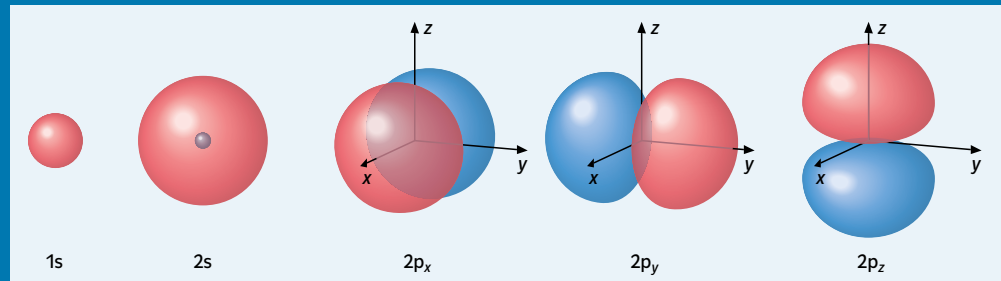


Das Orbitalmodell



- 1 Elektronen als stehende Wellen
- 2 Atomorbitale
- 3 Molekülorbitale und Hybridisierung

Bildquellen:
 B1 FOCUS (SPL), Hamburg; B2 FOCUS (Francis Simon/American Institute of Physics/SPL), Hamburg;
 B3 Süddeutsche Zeitung Photo (S.M.), München

1 Elektronen als stehende Wellen



B1 LOUIS DE BROGLIE (1892 – 1987)

Im Jahr 1924 stellte der französische Physiker LOUIS DE BROGLIE [B1] die Hypothese auf, ein Elektron sei nicht nur als kleines Teilchen zu betrachten, sondern es besitze auch die Eigenschaften einer Welle. Dies war eine wichtige Grundlage für die Entwicklung des Orbitalmodells. DE BROGLIES Hypothese wurde drei Jahre später durch Experimente mit Kathodenstrahlröhren bestätigt.

Doppelspalt Zwei enge, nahe beieinander liegende Öffnungen, durch die eine Welle treten kann. Typische Abmessungen eines Doppelspalts für Lichtwellen: Spaltbreite = 0,1 mm, Spaltabstand $g = 0,25$ mm

Größen

- g : Spaltabstand bzw. Gitterkonstante
- α : Winkel (siehe B4)
- s : Abstand Spalt – Schirm
- Δs : Gangunterschied
- k : ganze Zahl
- a_k : Abstand zw. Haupt- und Nebenmaximum Nr. k
- λ : Wellenlänge

Interferenz am Doppelspalt. Eine wichtige Eigenschaft von Wellen ist die *Interferenz*. Sie kann z. B. mit Wasser gezeigt werden [B2]: Eine Wasserwelle tritt durch zwei Öffnungen eines Hindernisses. Durch Überlagerung zweier kreisförmiger Wellen entsteht ein *Interferenzmuster*.

Auch Licht zeigt Interferenz [B3]: Fällt ein Lichtstrahl durch einen Doppelspalt, so erhält man auf einem Schirm ein Muster aus hellen und dunklen Streifen. Dieses Phänomen lässt sich durch Überlagerung von Lichtwellen erklären. Jeder Spalt wird zum Ausgangspunkt einer kreisförmigen *Elementarwelle*. Die hellen Streifen entstehen durch Verstärkung, wenn also Wellenberg auf Wellenberg bzw. Wellental auf Wellental trifft. An den dunklen Streifen löschen sich die Wellen gegenseitig aus, d.h., ein Wellenberg trifft auf ein Wellental.

Interferenz ist die Verstärkung und Auslöschung von Wellen durch Überlagerung.

Interferenzmuster und Wellenlänge. Aus den Abständen der hellen und dunklen Streifen im Interferenzmuster kann man die Wellenlänge des Lichts berechnen, indem man jeden der beiden Spalte als Ausgangspunkt einer Elementarwelle betrachtet [B4]:

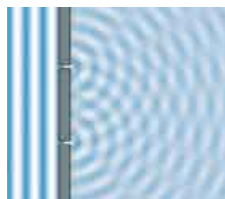
Beide Spalte haben die gleiche Entfernung zum Schnittpunkt der Mittelsenkrechten mit dem Schirm. Hier sind beide Elementarwellen in gleicher Phase, d.h., Wellenberg trifft auf Wellenberg. Durch gegenseitige Verstärkung entsteht so das **Hauptmaximum**.

Zum Punkt P ergeben sich unterschiedliche Entfernungen s_1 und s_2 . Die Differenz ist der **Gangunterschied**: $\Delta s = s_2 - s_1$. Beträgt der Gangunterschied Δs genau eine Wellenlänge λ , so sind im Punkt P beide Wellen in gleicher Phase und verstärken sich gegenseitig zu einem **Nebenmaximum**. Das Gleiche gilt, wenn der Gangunterschied ein Vielfaches der Wellenlänge ist (also $\Delta s = k \cdot \lambda$ mit $k = 1; 2; 3; \dots$). Bei den dunklen Streifen zwischen den Maxima (also $\Delta s = k \cdot \lambda/2$ mit $k = 1; 3; 5; \dots$) löschen sich die Wellen aus.

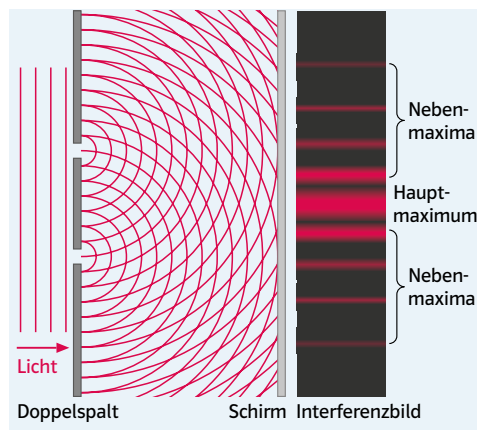
Der Gangunterschied kann aus dem Winkel α und dem Spaltabstand g berechnet werden: $\Delta s = g \cdot \sin \alpha$

Einsetzen der Bedingung $\Delta s = k \cdot \lambda$ für die Nebenmaxima ergibt:

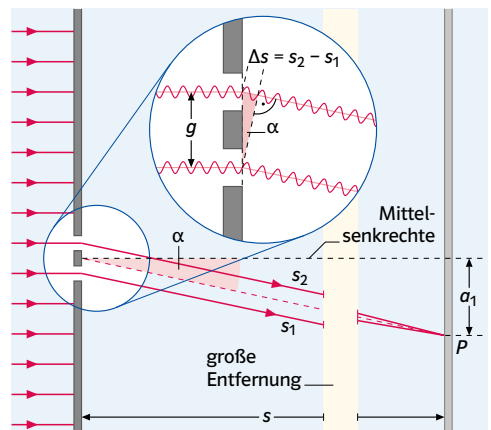
$$k \cdot \lambda = g \cdot \sin \alpha \quad \text{mit } k = 1; 2; 3; \dots$$



B2 Beugung von Wasserwellen am Doppelspalt



B3 Interferenz von Licht am Doppelspalt (Größenverhältnisse nicht wie im realen Experiment)



B4 Zusammenhang zwischen dem Abstand der Maxima und der Wellenlänge

In der Praxis baut man den Versuch so auf, dass der Winkel α sehr klein ist. Statt des Winkels α misst man die Abstände a_1 und s . Es gilt: $\tan \alpha = a_1/s$
Für sehr kleine Winkel α gilt außerdem in guter Näherung: $\sin \alpha = \tan \alpha$

Einsetzen in die Bedingung für das Nebenmaximum mit $k = 1$ ergibt:

$$\lambda = g \cdot \sin \alpha = g \cdot \tan \alpha = g \cdot \frac{a_1}{s}$$

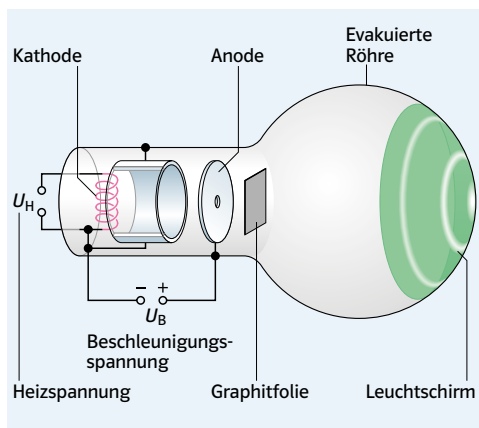
Allgemein gilt für alle Nebenmaxima:

$$\lambda = g \cdot \frac{a_k}{k \cdot s} \quad \text{mit } k = 1; 2; 3; \dots$$

Dieselbe Formel gilt für die Interferenz am optischen Gitter; hier liegen viele Spalte im Abstand g nebeneinander. Der Abstand g ist in diesem Fall die Gitterkonstante.

Die Wellenlänge ist proportional zum Abstand zwischen den Maxima des Interferenzmusters.

Interferenz von Elektronen. Kristallgitter wirken wie optische Gitter mit sehr kleinen Gitterkonstanten. An ihnen beobachtet man die Interferenz sehr kurzwelliger Strahlung, z. B. Röntgenstrahlung. Aber auch ein Strahl schnell fliegender Elektronen zeigt Interferenz an Kristallgittern, sodass man seine Wellenlänge berechnen kann.



B5 Interferenz von Elektronen an Graphitkristallen in einer Kathodenstrahlröhre

Mit einer Kathodenstrahlröhre [B5] kann man sowohl die Wellenlänge als auch den Impuls bewegter Elektronen ermitteln. Die geheizte Kathode gibt Elektronen ab, diese werden von der positiv geladenen Anode angezogen und treffen durch ein Loch auf die Folie mit kleinen Graphitkristallen. Auf dem Leuchtschirm erkennt man konzentrische Ringe. (Wegen der regellosen Anordnung der Kristalle erhält man ein rundes Interferenzmuster.) Vergrößert man die Beschleunigungsspannung U_B und damit den Impuls der Elektronen, so verkleinern sich die Radien der Interferenzringe.

Den Impuls p der einzelnen Elektronen berechnet man aus der Beschleunigungsspannung, die Wellenlänge λ aus den Radien der Interferenzringe und der Gitterkonstanten des Graphits [B6]. Dabei stellt man fest, dass p und λ umgekehrt proportional sind:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \Leftrightarrow \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad \Leftrightarrow \quad p \cdot \lambda = h$$

($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J s ist die Planck-Konstante.)

Diese Gleichung wird als **De-Broglie-Beziehung** bezeichnet. Mit ihr kann jedem bewegten Teilchen eine Wellenlänge zugeordnet werden, die **De-Broglie-Wellenlänge**.

Mit der De-Broglie-Beziehung kann man den Impuls p eines Teilchens und die Wellenlänge λ des Teilchenstrahls ineinander umrechnen.

Die **De-Broglie-Beziehung** lässt sich für Licht bzw. Photonen durch einfaches Gleichsetzen von $E = mc^2$ und $E = h \cdot c/\lambda$ ableiten. Man erhält $h/\lambda = m \cdot c = p$. Die Idee von LOUIS DE BROGLIE war, dass die Beziehung für *alle* Teilchen gilt. Für viele Teilchen wurde dies experimentell bestätigt, sogar für das große Molekül C_{60} (Buckminsterfulleren)

Größen

- g : Spaltabstand bzw. Gitterkonstante
- α : Winkel (siehe B4)
- s : Abstand Spalt – Schirm
- Δs : Gangunterschied
- k : ganze Zahl
- a_k : Abstand zw. Haupt- und Nebenmaximum Nr. k
- λ : Wellenlänge
- v : Geschwindigkeit
- p : Impuls $p = m \cdot v$
- U_B : Beschleunigungsspannung
- h : Planck-Konstante
- E_{kin} : kinetische Energie
- h : Planck-Konstante
- m_e : Masse eines Elektrons
- e : Elementarladung

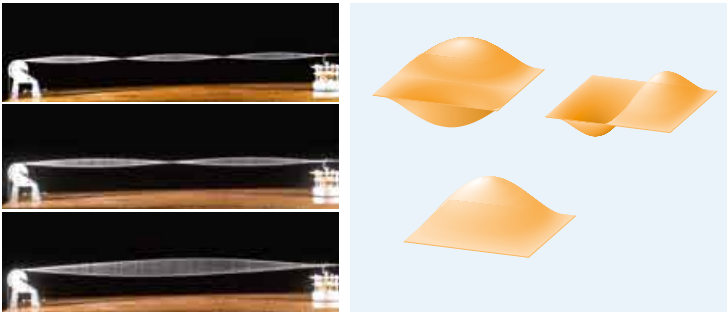
In der Kathodenstrahlröhre wird die potentielle Energie jedes Elektrons im elektrischen Feld in kinetische Energie umgewandelt: $E_{kin} = E_{pot}$
Einsetzen der kinetischen Energie eines Elektrons $E_{kin} = p^2/(2m_e)$ [B8] und der potentiellen Energie $E_{pot} = U_B \cdot e$ ergibt:

$$\frac{p^2}{2m_e} = U_B \cdot e \quad \Leftrightarrow \quad p = \sqrt{2 U_B \cdot e \cdot m_e} = \sqrt{2 U_B \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}$$

Aus der Graphitstruktur folgen mehrere Gitterkonstanten. Für den Radius a_1 des *ersten* Interferenzrings gilt: $g_1 = 2,13 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ und $k = 1$.
Die Wellenlänge λ des Elektronenstrahls ist folglich: $\lambda = g_1 \cdot a_1/s$

Beispiel: In einer Kathodenstrahlröhre mit $s = 130 \text{ mm}$ und $U_B = 7000 \text{ V}$ wird der Radius a_1 des ersten Interferenzrings gemessen: $a_1 = 8,9 \text{ mm}$
Die Rechnung ergibt: $p = 4,52 \cdot 10^{-23} \text{ kg m s}^{-1}$ und $\lambda = 1,46 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
 $p \cdot \lambda = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \approx h$

B6 Beispiel zur Berechnung des Impulses und der Wellenlänge von Elektronen in der Kathodenstrahlröhre mit eingebauter Graphitfolie



B7 Stehende Wellen auf einer Saite (links), auf einer Membran (rechts)

Stehende Wellen. Die De-Broglie-Beziehung war die entscheidende Anregung für Wissenschaftler, auch Elektronen im Atom als Welle zu beschreiben. Da die Elektronen das Atom ohne Energiezufuhr nicht verlassen, kann es keine sich ausbreitende Welle sein. Es gibt jedoch auch *stehende Wellen*, die sich nicht ausbreiten und in einem begrenzten Raum existieren.

Ein bekanntes Beispiel ist eine Saite. Auf ihr können sich unterschiedliche stehende Wellen ausbilden, die den *Grundton* und die *Flageoletttöne* erzeugen [B7 links]. An den **Wellenbäuchen** schwingt die Saite am stärksten, d.h., die Auslenkung der **Wellenfunktion** ist maximal. Dazwischen, an den **Knotenpunkten**, befindet sie sich in Ruhe, d.h., die Auslenkung der **Wellenfunktion** ist null. Wellenbäuche und Knotenpunkte haben feste Orte. An den Enden der Saite *muss* jeweils ein Knotenpunkt sein. Deshalb kann die stehende Welle nicht jede beliebige Wellenlänge annehmen.

Bei der Saitenlänge L ist die größtmögliche Wellenlänge $\lambda = 2L$. Für die Wellenlängen λ_n stehender Wellen gilt die folgende Bedingung:

$$\lambda_n = \frac{2}{n} \cdot L \quad \text{mit } n = 1; 2; 3; \dots$$

Stehende Wellen können sich auch auf begrenzten Flächen ausbilden, z.B. auf einer schwingenden Platte oder Membran. Wird eine Membran durch einen Lautsprecher angeregt, so entstehen zweidimensionale stehende Wellen [B7 rechts]. Die Wellenbäuche werden durch **Knotenlinien** begrenzt. Auch hier zeigt sich, dass nur bestimmte Wellenlängen möglich sind.

Bedingung für Wellenlängen:

$$\lambda_n = \frac{2}{n} \cdot L \quad \text{mit } n = 1; 2; 3; \dots$$

Umrechnen von λ_n in p_n (De-Broglie-Beziehung):

$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = n \cdot \frac{h}{2L}$$

Zur Berechnung der Energiewerte des Elektrons wird die Formel für die kinetische Energie mit dem Impuls $p = m_e \cdot v$ ausgedrückt:

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m_e \cdot v^2 = m_e^2 \cdot \frac{v^2}{2m_e} = \frac{p^2}{2m_e}$$

Einsetzen der Beziehung für p_n ergibt:

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m_e} = \frac{h^2}{8m_e \cdot L^2} \cdot n^2 \quad \text{mit } n = 1; 2; 3; \dots$$

B8 Energiewerte stehender Elektronenwellen im eindimensionalen (linearen) Kasten mit der Länge L

Das Elektron im eindimensionalen Kasten.

Im dreidimensionalen Raum eines Atoms beschreibt man die Elektronen als dreidimensionale stehende Wellen. Da deren Berechnung kompliziert ist, kann man zunächst vereinfacht das Elektron im Atom als eine *eindimensionale* stehende Welle betrachten, die sich zwischen zwei undurchdringlichen Wänden ausbildet. In diesem eindimensionalen Kasten der Länge L kann das Elektron nur bestimmte Wellenlängen λ_n ausbilden, analog zur schwingenden Saite. Aus jeder Wellenlänge λ_n kann der Impuls p_n berechnet werden, und daraus die kinetische Energie des Elektrons; diese ist gleichzeitig die Energie der stehenden Welle E_n [B8]. Man erkennt, dass die Energie nur ganz bestimmte Werte annehmen kann. Je länger der Kasten, desto kleiner sind diese Energiewerte:

$$E_n = \frac{h^2}{8m_e \cdot L^2} \cdot n^2$$

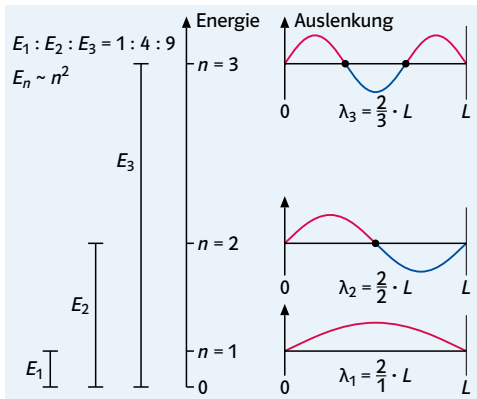
Die einzelnen Zustände werden durch die Zahl n charakterisiert. Sie wird als **Quantenzahl** bezeichnet, da die Energie nur in bestimmten Portionen (Quanten) auftritt.

B9 zeigt die ersten drei Energiewerte des Elektrons im eindimensionalen Kasten und die Wellenfunktionen. Man sieht, dass die Anzahl der inneren Knotenpunkte $n-1$ ist. Je kürzer die Wellenlänge, desto größer ist die Anzahl der Knotenpunkte und die Energie.

Flageoletttöne entstehen, wenn man vor dem Anschlagen bzw. Streichen einer Saite durch Berühren mit einem Finger einen Knotenpunkt erzeugt

Wellenfunktion Die „Form“ einer Welle wird mathematisch mit einer Wellenfunktion beschrieben

Auslenkung Funktionswert der Wellenfunktion an einem bestimmten Punkt. Bei Saiten und Membranen ist dies unmittelbar anschaulich. Bei Elektronen kann man aus dem quadrierten Wert der Auslenkung eine Größe berechnen, die man als Aufenthaltswahrscheinlichkeit interpretiert



B9 Elektronenwelle im eindimensionalen (linearen) Kasten, mit inneren Knotenpunkten (*)

Das Elektron im zweidimensionalen Kasten.

Die Modellvorstellung der stehenden Elektronenwelle kann auf einen zweidimensionalen Kasten erweitert werden. In diesem Fall sind die Schwingungszustände mit denen einer schwingenden Membran vergleichbar. Zur Charakterisierung der möglichen Zustände sind die zwei Quantenzahlen n_x und n_y erforderlich. Für die Energiewerte gilt:

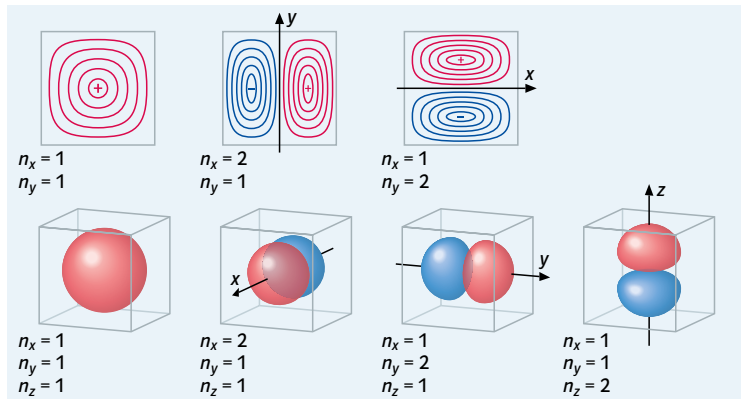
$$E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2}{8m_e \cdot L_x^2} \cdot n_x^2 + \frac{\hbar^2}{8m_e \cdot L_y^2} \cdot n_y^2$$

B10 zeigt die Zustände eines *quadratischen* Kastens mit $L_x = L_y$. Die farbigen Linien verbinden Orte gleicher Auslenkung der Wellenfunktion. Die Knotenlinien trennen Bereiche mit positiver und negativer Auslenkung. Für $n_x = 1$ und $n_y = 1$ ergibt sich der energieärmste Zustand, der keine innere Knotenlinie aufweist.

Der Zustand mit $n_x = 2$ und $n_y = 1$ hat eine innere Knotenlinie. Der Zustand mit $n_x = 1$ und $n_y = 2$ ist sehr ähnlich, nur seine Knotenlinie hat eine andere Richtung. Auch die Energiewerte der beiden Zustände sind gleich. Man bezeichnet sie als *entartet* bzw. spricht von einer *Entartung* der Zustände.

Das Elektron im dreidimensionalen Kasten.

Eine weitere Annäherung an die stehende Welle eines Elektrons im Atom ist das Modell der Elektronenwelle im dreidimensionalen würfelförmigen Kasten [B10 unten].



B10 Elektronenwelle im zweidimensionalen quadratischen Kasten (oben) und im dreidimensionalen würfelförmigen Kasten (unten)

Für die Energiezustände der Elektronenwellen im dreidimensionalen Kasten gilt allgemein:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{8m_e \cdot L_x^2} \cdot n_x^2 + \frac{\hbar^2}{8m_e \cdot L_y^2} \cdot n_y^2 + \frac{\hbar^2}{8m_e \cdot L_z^2} \cdot n_z^2$$

B10 zeigt die Zustände eines *würfelförmigen* Kastens mit $L_x = L_y = L_z$. Die farbigen Oberflächen verbinden Punkte gleicher Auslenkung der Wellenfunktion (rot: positives Vorzeichen; blau: negatives Vorzeichen). Andere jeweils gleiche Auslenkungen könnten durch weitere Oberflächen dargestellt werden. Statt Knotenlinien treten bei dreidimensionalen Wellen **Knotenflächen** auf.

Die drei Quantenzahlen n_x , n_y und n_z charakterisieren die möglichen Zustände. Ist der Wert aller drei Quantenzahlen 1, ergibt sich der energieärmste Zustand ohne innere Knotenfläche. Erhält eine der Quantenzahlen den Wert 2, ergeben sich drei Zustände mit jeweils einer inneren Knotenfläche. Die drei Zustände sind entartet, d.h., sie unterscheiden sich nur durch die räumliche Orientierung der Knotenfläche und besitzen dieselbe Energie.

Entartung Wenn sich mehrere Zustände *nur* durch die Richtung im Koordinatensystem unterscheiden lassen, bezeichnet man sie als entartet. Entartete Zustände besitzen die gleiche Energie

Größen

- L : Länge (einer Saite oder eines Kastens)
- λ : Wellenlänge
- v : Geschwindigkeit
- p : Impuls $p = m \cdot v$
- E_{kin} : kinetische Energie
- n : Quantenzahl
- h : Planck-Konstante
- m_e : Masse eines Elektrons
- Index n** : zur Quantenzahl n
- Index x, y , bzw. z** : in Richtung der kartesischen Koordinate x, y bzw. z

A1 Zeigen Sie, dass $E_{2,1,1}$, $E_{1,2,1}$ und $E_{1,1,2}$ für einen würfelförmigen Kasten einander gleich sind und dass sie für einen quaderförmigen Kasten i. A. nicht gleich sind. Formulieren Sie eine Vermutung über den Zusammenhang zwischen Symmetrie und Entartung.

2 Atomorbitale

n	l	m	Bezeichnung der Orbitale
1	0	0	1s
2	0	0	2s
2	1	-1	2p
2	1	0	
2	1	+1	
3	0	0	3s
3	1	-1	3p
3	1	0	
3	1	+1	
3	2	-2	3d
3	2	-1	
3	2	0	
3	2	+1	
3	2	+2	
4	0	0	4s
4	1	-1	4p
4	1	0	
4	1	+1	
4	2	-2	4d
4	2	-1	
4	2	0	
4	2	+1	
4	2	+2	
4	3	-3	4f
4	3	-2	
4	3	-1	
4	3	0	
4	3	+1	
4	3	+2	
4	3	+3	

B1 Kombinationen von Quantenzahlen bis $n = 4$ beim Wasserstoffatom

In den Jahren 1925 und 1926 entwickelten die Physiker ERWIN SCHRÖDINGER und WERNER HEISENBERG [B2] unabhängig voneinander zwei formal unterschiedliche, aber im Ergebnis gleichwertige Beschreibungen der Elektronenwellen in Atomen und deren Energiezustände. Heutige Quantenchemiker arbeiten i.d.R. mit dem Formalismus von SCHRÖDINGER.

Elektronenwellen im Atom. Ähnlich wie beim dreidimensionalen Kasten (Kap. 1) kann man einem Elektron im Atom stehende Wellen zuordnen, denen bestimmte Energien entsprechen. Zur Charakterisierung der Zustände sind drei Quantenzahlen erforderlich. Die Abhängigkeit der Energiewerte von den Quantenzahlen ist aus mehreren Gründen komplizierter als beim dreidimensionalen Kasten. Das Elektron ist nicht durch viereckige Wände „eingesperrt“, sondern durch die elektrostatische Anziehung auf einen kugelsymmetrischen Raumbereich um den Atomkern konzentriert. Die Anziehungskraft nimmt außerdem mit dem Abstand zum Atomkern ab.

Quantenzahlen des Wasserstoffatoms. Das Wasserstoffatom ist mit nur einem Elektron das einfachste aller Atome. Aus diesem Grund lassen sich seine Zustände vergleichsweise am einfachsten berechnen. Man erhält Wellenfunktionen und Energiewerte, die durch drei Quantenzahlen charakterisiert werden:

- Die **Hauptquantenzahl** n kann jede natürliche Zahl sein ($n = 1, 2, 3, \dots$). Jede Hauptquantenzahl entspricht einer *Schale* im Schalenmodell. Im Wasserstoffatom ist die Energie des Elektrons allein abhängig von der Hauptquantenzahl.
- Die **Nebenquantenzahl** l ist abhängig von der Hauptquantenzahl des Zustands. Sie kann nur die ganzzahligen Werte von $l = 0$ bis $l = n - 1$ annehmen.
- Die **Magnetquantenzahl** m ist wiederum abhängig von der Nebenquantenzahl des Zustands. Sie kann nur die ganzzahligen Werte von $m = -l$ bis $m = +l$ annehmen.

B1 zeigt alle möglichen Kombinationen von Quantenzahlen bis $n = 4$. Den energieärmsten Zustand mit $n = 1, l = 0$ und $m = 0$ bezeichnet man als **Grundzustand**.



B2 ERWIN SCHRÖDINGER (1887–1961, links); WERNER HEISENBERG (1901–1976, rechts)

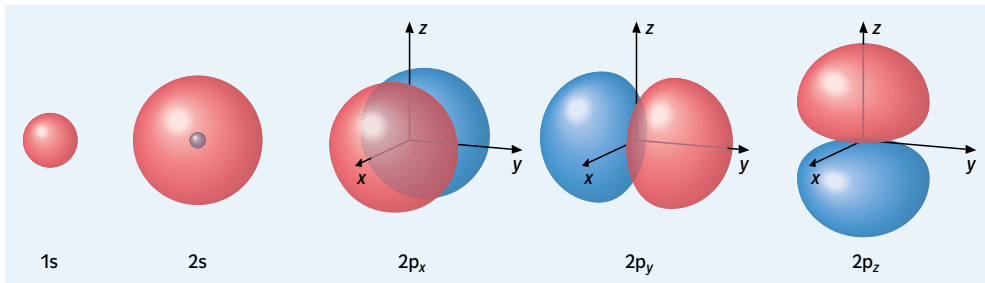
Orbitale des Wasserstoffatoms. Einen Zustand eines Elektrons bezeichnet man als *Orbital*. Jeder Kombination der drei Quantenzahlen lässt sich ein Orbital zuordnen. Die Bezeichnung eines Orbitals wird folgendermaßen aus den Quantenzahlen abgeleitet:

- Zuerst schreibt man die **Hauptquantenzahl**.
- Statt der **Nebenquantenzahl** schreibt man **s** für $l = 0$, **p** für $l = 1$, **d** für $l = 2$, **f** für $l = 3$.
- Die **Magnetquantenzahl** gibt man nicht an.

Beispiel: $n = 2$ und $l = 1 \Rightarrow 2p$ -Orbital

Die grafische Darstellung der Orbitale zeigt Flächen gleicher Auslenkung der Wellenfunktion [B3]. Für den energieärmsten Zustand, das 1s-Orbital, ergibt sich eine Kugeloberfläche. Die Oberfläche einer „unendlich großen Kugel“ würde der *Auslenkung null* entsprechen. Der Ort *maximaler Auslenkung* ist der Mittelpunkt der Kugel. Der nächsthöhere Energiezustand mit $n = 2$ umfasst vier Orbitale mit je einer Knotenfläche. Beim 2s-Orbital ($l = 0$) ist die Knotenfläche eine Kugeloberfläche, die die Auslenkungen mit entgegengesetzten Vorzeichen begrenzt. Die drei entarteten 2p-Orbitale haben je eine Knotenebene. Sie sind jeweils zu einer Koordinatenachse rotationssymmetrisch; ihre Bezeichnungen sind $2p_x, 2p_y$ und $2p_z$.

Die Nebenquantenzahl bestimmt die *Symmetrie* der Orbitale. Für $l = 0$ ergeben sich kugelsymmetrische s-Orbitale, für $l = 1$ rotationssymmetrische p-Orbitale. Die Anzahl der möglichen Magnetquantenzahlen ist gleich der Anzahl der Orbitale. Für $l = 2$ ergeben sich fünf d-Orbitale, für $l = 3$ sieben f-Orbitale.



B3 s- und p-Orbitale für $n = 1$ und $n = 2$. Die dargestellten Flächen sind Flächen gleicher Auslenkung der Wellenfunktion

Atome mit mehreren Elektronen. Wenn in einem Atom mehrere Elektronen vorhanden sind, muss man auch deren gegenseitige Wechselwirkung berücksichtigen. Dies führt zu hochkomplizierten Rechnungen. Aus diesem Grund überträgt man als Näherung die bei der Berechnung des Wasserstoffatoms gewonnenen Erkenntnisse auf alle anderen Atome, d.h., man schreibt ihnen die gleichen Orbitalformen zu. Die Zuordnung der Elektronen („Besetzung“) beginnt beim energieärmsten Orbital und wird nach steigender Energie fortgesetzt. Die Energie ist hier (anders als beim Wasserstoffatom) auch von der Nebenquantenzahl abhängig.

Bei Mehrelektronensystemen reichen die Quantenzahlen n , l und m nicht aus. Man benötigt zusätzlich die **Spinquantenzahl s** . Bei einem gegebenen Orbital sind die zwei Spinquantenzahlen $+\frac{1}{2}$ und $-\frac{1}{2}$ möglich. Nach dem **Pauli-Prinzip** gilt allgemein, dass sich zwei Elektronen eines Atoms in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden müssen. Damit lassen sich einem Orbital höchstens zwei Elektronen mit den Spinquantenzahlen $+\frac{1}{2}$ und $-\frac{1}{2}$ zuordnen. Die Elektronen eines Orbitals bilden ein **Elektronenpaar**.

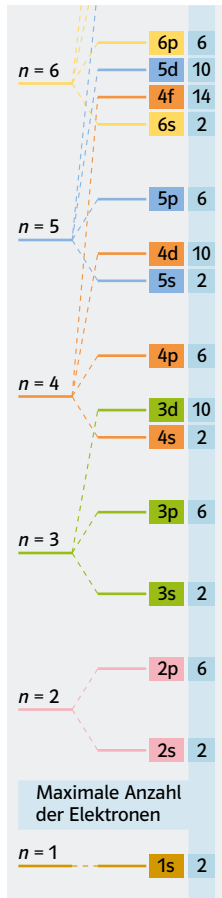
Aufbau der Elektronenhüllen. Die Zuordnung aller Elektronen eines Atoms zu Orbitalen bezeichnet man als **Elektronenkonfiguration**. B4 zeigt die Elektronenkonfigurationen für die Grundzustände der Atome bis zur Kernladungszahl 10. In der **Pauling-Schreibweise** (Kästchenschreibweise) entspricht jedes Kästchen einem Orbital. Die Elektronen werden durch Pfeile

symbolisiert, deren entgegengesetzte Richtung für die beiden möglichen Spinquantenzahlen steht. Orbitale mit gleicher Haupt- und Nebenquantenzahl werden als zusammenhängende Kästchen geschrieben. Nach der **Regel von HUND** werden Orbitale gleicher Haupt- und Nebenquantenzahl (entartete Orbitale) zunächst einfach besetzt. Deshalb treten erst ab dem O-Atom doppelt besetzte p-Orbitale auf. Die Elektronenkonfiguration eines Atoms lässt sich auch in einer **vereinfachten Schreibweise** angeben. Dabei wird die Hauptquantenzahl mit der Angabe des Orbitals kombiniert, die Anzahl der Elektronen wird als hochgestellte Zahl geschrieben [B4 rechts].

Atom \ Orbitale	1s	2s	2p	vereinfachte Schreibweise
H	↑	□	□ □ □	1s ¹
He	↑↓	□	□ □ □	1s ²
Li	↑↓	↑	□ □ □	1s ² 2s ¹
Be	↑↓	↑↓	□ □ □	1s ² 2s ²
B	↑↓	↑↓	↑ □ □	1s ² 2s ² 2p ¹
C	↑↓	↑↓	↑ ↑ □	1s ² 2s ² 2p ²
N	↑↓	↑↓	↑ ↑ ↑	1s ² 2s ² 2p ³
O	↑↓	↑↓	↑↓ ↑ ↑	1s ² 2s ² 2p ⁴
F	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑	1s ² 2s ² 2p ⁵
Ne	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	1s ² 2s ² 2p ⁶

B4 Elektronenkonfigurationen der Atome bis zur Kernladungszahl 10 in der Pauling-Schreibweise (Kästchenschreibweise) und in der vereinfachten Schreibweise

- n** Hauptquantenzahl
 $n = 1; 2; 3; \dots$
- l** Nebenquantenzahl
 $0 \leq l \leq n$
- m** Magnetquantenzahl
 $-l \leq m \leq +l$
- s** Spinquantenzahl
 $s = +\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}$
- s, p, d, f** Die Buchstaben stammen von Bezeichnungen für Spektrallinien, deren Auswertung erste Aufschlüsse über die Energiestufen der Atome ergab: sharp, principal, diffuse, fundamental
- entartete Orbitale**
siehe Entartung, Kap. 1
- WOLFGANG PAULI**
(1900 – 1958)
deutscher Physiker
- LINUS PAULING**
(1901 – 1994)
amerikanischer Chemiker
- FRIEDRICH HUND**
(1896 – 1997)
deutscher Physiker



B5 Reihenfolge der Energieniveaus der Orbitale in Atomen mit mehreren Elektronen

Energetische Reihenfolge der Orbitale. Die gegenseitige Wechselwirkung der Elektronen eines Atoms führt dazu, dass sich die s-, p-, d- und f-Orbitale derselben Hauptquantenzahl in ihrer Energie unterscheiden. Bis zu den 3p-Orbitalen ist die Reihenfolge der Energiestufen einfach zu ermitteln: Eine höhere Hauptquantenzahl bedeutet auch höhere Energie.

Ab den 3d-Orbitalen gilt diese einfache Regel nicht mehr [B4]. So besitzen z. B. die Elektronen in einem 4s-Orbital eine kleinere Energie als die Elektronen in einem 3d-Orbital. Als Faustregel gilt, dass die Energiestufe eines Orbitals umso höher liegt, je größer der Zahlenwert der Summe von $n + l$ ist. Für ein 3d-Orbital ist $n + l = 5$, für ein 4s-Orbital $n + l = 4$.

Besetzung der Orbitale und Periodensystem.

Im Periodensystem der Elemente spiegelt sich der Aufbau der Elektronenhülle wider [B6]. Für die 1. und 2. Periode gilt: Die Anzahl der Elemente ist gleich der maximalen Anzahl der bei der Hauptquantenzahl n möglichen Elektronen. In der 1. Periode finden wir deshalb nur zwei Elemente, entsprechend der maximalen Anzahl von zwei Elektronen des 1s-Orbitals. Die 2. Periode umfasst acht Elemente, entsprechend der maximalen Gesamtzahl von acht Elektronen in den 2s- und 2p-Orbitalen.

In der 3. Periode bewirkt die energetische Reihenfolge der Orbitale, dass die 3d-Orbitale zunächst nicht besetzt werden, sodass auch

die 3. Periode nur acht Elemente umfasst. Erst in der vierten Periode findet man 18 Elemente; hier werden die 3d-Orbitale besetzt. Entsprechendes gilt für die 4f-Orbitale, die erst in der 6. Periode besetzt werden.

Bei den Atomen der *Hauptgruppen* sind die besetzten Orbitale mit der größten Energie s- oder p-Orbitale. Bei den *Nebengruppen* sind dies die d-Orbitale, bei den *Lanthanoiden* und *Actinoiden* die f-Orbitale. Man spricht aus diesem Grund auch von „d-Elementen“ bzw. „f-Elementen“.

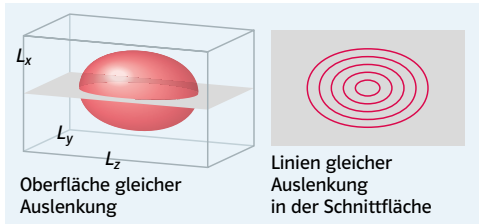
Betrachtet man die Elektronenkonfiguration der Atome von Elementen einer Hauptgruppe, so stellt man fest, dass sie in der äußersten Schale jeweils gleich ist. Da dies offenbar entscheidend für die chemischen Eigenschaften ist, gibt man häufig nur die Konfiguration der Außenelektronen (Valenzelektronen) an. Sie ist z. B. bei der I. Hauptgruppe (Alkalimetalle) ns^1 , bei der VII. Hauptgruppe (Halogene) $ns^2 np^5$. Trotzdem unterscheiden sich die Elemente einer Hauptgruppe deutlich, vor allem in den Eigenschaften ihrer Verbindungen.

A1 Vergleichen Sie die Elemente innerhalb der I. und IV. Hauptgruppe
a) bezüglich der physikalischen Eigenschaften der elementaren Stoffe,
b) bezüglich der Stoffeigenschaften ihrer Oxide.

Hauptgruppen: Besetzung der s- und p-Orbitale																															
H																	He														
Li	Be															B	C	N	O	F	Ne										
Na	Mg															Al	Si	P	S	Cl	Ar										
Nebengruppen: Besetzung der d-Orbitale																															
K	Ca	Sc															Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y															Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Lanthanoide und Actinoide: Besetzung der f-Orbitale																															
Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn						

B6 Periodensystem der Elemente und Besetzung der Orbitale

3 Molekülorbitale und Hybridisierung



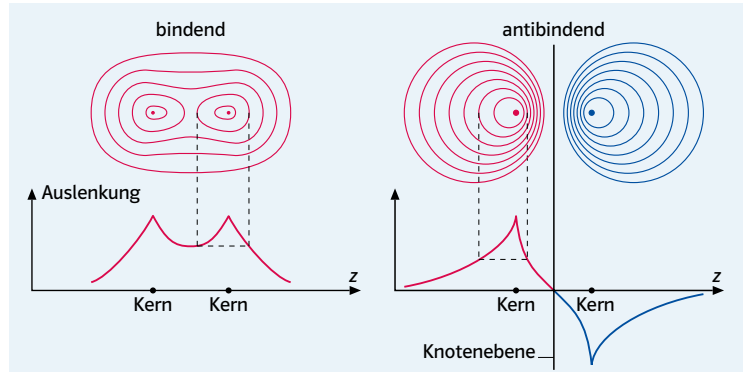
B1 Elektronenwelle des Grundzustands im dreidimensionalen Kasten mit $L_x = L_y$ und $L_z > L_x$

In Kap. 1 wurden die Energien einer Elektronenwelle im dreidimensionalen Kasten berechnet. Für den *Grundzustand* $n_x = n_y = n_z = 1$ gilt:

$$E_{1,1,1} = \frac{h^2}{8m_e} \cdot \left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2} + \frac{1}{L_z^2} \right)$$

Die Gleichung zeigt, dass die *Verlängerung* des Kastens zu einem *niedrigeren Energiewert* des Grundzustands führt. B1 zeigt die Elektronenwelle in einem quaderförmigen Kasten.

Die Bindung im H_2^+ -Molekül. Der Aufenthaltsbereich eines Elektrons in einem Molekül ist größer als in einem einzelnen Atom. Analog zum Kasten führt auch dies zu einer Verringerung der Energie des Elektrons. Das einfachste denkbare Molekül ist das H_2^+ -Molekül. Durch die beiden Atomkerne ist das Elektron auf einen bestimmten Raumbereich konzentriert, den man sehr vereinfacht als quaderförmigen Kasten betrachten kann. Bereits mit diesem einfachen Modell lässt sich also zeigen, dass das Elektron im H_2^+ -Molekül eine kleinere Energie hat als in einem H-Atom. Bei der Bildung der chemischen Bindung des H_2^+ -Moleküls wird folglich Energie frei. Da das Molekül nur ein Elektron besitzt, wird deutlich, dass die Bindung durch ein einziges Elektron bewirkt wird. Die chemische Bindung ist folglich *nicht* von Elektronenpaaren abhängig. Berechnet man die Wellenfunktion des Elektrons im H_2^+ -Molekül, so zeigt sich, dass sie eine ähnliche Gestalt hat wie beim quaderförmigen Kasten [B1, B2]. Im Unterschied zum Kasten ist jedoch der Betrag der Auslenkung an den beiden Kernen jeweils maximal. Schwingungszustände von stehenden Elektronenwellen in Molekülen bezeichnet man als **Molekülorbitale (MO)**.

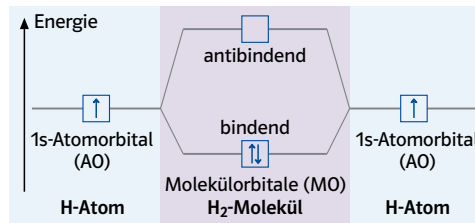


B2 Molekülorbitale des H_2^+ -Moleküls: Auslenkung entlang der Kernverbindungsachse (unten) und Linien gleicher Auslenkung in einer Molekülebene

Die Bindung im Wasserstoffmolekül. Im H_2 -Molekül wird das energieärmste Molekülorbital von zwei Elektronen entgegengesetzter Spinquantenzahl besetzt. Jedes der beiden Elektronen leistet *unabhängig vom anderen* einen Beitrag zur Bindung, d.h. zur Energieverringering im Vergleich zu den einzelnen H-Atomen. Wegen der gegenseitigen Abstoßung der Elektronen und wegen des kleineren Kernabstands hat die Bindungsenergie im H_2 -Molekül nicht ganz den doppelten Wert im Vergleich zum H_2^+ -Molekül. Das **MO-Schema** in B3 zeigt die Energiestufen der beiden energieärmsten Molekülorbitale des H_2 -Moleküls im Vergleich mit den 1s-Orbitalen der H-Atome. Da nur das energieärmste Molekülorbital besetzt wird und das nächsthöhere frei bleibt, wird bei der Bildung des H_2 -Moleküls Energie frei.

H_2^+ -Molekül eigentlich Diwasserstoffkation. Es existiert in Molekülwolken im Weltraum und kann durch Ionisierung eines H_2 -Moleküls im Labor hergestellt werden. Da das H_2^+ -Molekül nur ein einziges Elektron besitzt, sind die Berechnungen zu seiner chemischen Bindung relativ übersichtlich

Bei der Bildung eines He_2 -Moleküls würde auch das nächsthöhere Molekülorbital besetzt. Aus diesem Grund kommt keine Bindung zustande. Das energieärmere MO heißt daher **bindend**, das energiereichere **antibindend**.



B3 MO-Schema des Wasserstoffmoleküls

ungepaarte Elektronen führen zu bestimmten magnetischen Eigenschaften des Sauerstoffmoleküls (Paramagnetismus) und seiner hohen Reaktivität als Diradikal

entartete Orbitale siehe Entartung, Kap. 1

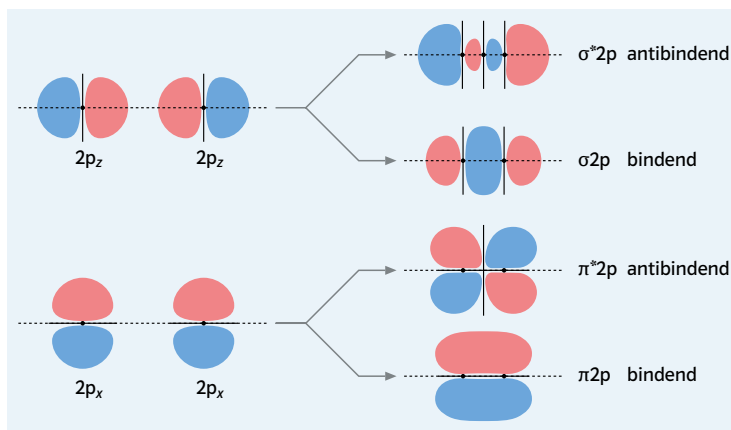
Bindungsordnung BO
Differenz zwischen den Elektronenanzahlen in den bindenden und antibindenden Orbitalen geteilt durch 2.
Beispiele:
 $H_2: BO = (2 - 0) : 2 = 1$
 $O_2: BO = (10 - 6) : 2 = 2$
 $N_2: BO = (10 - 4) : 2 = 3$
Meistens ist die Bindungsordnung gleich der Anzahl der bindenden Elektronenpaare und entspricht damit der Einfach-, Doppel- bzw. Dreifachbindung.
Achtung: B5 zeigt, dass dies beim O_2 -Molekül nicht zutrifft. Man sollte hier *nicht* von einer Doppelbindung sprechen!

Das Molekülorbitalmodell (MO-Modell). Um Bindungen in zweiatomigen Molekülen zu beschreiben, kann man Molekülorbitale aus Atomorbitalen konstruieren. Das MO-Modell geht im einfachsten Fall davon aus, dass aus jeweils zwei Atomorbitalen (AO) zwei Molekülorbitale (MO) entstehen.

MO-Modell des Sauerstoffmoleküls. Ein Sauerstoffatom hat die Elektronenkonfiguration $1s^2 2s^2 2p^4$, d.h., fünf Atomorbitale sind besetzt. Zusammen mit den fünf besetzten Atomorbitalen eines zweiten Sauerstoffatoms kann man daraus zehn Molekülorbitale bilden [B5].

Aus jeweils zwei s-Atomorbitalen ergibt sich ein bindendes und ein antibindendes MO. Diese Molekülorbitale entsprechen in ihrer Symmetrie den Molekülorbitalen des H_2^+ -Moleküls [B2]. Molekülorbitale, die rotationsymmetrisch zur Kernverbindungsachse sind, bezeichnet man als σ -Orbitale (bindend) bzw. σ^* -Orbitale (antibindend).

Einzelne p-Orbitale sind nicht kugelsymmetrisch. Bei der Bildung von Molekülorbitalen geht man von einer parallelen Orientierung der p-Atomorbitale aus und definiert die Kernverbindungsachse als z-Achse. Die Kombination der beiden $2p_z$ -Orbitale ergibt zwei rotationsymmetrische Molekülorbitale: das bindende $\sigma 2p$ -Orbital sowie das antibindende $\sigma^* 2p$ -Orbital [B4 oben].

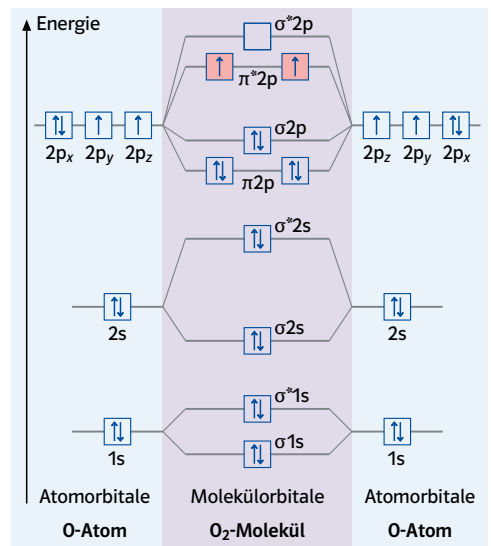


B4 Bildung von Molekülorbitalen, dargestellt als Schnitt durch die x - z -Ebene (durchgezogene Linien: Knotenflächen; gestr. Linien: Kernverbindungsachse)

Die Kombination der beiden $2p_x$ -Orbitale ergibt zwei Molekülorbitale, die nicht rotationsymmetrisch zur Molekülachse sind. Sie haben eine Knotenebene, die durch die beiden Atomkerne verläuft [B4 unten]. Entsprechendes gilt für die beiden MO aus den $2p_y$ -Orbitalen. Molekülorbitale, die diese Symmetrieverhältnisse aufweisen, nennt man π -Orbitale (bindend) bzw. π^* -Orbitale (antibindend).

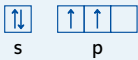
B5 zeigt das MO-Schema des O_2 -Moleküls. Unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips werden 16 Elektronen auf die Molekülorbitale verteilt. Dabei werden insgesamt fünf bindende und zwei antibindende Orbitale doppelt besetzt. Die beiden entarteten $\pi^* 2p$ -Orbitale werden nach der Regel von HUND einfach besetzt.

Die vier aus den s-Orbitalen gebildeten MO leisten hier keinen Beitrag zum Zusammenhalt des Moleküls. Den drei doppelt besetzten aus p-Orbitalen gebildeten bindenden MO stehen zwei einfach besetzte antibindende MO gegenüber. Insgesamt entspricht dies der **Bindungsordnung 2**. Die Besonderheit, dass im O_2 -Molekül ungepaarte Elektronen vorliegen, ist experimentell nachweisbar und spielt für das Reaktionsverhalten eine wichtige Rolle.

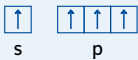


B5 MO-Schema des Sauerstoffmoleküls: Die einfach besetzten $\pi^* 2p$ -Orbitale sind hervorgehoben

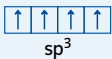
a) Grundzustand des Kohlenstoffatoms:



b) angeregter Zustand (Darstellung mit s- und p-Orbitalen):



c) angeregter Zustand (Darstellung mit sp^3 -Hybridorbitalen):



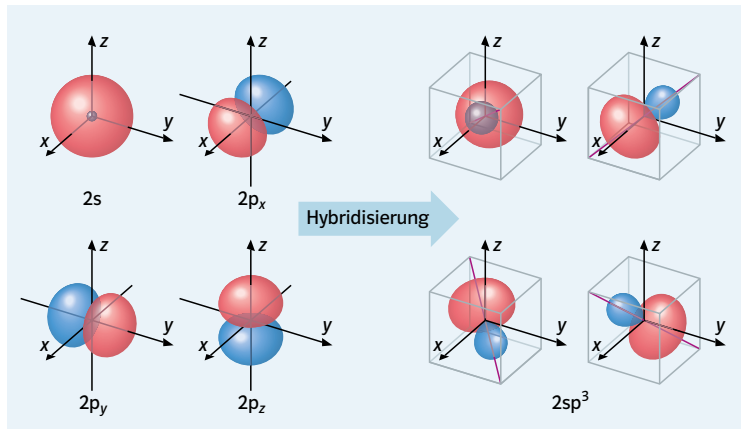
B6 Elektronenkonfiguration der äußersten Schale des Kohlenstoffatoms bei der sp^3 -Hybridisierung

Anzahl der Bindungen am Kohlenstoffatom.

Die äußerste Schale des Kohlenstoffatoms besteht im Grundzustand aus einem doppelt besetzten 2s-Orbital und zwei einfach besetzten und einem leeren p-Orbital [B6 oben]. Um die Molekülorbitale von Kohlenstoffverbindungen zu konstruieren, geht man von einem angeregten Zustand aus, in dem alle vier Orbitale der äußersten Schale einfach besetzt sind [B6 Mitte]. Diese vier Orbitale werden mit den Atomorbitalen der Bindungspartner kombiniert. Von einem Kohlenstoffatom gehen also i. d. R. vier Bindungen aus.

Hybridisierung. Aus vielen Untersuchungen ist bekannt, dass im Methanmolekül (CH_4) alle Bindungswinkel und Bindungslängen gleich sind. Es wäre daher anschaulicher, die Molekülorbitale des Methans nicht aus einem 2s- und drei 2p-Orbitalen, sondern aus vier *gleichartigen* Atomorbitalen des Kohlenstoffatoms zu konstruieren.

Dies wird durch den modellhaften Vorgang der *Hybridisierung* erreicht. Durch rechnerisches Mischen des 2s- und der 2p-Orbitale erhält man vier gleichartige *Hybridorbitale* [B6 unten, B7]. Da *ein* s- und *drei* p-Orbitale gemischt wurden, bezeichnet man diese Hybridorbitale genauer als sp^3 -Hybridorbitale und den Vorgang als sp^3 -Hybridisierung. Die Symmetrieachsen der sp^3 -Hybridorbitale gehen durch die Ecken eines gedachten Tetraeders.

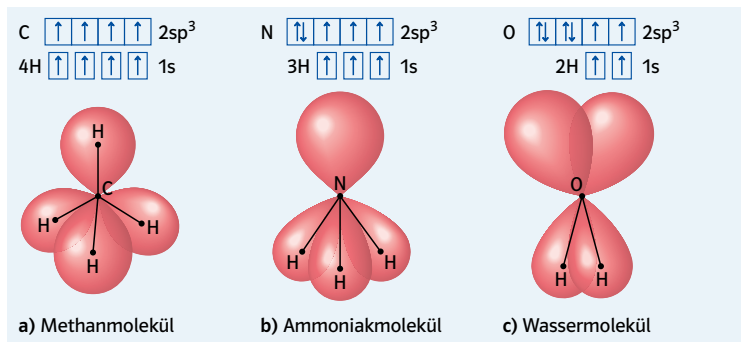


B7 Aus einem s-Orbital und drei p-Orbitalen werden durch den rechnerischen Vorgang der Hybridisierung vier sp^3 -Hybridorbitale gebildet

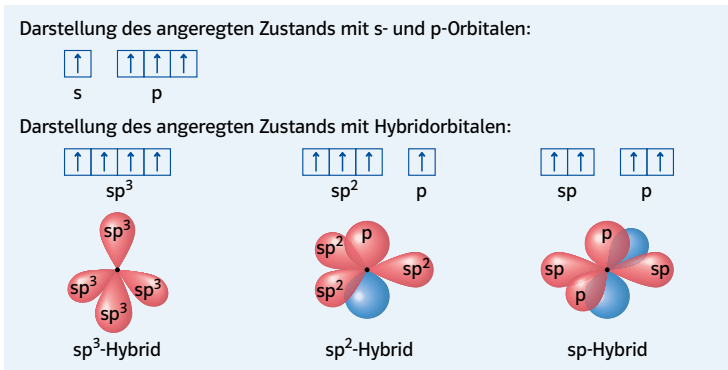
Die vier sp^3 -Hybridorbitale haben die gleiche räumliche Orientierung wie die vier C—H-Bindungen im Methanmolekül (Tetraederwinkel, $109,5^\circ$). Diese Bindungen lassen sich also als Kombination der sp^3 -Hybridorbitale mit den 1s-Atomorbitalen der vier Wasserstoffatome darstellen [B8a]. Analog kann man die Bindungen in vielen organischen Molekülen konstruieren, z. B. in Alkanmolekülen.

Auch im Ammoniak- und im Wassermolekül weichen die Bindungswinkel nur wenig vom Tetraederwinkel ab. Man kann die Bindungen in diesen Molekülen ebenfalls durch eine sp^3 -Hybridisierung der Orbitale des Stickstoff- bzw. Sauerstoffatoms beschreiben [B8b und c].

Hybridisierung und Elektronendichte Die Hybridisierung ist ein rein rechnerischer Vorgang, der ein Atom nicht verändert, sondern nur etwas anders beschreibt. Aus den Atomorbitalen kann man die Elektronendichte als Funktion des Orts berechnen. Das Ergebnis ist unabhängig davon, ob man von s- und p-Orbitalen oder von sp^3 -Hybridorbitalen ausgeht. Die Verteilung der Elektronendichte an einem einzelnen Atom ist immer kugelsymmetrisch



B8 Atomorbitale nach dem Hybridisierungsmodell in der Pauling-Schreibweise (oben) und daraus konstruierte, schematisierte Molekülorbitale (unten, Bereiche negativer Auslenkung sind nicht dargestellt)



B9 Hybridorbitale (schematisiert) und ihre Besetzung im Kohlenstoffatom

σ- und π-Bindung sind Bezeichnungen für die durch σ- bzw. π-Molekülorbitale gebildeten Bindungen

Schreibweise für Hybridorbitale und Elektronenkonfiguration

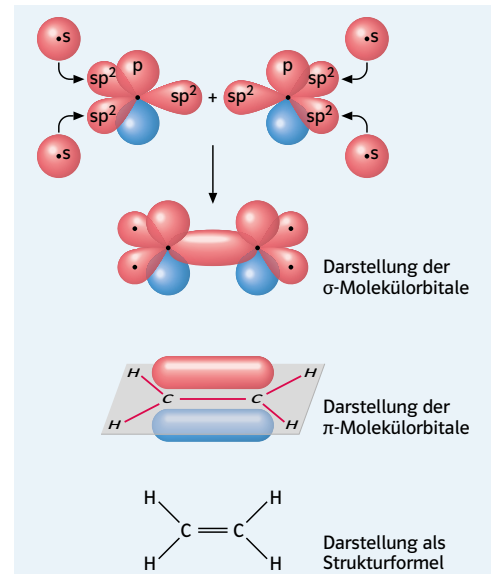
Achtung: Die hochgestellten Zahlen haben unterschiedliche Bedeutung!

Hybridorbital:
Anzahl der beteiligten s-Orbitale (1 wird nicht geschrieben)
sp ³
Anzahl der beteiligten p-Orbitale
Elektronenkonfiguration des Kohlenstoffatoms:
Anzahl der Elektronen in den s-Orbitalen
1s ² 2s ² 2p ²
Anzahl der Elektronen in den p-Orbitalen

Weitere Arten der Hybridisierung. Mischt man ein s-Orbital mit weniger als drei p-Orbitalen, erhält man andere Arten von Hybridorbitalen. B9 zeigt die drei möglichen Hybridisierungen.

- sp³-Hybridisierung: Es liegen vier Hybridorbitale vor, sie stehen im Tetraederwinkel von 109,5° zueinander.
- sp²-Hybridisierung: Drei Hybridorbitale liegen in einer Ebene und bilden Winkel von 120°. Das übrige p-Orbital steht senkrecht zu dieser Ebene.
- sp-Hybridisierung: Zwei Hybridorbitale bilden einen Winkel von 180°. Die beiden übrigen p-Orbitale stehen senkrecht dazu.

Das Ethenmolekül. Das Ethenmolekül (C₂H₄) ist planar gebaut, d.h., alle Atomkerne liegen in einer Ebene. Die Bindungswinkel betragen ca. 120°. Das Ethenmolekül lässt sich mithilfe der sp²-Hybridisierung beschreiben [B10]. Die C–H-Bindungen bildet man ähnlich wie beim Methanmolekül durch Kombination der 1s-Orbitale der Wasserstoffatome mit 2sp²-Hybridorbitalen der Kohlenstoffatome. Der eine Teil der C=C-Doppelbindung wird durch Kombination zweier 2sp²-Hybridorbitale zu einer **σ-Bindung** konstruiert. Der andere Teil der Doppelbindung entsteht durch Kombination der 2p-Orbitale zu einer **π-Bindung**. Die Knotenebene des bindenden π-Molekülorbitals verläuft durch alle Atomkerne des Moleküls, die dadurch in einer Ebene „fixiert“ sind. Auf ähnliche Weise lassen sich viele weitere Moleküle mit C=C-Doppelbindungen konstruieren.



B10 Orbitalmodell des Ethenmoleküls

Das Ethenmolekül. Das Ethenmolekül (C₂H₄) ist linear gebaut, d.h., alle Atomkerne liegen auf einer Geraden. Die Bindungswinkel sind also genau 180°. Die Bindungen lassen sich ähnlich wie beim Ethenmolekül konstruieren, allerdings mithilfe der sp-Hybridisierung. Hier trägt jedes C-Atom *zwei* p-Orbitale zur Bindung bei. Die C≡C-Dreifachbindung ist in diesem Modell eine Kombination aus einer σ-Bindung und *zwei* π-Bindungen. Die Knotenebenen der beiden bindenden π-Molekülorbitale stehen senkrecht aufeinander und verlaufen durch alle Atomkerne. Eine Berechnung der Elektronendichte zeigt, dass sie rotationssymmetrisch zur Kernverbindungsachse ist.

A1 Konstruieren Sie nach dem Modell der Hybridisierung folgende Moleküle: **a)** Ethan, **b)** Ethin, **c)** Kohlenstoffdioxid, **d)** Hydrogencyanid (Blausäure). Sie können Ihre Konstruktionen als Zeichnungen ausführen oder dreidimensionale Modelle bauen.

A2 Vergleichen Sie anhand Ihres Ergebnisses von A1 das Hybridisierungsmodell mit dem Elektronenpaar-Abstoßungs-Modell (EPA-Modell).