

## Das vereinfachte Orbitalmodell (Moleküle)

Außer bei Wasserstoff (ein kugelsymmetrisches s-Orbital) kommen in organischen Verbindungen nur **Hybridorbitale** vor. Die für Sie relevanten Atome besitzen ein s-Orbital und, ab der 2. Periode, drei p-Orbitale, die jeweils mit zwei Elektronen besetzt werden können. Hybridorbitale werden aus einem s-Orbital und den bis zu drei p-Orbitalen durch Hybridisierung (Linearkombination der Wellenfunktionen) gebildet:

$sp^3$  bedeutet: Es gibt 4 Hybridorbitale (grau) und keine p-Orbitale (weiß) mehr.

$sp^2$ -bedeutet: Es gibt 3 Hybridorbitale und ein p-Orbital.

$sp$  bedeutet: Es gibt 2 Hybridorbitale und zwei p-Orbitale.

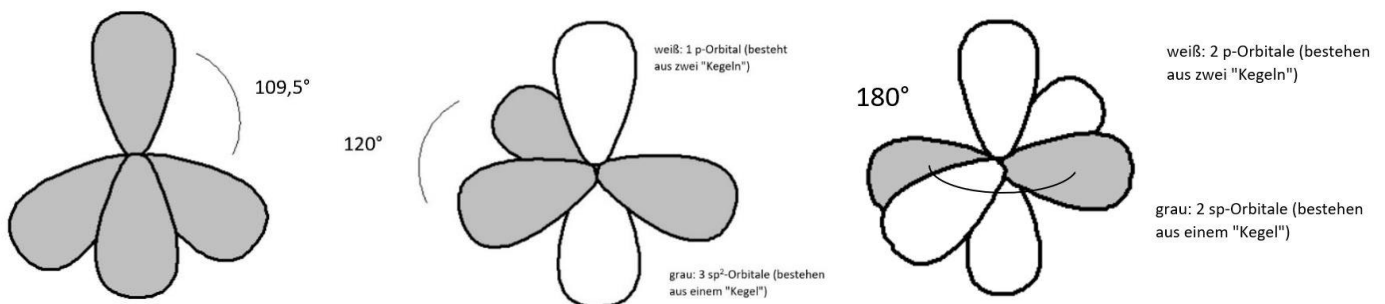


Bild 1:  $sp^3$ -Hybridisierung  
tetraedisch, 109°

Bild 2:  $sp^2$ -Hybridisierung  
trigonal-planar, 120°

Bild 3:  $sp$ -Hybridisierung  
linear, 180°

Wichtig ist zu wissen, dass **Hybridorbitale keine symmetrischen Hanteln** sind. Den antibindenden winzigen gegenüberliegenden Teil lässt man zur Vereinfachung in der Regel wie in Bildern 1 bis 3 weg. **p-Orbitale dagegen sind symmetrisch und hantelförmig**, d.h. man zeichnet sie quasi als zwei gegenüberliegende Wolken. Auch in jedes Hybridorbital passen zwei Elektronen. In der Summe sieht man also in jedem Bild 4 (Hybrid)orbitale mit Platz für 8 Elektronen (Oktettregel).

Eine Bindung kommt durch **Überlappung einfach besetzter (Hybrid)orbitale** zustande. Die Hybridorbitale können durch Überlappung mit s-Orbitalen benachbarter H-Atome oder Hybridorbitalen benachbarter anderer Atome  **$\sigma$ -Bindungen** eingehen. Eine  $\sigma$ -Bindung ist eine Bindung, die genau auf der Verbindungslinie (Rotationsachse) zwischen den Atomen ist. (Einfachbindung).  $\sigma$ -Bindungen bestimmen die **räumliche Struktur** des Moleküls (s. Bilder). Man spricht vom  **$\sigma$ -Grundgerüst**. Ebenso können in Hybridorbitalen **freie Elektronenpaare** untergebracht werden. p-Orbitale hingegen liegen senkrecht zur Verbindungsachse. Die Überlappung von p-Orbitalen führt immer zu  **$\pi$ -Bindungen** oder, wenn mehr als zwei benachbarte Atome p-Orbitale besitzen, **delokalisierten  $\pi$ -Elektronensystemen** (Mesomerie). Eine  $\pi$ -Bindung ist eine Bindung, die oberhalb und unterhalb bzw. - wenn es eine zweite gibt - vor und hinter der  $\sigma$ -Bindung liegt. Sie wird jeweils durch zwei gekrümmte Wolken dargestellt. Eine **Mesomerie** ist ausschließlich bei  $sp^2$ -hybridisierten Atomen möglich. Man spricht von Mesomerie, wenn mehr als zwei benachbarte Atome  $sp^2$ -hybridisiert sind. Durch die planare Struktur **überlappen dann die Elektronen in den p-Orbitalen** über alle benachbarten Atome und

bilden ein delokalisiertes  $\pi$ -Elektronensystem. In einem  $\pi$ -Elektronensystem kann die Anzahl der Elektronen auch etwas abweichen, z.B. wenn eine Ladung im Molekül vorliegt.

### Woher weiß ich, welche Hybridisierung vorliegt?

Um dies herauszufinden, zählt man die Raumrichtungen des betreffenden Atoms. Hierfür orientiert man sich an der Strukturformel mit allen freien Elektronenpaaren (Lewis-Schreibweise). Als je **eine Raumrichtung** gelten: Einfachbindung, Doppelbindung, Dreifachbindung und freie Elektronenpaare. Achtung: Wenn es mesomere Grenzstrukturen gibt, bedeutet das automatisch, dass die betroffenen Atome  $sp^2$ -hybridisiert sind, auch wenn sie in einer Grenzstruktur 4 Raumrichtungen aufweisen (häufig: negativ geladenes O-Atom mit Einfachbindung und drei freien Elektronenpaaren)

### Vorgehensweise für die Beschreibung von Molekülen:

1. Bestimmung und Nennung der Hybridisierung der wesentlichen Atome.
2. Beschreibung des  $\sigma$ -Grundgerüsts und der räumlichen Struktur.
3. Beschreibung der p-Orbitale und der daraus resultierenden lokalisierten  $\pi$ -Bindungen. (Doppel- und Dreifachbindungen)
4. Beschreibung der p-Orbitale und den daraus resultierenden delokalisierten  $\pi$ -Elektronensystemen.

### Beispiele:

#### Benzol:

Die Kohlenstoffatome im Benzolring sind  $sp^2$ -hybridisiert. Durch Überlappung je eines der  $sp^2$ -Hybridorbitale mit dem s-Atomorbital des Wasserstoffs und mit je zwei  $sp^2$ -Hybridorbitalen der benachbarten Kohlenstoffatome entstehen drei  $\sigma$ -Bindungen in einer Ebene, mit einem Bindungswinkel von  $120^\circ$ . So ergibt sich insgesamt eine planare sechseckige Struktur. Jedes Kohlenstoffatom besitzt noch ein einfach besetztes p-Orbital senkrecht zur Ebene der  $\sigma$ -Bindungen. Die p-Atomorbitale aller C-Atome überlappen und bilden ein geschlossenes ringförmiges  $\pi$ -Elektronensystem oberhalb und unterhalb der Ebene des Rings, über das die sechs Elektronen delokalisiert sind. [Dieser Zustand ist energieärmer als der hypothetische nicht delokalisierte Zustand mit drei Doppelbindungen. Diese Energiedifferenz entspricht der Mesomerieenergie /Resonanzenergie des Benzols]

#### Carboxylation:

Am Kohlenstoffatom der Carboxylgruppe liegt eine  $sp^2$ -Hybridisierung vor. Durch Überlappung dieser  $sp^2$ -Hybridorbitale mit Orbitalen benachbarter Atome entstehen 3  $\sigma$ -Bindungen: Ein  $sp^2$ -Hybrid-AO überlappt mit einem  $sp^3$ -Hybridatomorbital des benachbarten Kohlenstoffatoms des Alkylrests. Die anderen beiden überlappen mit je einem  $sp^2$ -Hybridorbital der benachbarten Sauerstoffatome. So entsteht die trigonal-planare Struktur des Carboxylations. mit einem Bindungswinkel von  $120^\circ$ . Am Kohlenstoffatom verbleibt ein p-Orbital senkrecht zur Ebene der  $\sigma$ -Bindungen. Dies ist mit einem Elektron besetzt. Die ebenfalls  $sp^2$ -hybridisierten Sauerstoffatome besitzen noch zwei voll besetzte  $sp^2$ -Hybridatomorbitale (freie Elektronenpaare) und ebenfalls ein einfach besetztes p-Orbital senkrecht zur Ebene der  $\sigma$ -Bindungen. Durch Überlappung der p-Orbitale der drei Atome entsteht ein delokalisiertes  $\pi$ -Elektronensystem, über das die 3 Elektronen aus den p-Orbitalen und das zusätzliche 4. Elektron der negativen Ladung delokalisiert sind.

# Lernen und Üben auf Quizlet



## I Atome (oben nicht beschrieben)

Das Orbitalmodell 1: Einblick in die Quantenmechanik		
Das Orbitalmodell 2: Quantenzahlen		
Das Orbitalmodell 3: Elektronenkonfiguration und räumliche Darstellung von Orbitalen		
Das Orbitalmodell 4: Aufgaben zur Elektronenkonfiguration		
Das Orbitalmodell 5: Besetzung der Orbitale und Periodensystem		

## II Moleküle

Die Molekül-Orbital-Theorie 1: Hybridorbitale		
Die Molekül-Orbital-Theorie 2: Arten von Bindungen		
Die Molekül-Orbital-Theorie 3: Welche Hybridisierung liegt vor?		
Die Molekül-Orbital-Theorie 4: Mesomerie		
Die Molekül-Orbital-Theorie 5: Räumliche Struktur von Molekülen		
Die Molekül-Orbital-Theorie 6: Beschreibung von Bindungen und räumlicher Struktur		
Die Molekül-Orbital-Theorie: Das Wesentliche		