

Zusammenfassung 4 - Hundtsche Regeln, Bindungstypen

- Hundtsche Regeln beschreiben, welche Zustände energetisch günstiger durch Elektronen in einem Orbital besetzt werden. Deshalb bestimmen Hundtsche Regeln die Elektronenkonfiguration innerhalb eines Orbitals.

- Um die Hundtschen Regeln aufzuschreiben, braucht man folgende Definitionen:

→ Gesamtspin S : S ist die Summe der Einzelspins s_i der Elektronen in einem Orbital. $\Rightarrow S = \sum_i s_i$

→ z-Komponente des Gesamtdrehimpulses L : L ist die Summe der magnetischen Quantenzahlen m_i . $\Rightarrow L = \sum_i m_i$

→ Gesamtdrehimpuls J : Wenn das Orbital weniger als halbvoll ist, dann $|J| = ||L| - |S||$.
Wenn das Orbital mehr als halbvoll ist, dann $|J| = |L| + |S|$.

- Hundtsche Regeln: Dabei soll zuerst 1 erfüllt sein, dann 2 und erst dann 3.

1) S setzt sich aus s_i so, dass $|S|$ maximal ist. \Rightarrow Spins sind möglichst parallel (bspw. alle positiv, wenn weniger als halbvoll).

2) $|L|$ ist maximal, wobei 1 gelten soll. \Rightarrow ~~Elektronen~~ ^{Bspw.} Elektronen belegen Zustände mit $m < 0$, wenn möglich.

3) Wenn das Orbital weniger als halbvoll ist, sind S und L antiparallel, wobei 1 und 2 gelten sollen. $\Rightarrow S$ und L haben untersch. Vorzeichen, also wenn Spins positiv sind, dann sind m_i negativ. (möglichst)

Wenn das Orbital mehr als halbvoll ist, dann sind S und L parallel. $\Rightarrow S$ und L haben gleiche Vorzeichen.

- Tipp: Es ist ganz einfach die Elektronenkonfiguration aufzuschreiben, wobei diese Regeln erfüllt sind. Es gibt zwei Möglichkeiten um die Hundtschen Regeln zu erfüllen:

1. Von links ($m < 0$) mit positiven Spins ($s_i > 0$) anfangen und nach rechts auffüllen bis das Orbital halbvoll ist. Danach mit negativen Spins von rechts ($m > 0$) nach links zurückkehren.

→ Bsp: ~~...~~ $_{14}\text{Si} = [\text{Ne}] 3s^2 3p^2 \Rightarrow 3p^2$: $m = -1 \ 0 \ 1$
 $s = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow & \\ \hline \end{array}$ $\Rightarrow |S| = |2 \cdot \frac{1}{2}| = +1$ (1. HR erfüllt)

$|L| = |-1+0| = -1$ (2. HR erfüllt)

$J = 0$, $S = +1$ & $L = -1$ (3. HR erfüllt)

$_{16}\text{S} = [\text{Ne}] 3s^2 3p^4 \Rightarrow 3p^4$: $m = -1 \ 0 \ 1$
 $s = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow \downarrow \\ \hline \end{array}$

$\Rightarrow |S| = |3 \cdot \frac{1}{2} - 1 \cdot \frac{1}{2}| = +1$ (1. HR erf.)

$|L| = |-1+0+1+1| = 1$ (2. HR erf.)

$|J| = 2$, $S = +1$, $L = +1$ (3. HR erf.)

2. Von rechts ($m > 0$) nach links mit negativen Spins ($s_i < 0$) auffüllen, bis das Orbital halbvoll ist. Dann mit pos. Spins von links nach rechts zurückkehren.

→ Bsp: $_{14}\text{Si} \dots 3p^2$: $m = -1 \ 0 \ 1$
 $s = \begin{array}{|c|c|c|} \hline & \downarrow & \downarrow \\ \hline \end{array}$ $\Rightarrow |S| = |2 \cdot \frac{1}{2}| = 1$ (1. HR erf.)

$|L| = |0+1| = 1$ (2. HR erf.)

$|J| = |-1+1| = 0$, $S = +1$ & $L = 1$ (3. HR erf.)

$_{16}\text{S} \dots 3p^4$: $m = -1 \ 0 \ 1$
 $s = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \hline \end{array}$ $\Rightarrow |S| = |3 \cdot \frac{1}{2} + 1 \cdot \frac{1}{2}| = 2$ (1. HR erf.)

$|L| = |-1+0+1| = 0$ (2. HR erf.)

$|J| = 2$, $S = -1$ & $L = -1$ (3. HR erf.)

- Bindungstypen:

1) Ionische Bindung: Diese Art der Bindung passiert nur zwischen unterschiedlichen Atomen und ist sehr stark. Es sind positiv und negativ ionisierbare Atome erforderlich. Also Elektronen werden ausgetauscht.

→ Es gibt drei Prozesse, die bei Bildung einer ionischen Bindung stattfinden:

• Ionisierung des Kations: Ein Atom gibt Elektron(en) ab und wird zu positivem Ion. Das passiert unter Energieaufnahme des Atoms, also die Ionisierungsenergie E_i in der Gesamtbilanz negativ gezählt werden.

• Ionisierung des Anions: Ein Atom nimmt Elektron(en) auf und wird zu negativem Ion. Das passiert unter Energieabgabe, d.h. in der Gesamtbilanz ist E_i pos. zu zählen.

• Molekülbildung: Kation und Anion nähern sich (ziehen sich) und bilden ein Molekül. Dabei wird auch Energie frei (positiv zu zählen).

Die Energie dafür wird mit $E_{el} = \int_{\infty}^r \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} dr = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}$ berechnet, $r_0 = (r_{\text{Anion}} + r_{\text{Kation}})$ ist Abstand der Ionenmittelpunkte.

→ Ionen lagern sich in Form von Kristallen, und sind Isolatoren.

2) Kovalente Bindung: Es passiert kein Elektronenaustausch, sondern die Elektronen werden gemeinsam benutzt. Bspw. bei H oder Cl wird nur ein Elektron gebraucht um Edelgaskonfig. zu erreichen. Deshalb nutzen bspw. 2 H-Atome ihre 1s-Elektr. (oder 2 Cl-At. ihre 3p-El.) gemeinsam um diese stabile Konfig. zu haben. Bei $_{15}\text{P}$ werden dagegen 3 Elektronen gebraucht, daher P kann drei kovalente Bindungen machen.

→ Koval. Bind. können zwischen gleichartigen oder untersch. Atomen gebildet werden. (z.B. H_2 , CH_4). Außer H werden kov. Bind. zwischen Elementen der IV. bis VII. Hauptgruppe gebildet.

→ Koval. Bind. sind schwächer als ionische Bindungen.

→ Bei der Entstehung einer kovalenten Bind. werden die gleichen Zustände der beteiligten Atome (z.B. 1s bei H) in einen höheren und einen niedrigen Eigenwert gespalten. Die Elektronen besitzen den niedrigen ENW und damit wird Energie abgegeben.

→ Das entstehende Molekül ist stabil.

→ Bei vierwertigen Elementen C, Si, Ge, Sn wird die kovalente Bindung mittels einer sp^3 -Hybridisierung gebildet. Dafür wird ein s-Elektron in p-Orbital gesendet und man hat s^1p^3 . Dann s und p Orbitale werden zu sp^3 -Orbitale mit gleicher Energie. Danach werden Kov. Bind. zwischen solcher Elemente gebildet. Solche Elemente nehmen Tetraederform ein. (Diamantgitter)

→ ~~Wichtig~~ ⇒ Aus Symmetriegründen der Tetraeder-Ordnung sind nur kovalente Bindungen bei diesen Elementen möglich.

→ Wichtig: Um abzuschätzen ob bei einem Molekül kovalente oder ionische Bindungen vorliegen, kann man Pauling-Skala nutzen. Dieses besagt, wenn die Differenz der Elektronegativitäten ΔE der Bindungspartner größer als 1,7 ist, dann ist die Bindung ionisch, sonst kovalent.

→ Elektronen sind lokalisiert, daher sind kovalent geb. Moleküle Isolatoren oder Halbleiter.

3) Metallische Bindung: Diesen Typ der Bindung sieht man bei Elementen mit schwach besetzten äußeren Schalen (Metalle). Solch gebundene Atome können die Edelgaskonf. nicht erreichen und deshalb sind die Elektronen um die festen, positiven Atomkerne frei beweglich.

→ Metalle bestehen aus einem Elektronensee, deshalb sind sie thermisch und elektrisch leitfähig.

→ Metallische Bindung kann zwischen beliebiger Konzentrationen unterschiedlicher Metalle gebildet werden. ⇒ Legierungen.

→ Metalle haben eine große Dichte, sind duktil.

→ Metallische Bindung ist schwächer als ionische und kovalente Bindung

gegenüber andere Bindungen

4) Dipolbindung: Dipolbindungen haben kaum Wirkung bei Festkörpern, da sie schwach sind, aber bedeutsam für Gase. Sie entsteht durch die Wechselwirkungen der permanenten Dipole bei Atomen.

→ Spezialfälle:

• Van-der-Waals-Bindung: Ist sehr schwach, wird durch statistisch erzeugte momentane Dipole hervorgerufen.

• Wasserstoffbrückenbindung: Ist relativ stark für eine Dipolbindung wird zwischen stark polaren Atomen wie Cl, F, O und Wasserstoff in Form von Gaspw. Cl-H-Cl gebildet.