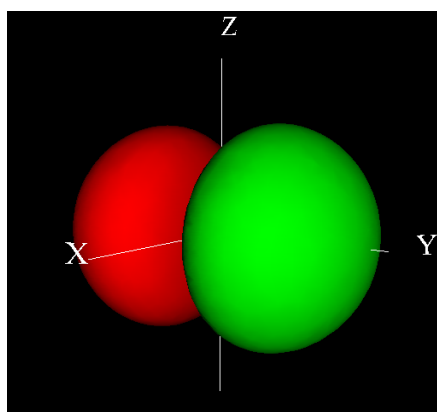
2s



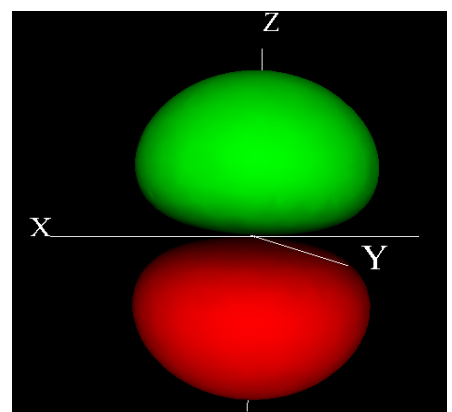
$2p_y, m=1$

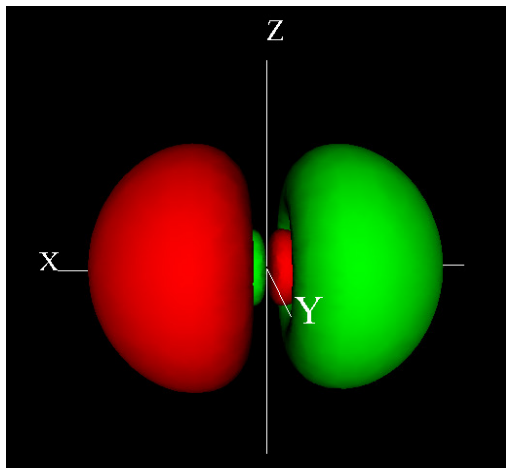


$2p_x, m=-1$

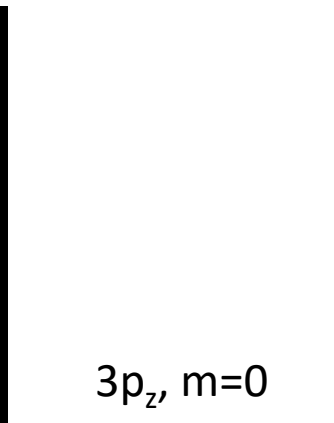


$2p_z, m=0$

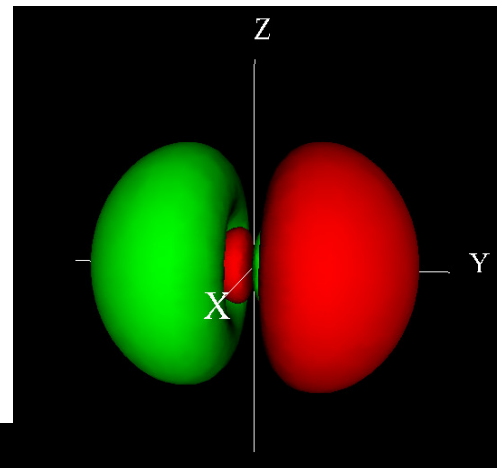




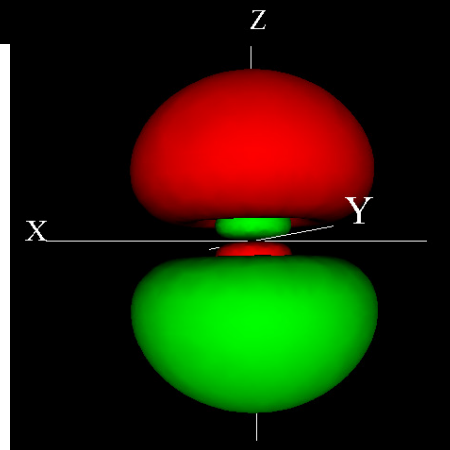
$3p_x, m=-1$



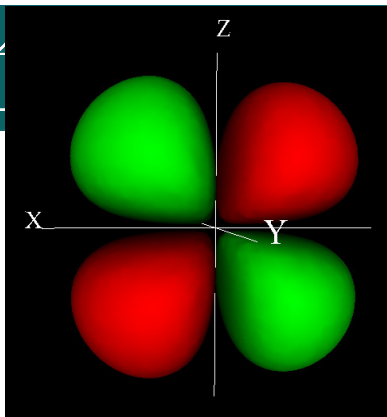
$3p_z, m=0$



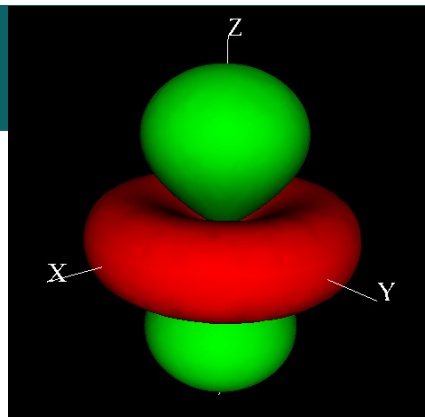
$3p_y, m=1$



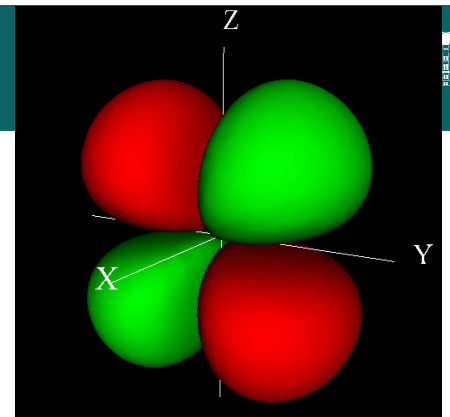
Folie: 21



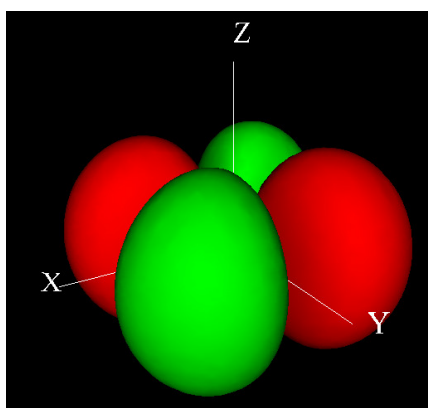
$3d_{xz}, m=-1$



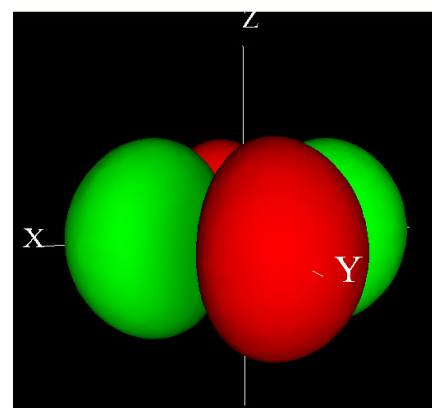
$3d_z^2, m=0$



$3d_{yz}, m=1$



$3d_{xy}, m=-2$



$3d_x^2-y^2, m=2$

Folie: 22

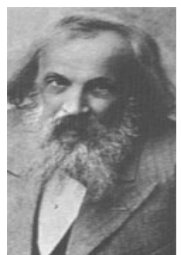
- **Ionisierungsenergie:** Die Energie, die im Gaszustand zu der Entfernung von dem leichtesten beweglichen Elektronen von 1 Mol nötig ist (kJ/mol).
- **Elektronaffinität:** Die Energie, die vom Gaszustand befindlichen negativen Ionen zu der Entfernung von dem ladungstragende Elektronen von 1 Mol nötig ist (kJ/mol).
- **Elektronnegativität:** Fähigkeit zum Anziehen der Elektronen vom gebundenen Atome. Im allgemeinen solche Atome haben große Elektronnegativität, wo die Ionisierungsenergie und die Elektronaffinität groß ist.

Die Elementen mit kleinen Ionisierungsenergie geben leicht Elektronen ab (werden ionisiert), also werden **Kationen**.

Die Elementen mit großen Ionisierungsenergie nehmen leicht Elektronen auf, und werden **Anionen**.

Folie: 23

„Zwischen der Eigenschaften der einfachen Körper, der Typen und Eigenschaften der Verbindungen und dem Atomgewicht der Elementen ist ein periodischer Zusammenhang“.
 (Mendelejev)



Die chemische Elementen kann man auf Grund der Atomkern und Atomhüllenkonfiguration in eine periodische Tabelle ordnen. Die Säule der Tabelle zeigen die Elektronenerfüllung der Positionen der Elektronenschale.

Die Elementen im gleichen Säulen haben ähnlichen Eigenschaften. Die Reihen zeigen die Anzahl der Elektronenschalen.

Folie: 24

IA																	0
1 H 1.008	2 He 4.0026											13 B 10.811	14 C 12.011	15 N 14.007	16 O 15.999	17 F 18.998	18 Ne 20.002
3 Li 6.939	4 Be 9.0122											5 Al 26.982	6 Si 28.086	7 P 30.974	8 S 32.064	9 Cl 35.453	10 Ar 39.948
11 Na 22.990	12 Mg 24.312	3 Sc 44.956	4 Ti 47.90	5 V 50.942	6 Cr 51.996	7 Mn 54.938	8 Fe 55.847	9 Co 58.933	10 Ni 58.71	11 Cu 63.54	12 Zn 65.37	13 Ga 69.72	14 Ge 72.59	15 As 74.922	16 Se 78.96	17 Br 79.91	18 Kr 83.80
19 K 39.102	20 Ca 40.08	21 Sc 44.956	22 Ti 47.90	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.847	27 Co 58.933	28 Ni 58.71	29 Cu 63.54	30 Zn 65.37	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.91	36 Kr 83.80
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (99)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.40	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30
55 Cs 132.91	56 Ba 137.34	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.85	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.09	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.37	82 Pb 207.19	83 Bi 208.98	84 Po (210)	85 At (210)	86 Rn (222)	
87 Fr (223)	88 Ra (226)	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (264)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 Uuu (269)	111 Uun (272)	112 Uub (277)							
Lanthanide		57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.35	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.92	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97	
Aktinide		89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa (231)	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (242)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (249)	99 Es (253)	100 Fm (253)	101 Md (256)	102 No (254)	103 Lr (257)	

Halogen
 Edelgase
 Seltenerdmetalle

Alkalimetallen
 Übergangsmetalle
 Metalloid

Alkalierdelement
 Andere Metalle
 Nicht Metalle

Primäre Bindung : Chemische Bindung mit Übertragung bzw. Aufteilung von Außenelektronen → Entstehung einer festen Bindung zwischen benachbarten Atomen; Beispiele: Ionische , kovalente, metallische Bindung

Sekundäre Bindung: Schwache physikalische Bindung, beruhend auf Ladungsunterschieden ohne Übertragung bzw. Aufteilung von Elektronen; Beispiele: Van der Waals'sche Bindung, Wasserstoffbrückenbindung

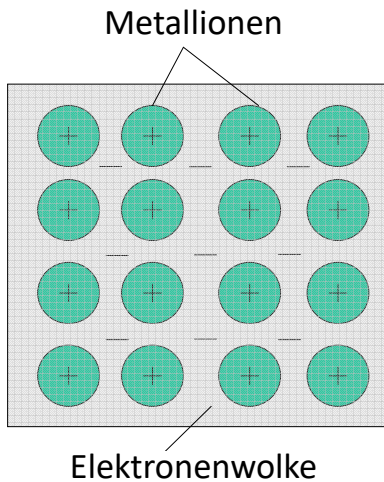
Starke / Primäre Bindungen

- Metallbindung
- Ionenbindung
- Kovalente Bindung

Schwache / Sekundäre Bindungen

- Van der Waals'sche Bindung
- Permanente Dipolbindung
- Induzierte Dipolbindung

Metallbindung bildet sich, wenn die Elementen die Elektronen von der äußeren Schale zu einem gesamten Elektronenwolke abgeben können. Die positive Metallionen bilden eine geordnete Struktur, die Kristallstruktur.



- Gute el. und Wärmeleitfähigkeit
- Kleine elektrische Widerstand
- Große plastische Verformungsvermögen
- Richtungsunabhängige Eigenschaften

Elektropositives Element: fähig für Elektronabgabe

Elektronegatives Element: fähig für Elektronaufnahme

a) Prinzip

Dieser 3. Bindungstyp beruht auf der Aufteilung von Elektronen. Die Valenzelektronen sind delokalisiert an den Atomrümpfen, d. h. verteilen sich auf eine größere Anzahl von Nachbaratomen \Rightarrow ungerichteter Charakter der Bindung

Modell: Es existiert eine Elektronenwolke bzw. ein Elektronengas
 \rightarrow freie Beweglichkeit der Elektronen
 \rightarrow Grundlage der elektrischen und thermischen Leitfähigkeit (s. Bild 2.18)

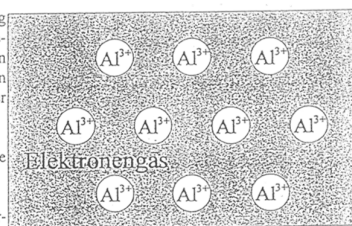


Bild 2.18: Schnitt durch einen Aluminiumkristall mit Atomrümpfen und Elektronengas

b) Koordinationszahlen

KZ liegt zwischen 8 und 12
 \rightarrow hohe Packungsdichte aufgrund der ungerichteten Bindung möglich.

c) Plastisches Verformungsvermögen

Bei Metallen bleiben beim Gleiten der Gitterebenen die Bindungskräfte erhalten
 \rightarrow hohes Verformungsvermögen.

Dagegen kommen bei Ionengittern gleichartig geladene Teilchen übereinander zu liegen
 \rightarrow Sprödbruch (s. Bild 2.19).

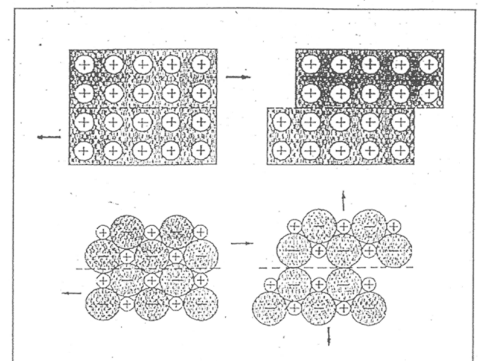


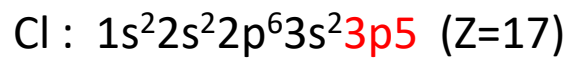
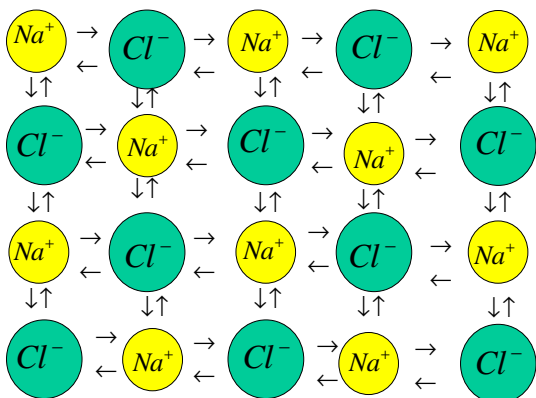
Bild 2.19: Vergleich der Gleitmechanismen von Metall- und Ionenbindungen

Die nicht direkt zugängliche Bindungsenergie kann aus der Sublimationsenergie (Übergang fest \Rightarrow gasförmig) abgeschätzt werden. Je höher die Sublimationsenergie, desto fester ist die Bindung.

Beispiel:

Metall	Sublimationsenergie [kJ/mol]	Metalloxid	Sublimationsenergie [kJ/mol]
Al	326		
Cu	338		
Fe	416	FeO	509
Mg	148	MgO	605
Ti	473	α -TiO	597
		TiO ₂	639

Voraussetzung: Unterschied in der Elektronegativität der Bindungselementen. Die Besetzung der äußere Schalen sind stark unterschiedlich. Ein Atom gibt das Elektron leicht ab und das zweite Atom nimmt das Elektron leicht auf. Bei der Ionenbindung die geschlossene Elektronschalen führen zur besonderen Stabilität.



- Kation(+) – Anion(-)
- Metallische und nicht metallische El.
- Schlechte W.- und el. Leitfähigkeit
- Richtungsunabhängige Eigenschaften
- Sprödes Benehmen
- typische keramische Bindung

1 H 2.1																	2 He -				
3 Li 1.0	4 Be 1.5															5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2															13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -				
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -				
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -				
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89-102 Ac-Lr 1.1-1.7																			

← Elektronabnahme Elektronaufnahme →
 Kleinere Elektronegativität Größere Elektronegativität

a) **Prinzip** Elektronenaustausch vom Atom A (Metall) zu Atom B (Nichtmetall) unter Entstehung von geladenen positiven und negativen Ionen.

Beispiel: Kochsalz NaCl (s. Bild 2.7)

- Na gibt ein Elektron ab
- volle Außenschale bei dem Kation Na⁺ (Edelgaskonfiguration von Neon)
- Cl nimmt ein Elektron auf
- volle Außenschale bei dem Anion Cl⁻ (Edelgaskonfiguration von Argon)

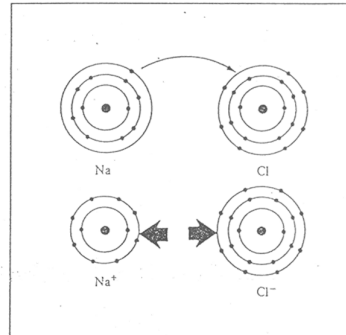


Bild 2.7: Ionenbindung zwischen Natrium und Chlor durch Bildung von Ionen und Anziehung durch Coulomb'sche Kräfte

Modell: Coulomb'sche Anziehungskräfte wirken zwischen den unterschiedlich geladenen Teilchen. Es handelt sich um eine **nicht gerichtete Bindung** (heteropolare Bindung), da jedes Na⁺ in jeder Richtung auf möglichst viele Cl⁻ bzw. auch jedes Cl⁻ auf viele Na⁺ wirken will

- Es entstehen charakteristische Ionen-gitter mit maximaler Packungsdichte (s. Bild 2.8).

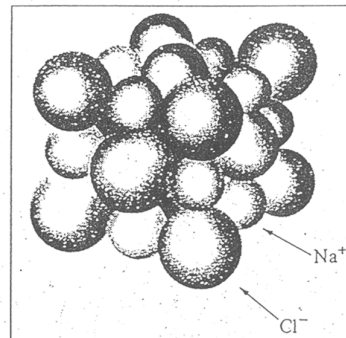


Bild 2.8: Kristallgitter von NaCl

2.9) Betrachtung der wirkenden Kräfte

In Abhängigkeit vom Kernabstand a der Ionen wirkt eine Anziehungskraft F_c (Coulomb'sche Kraft), die mit abnehmendem Abstand stark anwächst (s. Bild 2.9). Es gilt:

$$F_c = \frac{-K}{a^2} \quad \text{mit } K = k_e(Z_1q_1)(Z_2q_2) \quad (2.8)$$

Der Ladungszustand der Ionen Z mit $+1$ für Na⁺ und -1 für Cl⁻ sowie der Ladung q für ein Elektron sind bekannt. k_e ist eine Proportionalitätskonstante ($9 \cdot 10^9$ Vm/C).

Es ist keine Annäherung auf den Abstand $a = 0$ möglich

→ es wirkt eine **Abstoßungskraft** F_R , da keine Überlappung von negativen Kraftfeldern durch die negativ geladenen Elektronenhüllen möglich ist. Es gilt

$$F_R = \lambda e^{-\rho/a} \quad (2.9)$$

λ und ρ sind experimentell ermittelte Konstanten (s. Bild 2.10).

Durch Addition von F_c und F_R ergibt sich die wirkende Bindungskraft F .

$$F = F_c + F_R \quad (2.10)$$

Im Schnittpunkt der wirkenden Kraft F mit der Abstandsachse a befindet sich der Gleichgewichtszustand, in dem Abstoßung und Anziehung sich aufheben

→ Gleichgewichtsabstand a_0

Die Bindungsenergie U wird durch den differentiellen Ausdruck

$$F = \frac{dU}{da} \quad (2.11)$$

bestimmt.

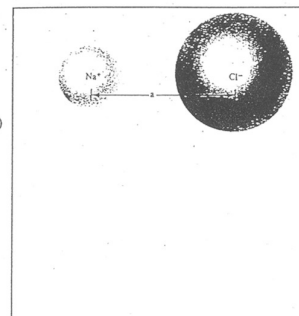


Bild 2.9: Coulombsche Kraft in Abhängigkeit vom Abstand für ein Na⁺-Cl⁻ Paar

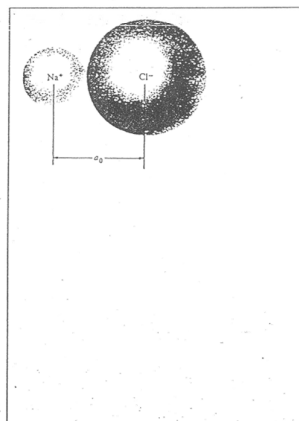


Bild 2.10: Graphische Darstellung der wirkenden Bindungskraft und des Gleichgewichtsabstandes der Atom-schwerpunkte

Im Gleichgewichtszustand sind Na^+ und Cl^- (2.11) die Bindungsenergie ein Minimum haben (s. Bild 2.11)
 → Voraussetzung für eine Bindung überhaupt!

Der Gleichgewichtsabstand a_0 stellt die Addition der Ionenradien dar.

$$a_0 = r_{\text{Na}^+} + r_{\text{Cl}^-} \quad (2.12)$$

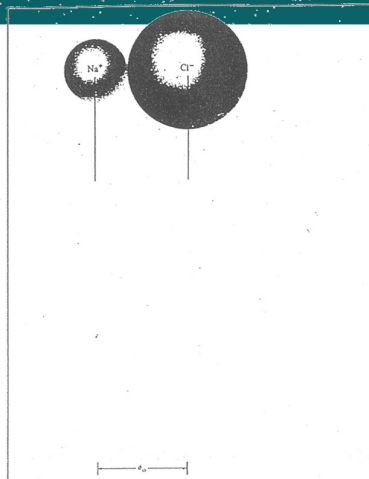


Bild 2.11: Vergleich der Bindungskraft- und der Bindungsenergiekurve

Die Ionenradien unterscheiden sich von den Atomradien.
 Verlust eines Elektrons
 → gleichbleibende Kernladung zieht die verringerte Zahl von Elektronen stärker an
 → Radius schrumpft (und umgekehrt!) (s. Bild 2.12).

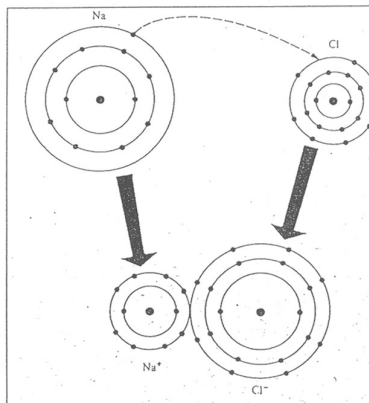
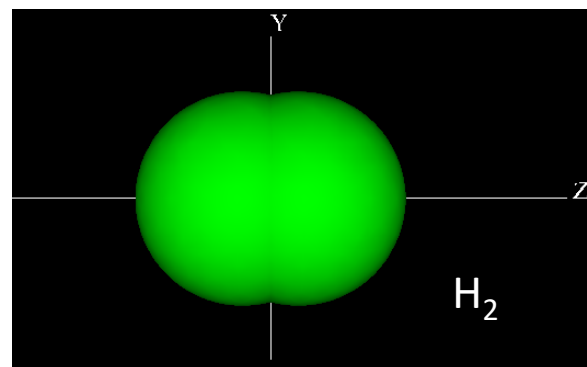
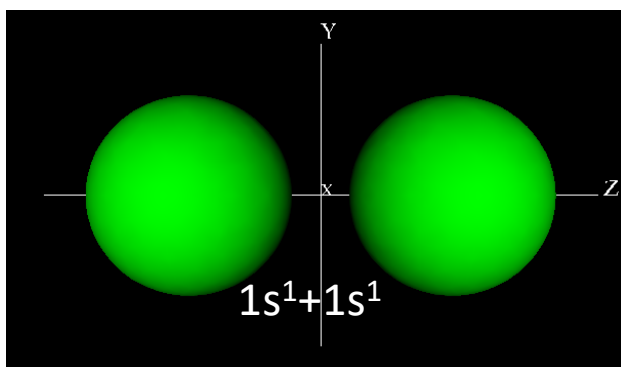
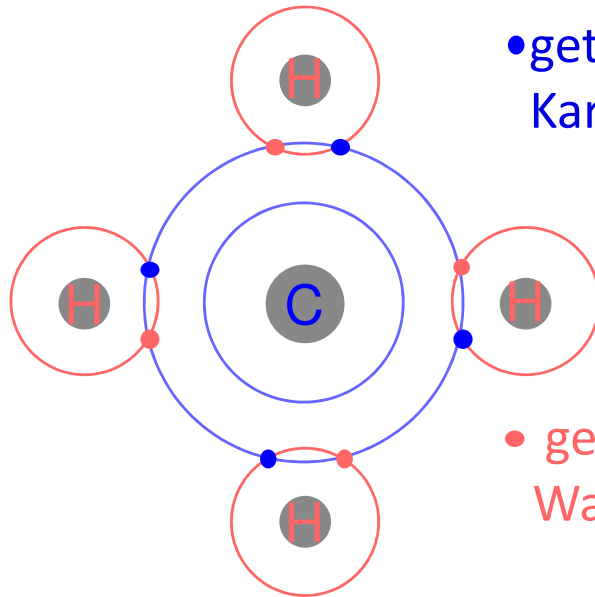


Bild 2.12: Veranschaulichung des Atomradius durch die Ionenradien.

Die benachbarten Atomen geben Elektronen ab, die paarweise den Raum zwischen den Atomrümpfen ausfüllen (Elektronenbrücken). Die Elektronenbrücke kann durch Zufuhr thermischer Energie teilweise aufgebrochen werden so, dass einzelne Elektronen für elektrische Leitung zur Verfügung stehen.





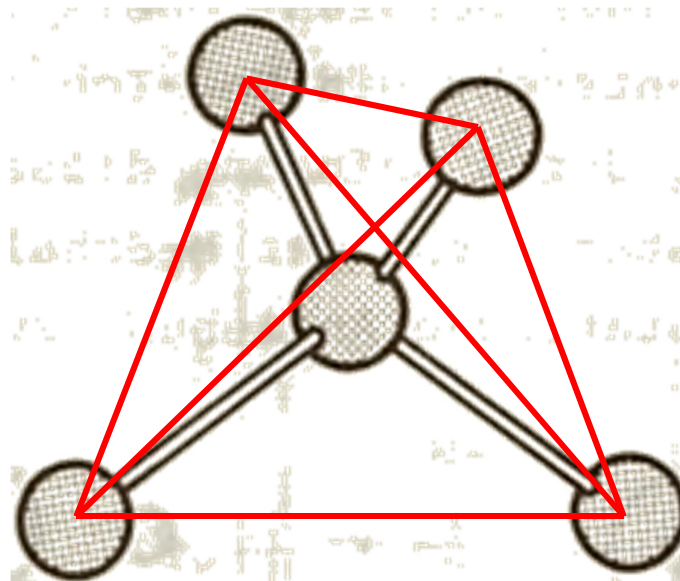
- geteilte Elektronen von einem Karbonatom (oder Si Atom)

- geteilte Elektronen der Wasserstoffatomen

C: 4 Valenzelektronen sind, Soll noch 4 e.
H: 1 Valenzelektron ist, Soll noch 1 e.

Folie: 35

Räumliche Anordnung der kovalenten Bindung bei vierwertigen Si (C) Atomen



Folie: 36

1 H 2.1																	2 He -
3 Li 1.0	4 Be 1.5											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2											13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57 La 1.1	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89 Ac 1.1															

H_2 (points to H), H_2O (points to O), Cl_2 (points to Cl), F_2 (points to F), SiC (points to Si and C), $GaAs$ (points to Ga and As)

a) Prinzip

Kovalente Bindung ist gerichteter Natur (homöopolare oder unpolare Bindung bzw. auch Atombindung genannt). Beachte Unterschied zur Ionenbindung! Orbitalüberlappungen der Valenzelektronen der einzelnen Atome bewirken die Bindung, die auf der Bildung von **gemeinsamen Elektronenpaaren** beruht. Die beteiligten Atome (Nichtmetalle) sind einander gleichwertig, d. h. sie gehören zum selben Element (z.B. F_2 , N_2) bzw. sind in ihren chemischen Eigenschaften ähnlich (Elektronegativität vergleichbar) (z.B. CS_2).

Schreibweisen: jedes Elektron durch einen Punkt $\cdot \cdot \cdot$
 jedes Elektronenpaar durch einen Strich $| \cdot \cdot |$
 nur das bindende Elektronenpaar wird dargestellt $F-F$

Dreifachbindungen auftreten können, d. h. 2 bzw. 3 Valenzelektronen sind an der Bindung zum Nachbarkohlenstoffatom beteiligt.

Diese Fähigkeit ist von entscheidender Bedeutung für die Entstehung von komplexen verknäulten Strukturen, wie sie bei hochpolymeren Werkstoffen bzw. in der Biochemie vorkommen.

Beispiele:

Polymere: Feste kovalente Bindung zwischen C und H bzw. C-C durch Überlappung der Orbitale, aber geringe Anziehung zwischen den Ketten (s. Bild 2.15)

⇒ geringe Festigkeit und niedrige Schmelzpunkte

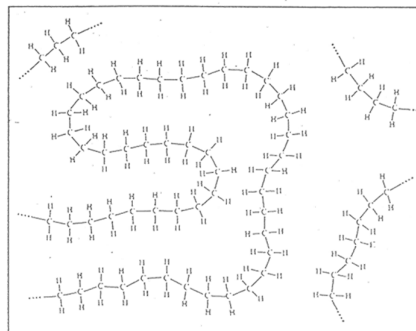


Bild 2.15: Struktur der Polyethylenkette

Diamant: Jedes C-Atom hat 4 Bindungen zu benachbarten C-Atomen;
 ⇒ Ausbildung eines "Diamantgitters"
 ⇒ hohe Härte und hoher Schmelzpunkt (s. Bild 2.16)

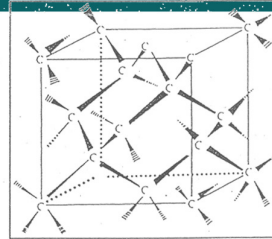


Bild 2.16: Dreidimensionales Diamantgitter

b) Koordinationszahlen

Beispiel Diamant:

$r/R = 1 \Rightarrow KZ = 12$ für ungerichtete Bindung erwartet, aber $KZ = 4$ (s. Bild 2.16)

Ursache: C ist sp^3 hybridisiert und geht mit seinen Valenzelektronen vier räumlich gerichtete Bindungen ein

Beispiel Silikate SiO_4^{4-} :

$$\frac{r_{Si^{4+}}}{r_{O^{2-}}} = \frac{0,039 \text{ nm}}{0,132 \text{ nm}} = 0,295 \quad \rightarrow \quad KZ = 4 \quad (2.13)$$

Diese Koordinationszahl liegt tatsächlich in Silikaten vor. Sie besitzen sowohl kovalente Bindungsanteile (wie aufgrund der Stellung von Si unter C im Periodensystem zu erwarten) als auch ionische Bindungsanteile, die aus der unterschiedlichen Elektronegativität von Si und O resultieren.

Analog zur ionischen Bindung besteht eine Abhängigkeit von Energie zum Bindungsabstand. Je höher der Anteil der überlappten Orbitale ist, desto stärker ist die Bindungsenergie (s. Bild 2.17).

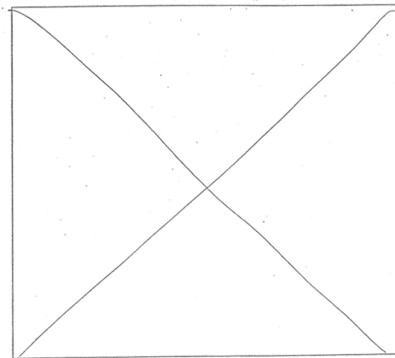


Bild 2.17: Genereller Zusammenhang zwischen Bindungslänge und Bindungsenergie der kovalenten Bindung in Anlehnung an die Terminologie der Ionenbindung

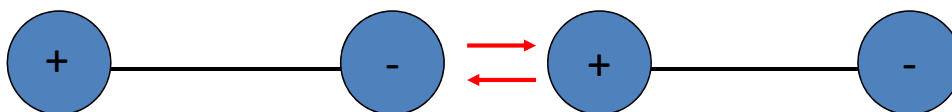
c) Bindungswinkel

Charakteristisch für die kovalente Bindung sind ferner Atomanordnungen in bestimmten Winkeln (Bindungswinkeln), die optimale Orbitalüberlappungen erlauben.

Beispiel:

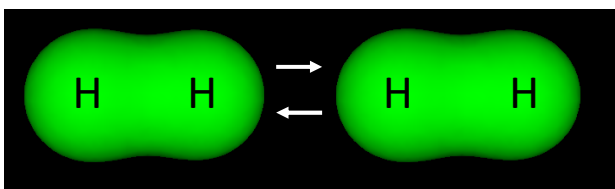
Kohlenstofftetraeder von Methan
 ⇒ Bindungswinkel beträgt $109,5^\circ$.
 Bei Mehrfachbindungen bzw. bei stark polaren Substituenten verkleinert sich der Winkel.

Es wird von Coulomb Kräften generiert zwischen Atomdipole oder Moleküldipole. (**Permanente Dipolbindung**)



1. Ändernde Dipol induzierte Bindung

Elektrisch symmetrisches Atom oder Molekül zeitlich polarisiert wird, und in seiner Umgebung Dipole induziert. z.B.: beim Verfestigung von Edelgasen zwischen H_2 und Cl_2 Moleküle.



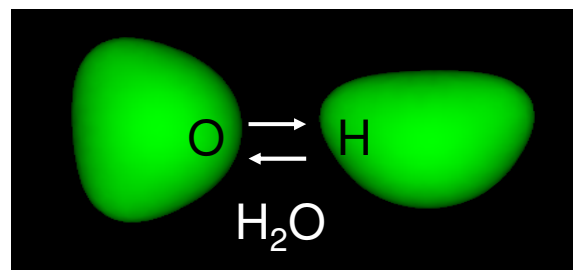
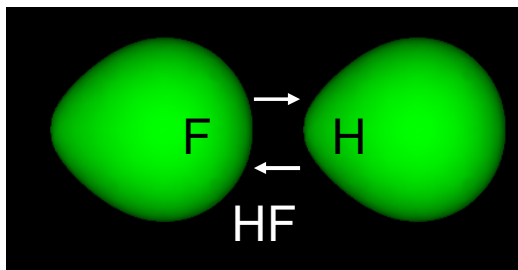
Schwächste Bindung
 Niedrige Schmelzpunkten
 und Siedepunkten

2. Von dauerhaften Dipol induzierte Bindung

Moleküle mit asymmetrischen Ladungsverteilung induzieren apolare Moleküle zu polare Moleküle Pl.: HCl ist polarisches Molekül.

3. Bindung zwischen dauerhaften Dipolen (Wasserstoff Bindung)

Die H bindet starke Kovalente Moleküle mit verschiedenen Elementen (HF, H₂O, NH₃). Bei allen H-F, H-O, H-N Bindungen ist die 1s¹ Elektron mit einer anderen Element geteilt und am Ende der Bindung bildet sich eine positiv geladene dauerhafte Pol. Das andere Teil der Molekül wird negativ geladen.



z.B. Bindunge zwischen Riesenmoleküle (Polimere).

Folie: 41

Die Bindungsenergie ist gering (wenige kJ/mol) gegenüber den Bindungsenergien, die durch ionische, kovalente oder metallische Bindung freigesetzt wird (200 -700 kJ/mol)

Mechanismus: Anziehung von entgegengesetzten Ladungen, aber keine Übertragung von Elektronen wie bei der Ionenbindung bzw. Teilung von Elektronen wie bei der Atombindung
 → physikalischer Bindungstyp

Es existieren 2 Hauptgruppen mit asymmetrischer Ladungsverteilung :

- temporäre (induzierte) Dipole (van der Waals'sche Bindung)
- permanente Dipole (Wasserstoffbrückenbindung)

a) Van der Waals'sche Bindung

Beispiel Argon:

Isoliertes Ar → perfekte sphärische Verteilung,

- bei Annäherung eines zweiten Ar-Atoms
- induzierte Ladungsverteilung im Kern
- Größe der Dipole ist klein
- geringe Bindungsenergie, ca. 1 kJ/mol (s. Bild 2.20)

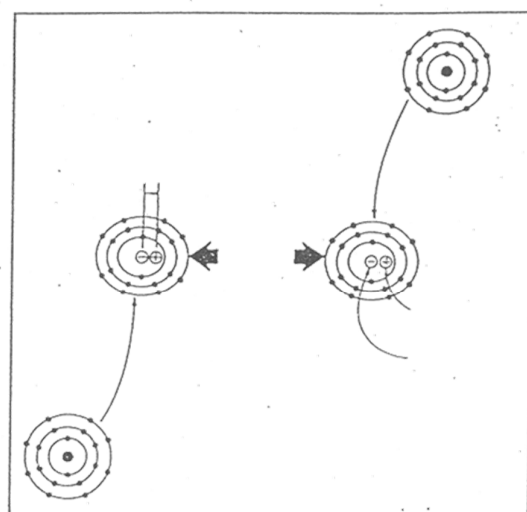


Bild 2.20: Bildung von induzierten Dipolen am Beispiel des Argons

Folie: 42

b) Wasserstoffbrückenbindung

Beispiel Wasser:

Permanenter Dipol durch die Ladungsverschiebung vom Wasserstoff zum Sauerstoff vorhanden, da Wasserstoff aufgrund seiner kleinen Masse das Elektron nicht so fest binden kann.

- H hat eine positive Partialladung, während O eine doppelt negative Partialladung trägt
- starker Dipol (s. Bild 2.21)

Ausbildung von Wasserstoffbrückenbindungen mit Bindungsenergie von ca. 20 kJ/mol

- Begründung für die Anomalie des Wassers

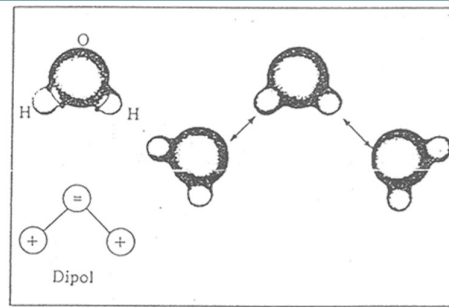


Bild 2.21: Permanenter Dipol des Wassers mit Ausbildung von Wasserstoffbrückenbindungen

Aufgrund der Bindungstypen und -energien kann eine Aussage über die Eigenschaften eines Materials gemacht werden. Der Schmelzpunkt, der auf dem Aufbrechen von Bindungen beruht, ist ein guter Vergleichsparameter (s. untenstehende Tabelle)

Material	Bindungstyp	Schmelzpunkt (°C)
NaCl	ionisch	801
C (Diamant)	kovalent	~3550
-(C ₂ H ₄) _n (Polyethylen)	kovalent und Wasserstoffbrückenbindung	~120
Cu	metallisch	1083,4
Ar	induzierter Dipol	-189
H ₂ O	Wasserstoffbrückenbindung	0

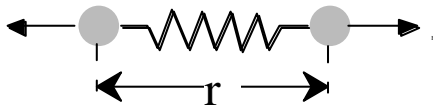
Bei Polyethylen gibt es aufgrund der unterschiedlichen Kettenlängen keinen exakten Schmelzpunkt, sondern nur einen Schmelzbereich.

Folie: 43

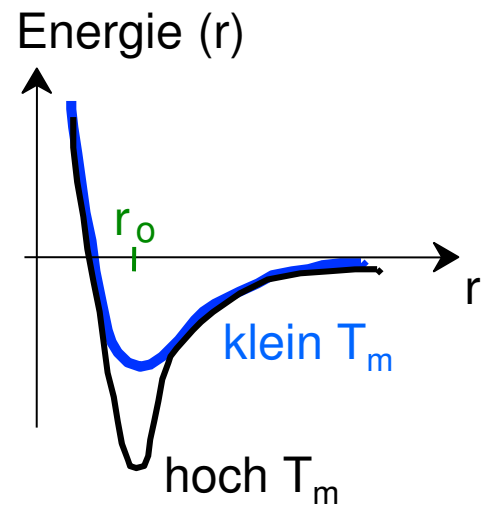
- **Atomabstand:** der Distanz zwischen der Atome im Gleichgewichtszustand, es wird von der Summe der auftretenden Anziehungs-kräften und Abstoßungskräften bestimmt.
- **Bindungsenergie:** die Energie die zwischen der Atome im Gleichgewichtsdistanz herrst.

Folie: 44

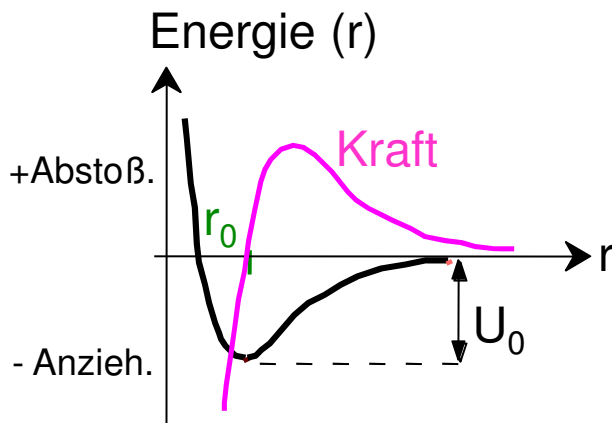
➤ Bindungslänge, r



➤ Schmelzpunkt, T_m

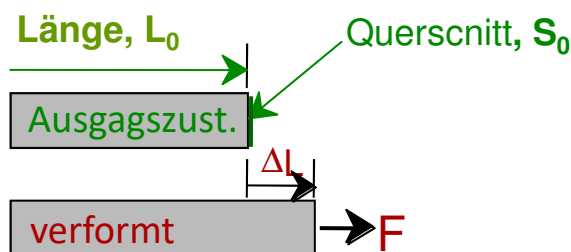


➤ Bindungsenergie, U_0



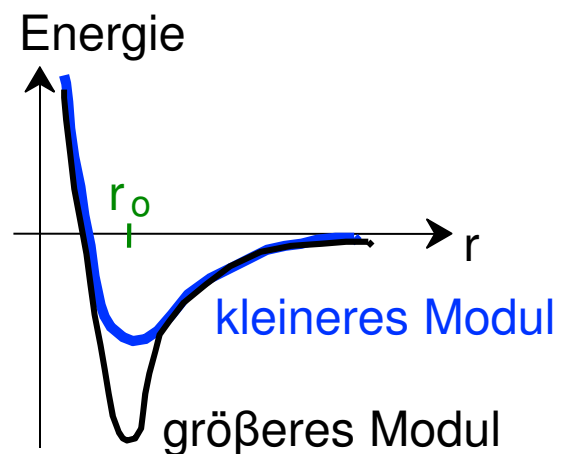
T_m größer, wenn U_0 größer

➤ Elastizitätsmodul, E



$$\frac{F}{S_0} = E \frac{\Delta L}{L_0}$$

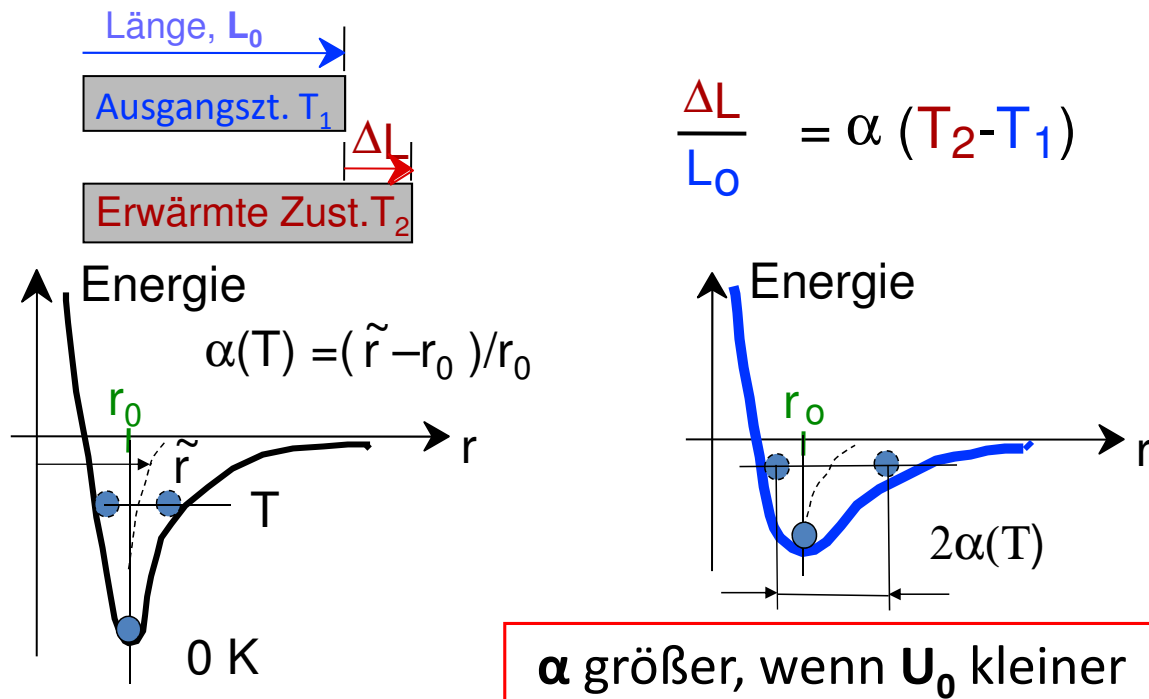
$E \sim$ Krümmung bei r_0



E größer, wenn U_0 größer

makroskopische Eigenschaften

➤ Wärmeausdehnungskoeffizient, α



Bindungstyp	Bindungsenergie	Bemerkungen
Ionen-	groß	ungerichtet Keramiken
Kovalente-	wechselnd groß (z.B. Diamant) klein (z.B. Bizmut)	gerichtet Halbleiter, Keramiken, Polimere
Metall-	wechselnd groß (z.B. Wolfram) klein (z.B. Quecksilber)	ungerichtet Metalle
Sekunder-	klein	gerichtet zwischen Moleküle, Polimerketten

Danke für die Aufmerksamkeit!

