

## Modelle des C-Atoms

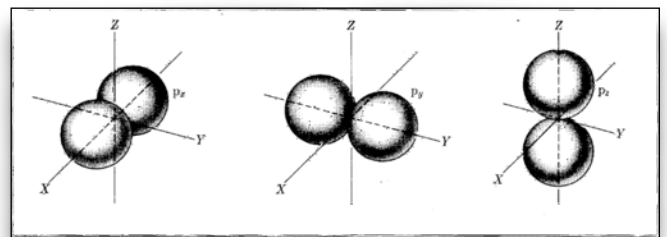
### Einfache Atommodelle

Im Laufe Ihres Chemieunterrichts haben Sie bereits eine ganze Reihe von Atommodellen kennengelernt. Das Kohlenstoff-Atom besteht nach dem **DALTONSchen Atommodell** aus einer winzigen massiven Kugel mit einer Masse von 12 u, die völlig unteilbar ist. Nach dem **Rosinenkuchen-Modell** von THOMSON enthält diese Kugel 6 Protonen und 6 Elektronen, die wie Rosinen in einem Kuchen angeordnet sind. Nach dem **Schalenmodell** von BOHR enthält der Atomkern des C-Atoms 6 Protonen und 6 Neutronen, die K-Schale der Elektronenhülle besitzt 2 Elektronen und die L-Schale 4 Elektronen. Nach dem Schalenmodell ist Kohlenstoff 4-bändig, da das Atom entweder 4 Elektronen abgeben oder 4 Elektronen aufnehmen kann, um in den Besitz einer abgeschlossenen Außenschale zu kommen (Oktettregel). Das **Kugelwolkenmodell** des C-Atoms ist noch etwas differenzierter. Danach besitzt das C-Atom vier tetraedrisch angeordnete kugelförmige Aufenthaltsräume für je zwei Elektronen, die allerdings mit nur je einem Elektron besetzt sind. Jede Kugelwolke kann also ein weiteres Elektron aufnehmen oder theoretisch auch ein Elektron abgeben.

### Orbitalmodell

Das **Orbitalmodell** des C-Atoms ist noch ein Stück komplizierter. Die beiden Elektronen der K-Schale befinden sich in einem Aufenthaltsraum, der kugelförmig den Atomkern umgibt und als 1s-Orbital bezeichnet wird. Die beiden 1s-Elektronen haben einen relativ niedrigen Energiegehalt. Die beiden nächsten Elektronen befinden sich in einem kugelförmigen 2s-Orbital. Dieses ist größer als das 1s-Orbital. Man muss sich das so vorstellen, dass das 1s-Orbital im 2s-Orbital enthalten ist (so ähnlich, wie beim Schalenmodell die K-Schale in der L-Schale enthalten ist). Die 2s-Elektronen haben einen höheren Energiegehalt als die 1s-Elektronen.

Jetzt wird es aber langsam interessant und leider auch schwierig. Die nächsten beiden Elektronen sind in p-Orbitalen enthalten. Die p-Orbitale haben aber keine kugelförmige Gestalt, sondern sind hantelförmig, bestehen also aus zwei Hälften; man sagt dazu auch "Orbitalappen".



Insgesamt gibt es drei dieser p-Orbitale. Eins erstreckt sich in X-Richtung, eines in Y-Richtung und das dritte in Z-Richtung. Daher bezeichnet man die drei 2p-Orbitale auch als 2p<sub>x</sub>-, 2p<sub>y</sub>- und 2p<sub>z</sub>-Orbitale. Jedes dieser drei 2p-Orbitale kann maximal zwei Elektronen enthalten. Beim C-Atom ist aber nur das 2p<sub>x</sub>- und das 2p<sub>y</sub>-Orbital besetzt. Das 2p<sub>z</sub>-Orbital ist leer. Beim N-Atom enthält auch das 2p<sub>z</sub>-Orbital ein Elektron, und beim Ar-Atom sind alle drei 2p-Orbitale mit je 2 Elektronen besetzt.

Das Natrium-Atom enthält quasi ein vollständiges Argon-Atom, das dann aber von einem 3s-Orbital umgeben ist, in dem sich genau ein Elektron aufhält. Beim Mg-Atom sind bereits zwei 3s-Elektronen vorhanden, genau wie bei den folgenden Atomen der 3. Periode. Das Al-Atom hat dann folgende **Elektronenkonfiguration**: 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sub>x</sub><sup>2</sup> 2p<sub>y</sub><sup>2</sup> 2p<sub>z</sub><sup>2</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sub>x</sub><sup>1</sup> 3p<sub>y</sub><sup>0</sup> 3p<sub>z</sub><sup>0</sup>.

## Das Konzept der Hybridisierung

Kommen wir zurück zum Kohlenstoff-Atom. Die vier Außenelektronen des C-Atoms müssten leicht zu unterscheiden sein: Die beiden 2p-Elektronen haben einen etwas höheren Energiegehalt als die beiden 2s-Elektronen, daher sollten sie auch leichter abzuspalten sein. Die Folge wäre ein  $C^{2+}$ -Ion, das dann Salze wie zum Beispiel  $CBr_2$  oder CO bilden müsste. Die Verbindung CO gibt es sogar, allerdings das Kohlenmonoxid kein Salz (also keine Ionenverbindung), sondern ein Gas (also eine Molekül-Verbindung).

Alle Experimente, die man bisher durchgeführt hat, zeigen dass die vier Außenelektronen des C-Atoms gleichwertig sind, was den Energiegehalt und den Abstand zum Atomkern angeht. Diese Schlussfolgerung widerspricht aber der Annahme, dass die 2p-Elektronen einen höheren Energiegehalt haben als die 2s-Elektronen.

Wenn Experimente einen Widerspruch zu einer Hypothese aufzeigen, heißt das nicht, dass die Hypothese an sich falsch ist. Aber die Hypothese muss so angepasst / erweitert werden, dass sie keinen Widerspruch mehr zu den experimentellen Ergebnissen liefert.

Aus diesem Grund hat man das Konzept der Hybridisierung entwickelt. Bei dieser Hybridisierung verschmelzen die drei 2p-Orbitale und das 2s-Orbital miteinander. Dabei bilden sich dann vier energetisch gleichwertige Hybridorbitale, die als  $2sp^3$ -Hybridorbitale bezeichnet werden. Das Energieniveau dieser Hybridorbitale liegt zwischen dem Niveau des 2s-Orbitals und dem Niveau der drei 2p-Orbitale.

Jetzt wird es interessant! Die vier  $2sp^3$ -Hybridorbitale sind energetisch gleichwertig und enthalten beim C-Atom je ein Elektron. Nach dem Elektronenpaar-Abstoßungs-Modell stoßen sich negative Ladungen gegenseitig ab, und daher versuchen die vier Hybridorbitale, einen möglichst großen Abstand voneinander anzunehmen. Die Folge ist eine tetraederförmige Anordnung dieser vier Hybridorbitale.

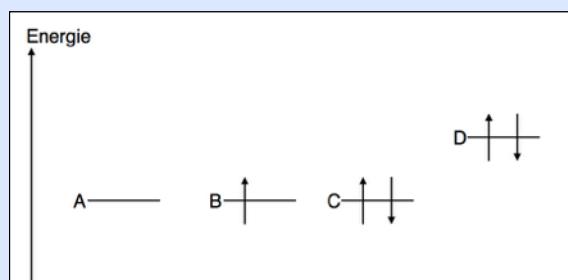
Durch diese Tetraederanordnung ist der Abstand zwischen den vier negativen Orbitalen maximal.

Im Grunde sind wir jetzt also wieder beim Kugelwolkenmodell angekommen. Und in der Tat ist das Kugelwolkenmodell nichts anderes als eine didaktische Vereinfachung des Orbitalmodells, vom amerikanischen Physiker George E. KIMBALL eigens für Studenten der Chemie geschaffen:

„Nachteilig waren weiterhin die geringe Anschaulichkeit des Orbitalmodells und die damit verbundenen Lernschwierigkeiten bei den Studenten. Aus diesen Gründen war Kimball bestrebt, ein weniger rechenaufwendiges Atommodell zu entwickeln.“ (Universität Rostock, „[Ursprung und Entwicklung des Kugelwolkenmodells](#)“).

### Aufgaben

1. Bearbeiten Sie das Arbeitsblatt B.
2. Bearbeiten Sie das Arbeitsblatt C und zeichnen Sie Energiediagramme für das nicht-hybridisierte C-Atom und für das  $sp^3$ -hybridisierte C-Atom.



Hier sehen Sie ein Energiediagramm mit vier Orbitalen A...D. A enthält kein Elektron, B ist einfach besetzt, C und D doppelt.

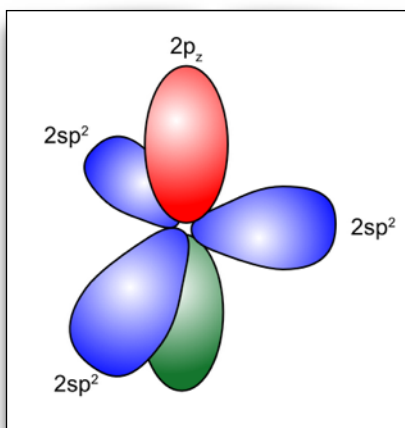
Die Pfeile stellen die Elektronen der Orbitale da. Bei doppelt besetzten Orbitalen müssen die beiden Pfeile in entgegengesetzte Richtungen weisen.

## Die $sp^2$ -Hybridisierung

Bei einer C=C-Doppelbindung konnte man beobachten, dass sie eigentlich aus zwei verschiedenen Bindungsarten besteht. Eine der beiden Bindungen, die sigma-Bindung, ist sehr *stark*. Hierbei handelt es sich um eine normale unpolare kovalente Bindung, die aufzubrechen viel Energie kostet. Die andere Bindung dagegen ist recht *schwach*, sie kann recht leicht aufgebrochen werden. Diese schwache Bindung wird als pi-Bindung bezeichnet. Bei chemischen Reaktionen spielt diese schwache pi-Bindung eine besondere Rolle. Sie ermöglicht zum Beispiel die elektrophile Addition von Brom, Chlor oder Wasser an die C=C-Doppelbindung von Alkenen. Sie erinnern sich hoffentlich noch an das Bromonium-Ion, das sich bei der Bromierung eines Alkens als Zwischenstufe bildet. Dabei schiebt sich das Brom-Kation in die pi-Bindung hinein und übernimmt deren Elektronen.

Weder mit dem nicht-hybridisierten C-Atom noch mit dem  $sp^3$ -hybridisierten C-Atom kann man die Tatsache erklären, dass es zwei energetisch unterschiedliche Arten der C-C-Bindung gibt. Abermals musste das Modell des C-Atoms ergänzt werden. Dazu entwickelte man das Konzept der  $sp^2$ -Hybridisierung.

Bei der  $sp^2$ -Hybridisierung verschmelzen nicht *drei* 2p-Orbitale mit dem 2s-Orbital, sondern nur deren *zwei*. Aus dem 2s-, dem  $2p_x$ - und dem  $2p_y$ -Orbital bilden sich *drei* energetisch gleichwertige  $2sp^2$ -Hybridorbitale. Das  $2p_z$ -Orbital nimmt an dieser Hybridisierung nicht teil.



Das Bild auf dieser Seite zeigt die graphische Darstellung eines solchen  $sp^2$ -hybridisierten C-Atoms. Die drei  $2sp^2$ -Hybridorbitale (blau) liegen in einer Ebene, der Bindungswinkel zwischen diesen drei Hybridorbitalen beträgt exakt  $120^\circ$ . Das  $2p_z$ -Orbital ragt nach oben und unten aus dieser Ebene heraus. Wie jedes p-Orbital besteht auch dieses  $p_z$ -Orbital aus zwei Orbitallappen. Der eine Lappen wurde in der Graphik rot gezeichnet, der andere Lappen grün. Das Elektron kann sich in beiden Orbitallappen aufhalten.

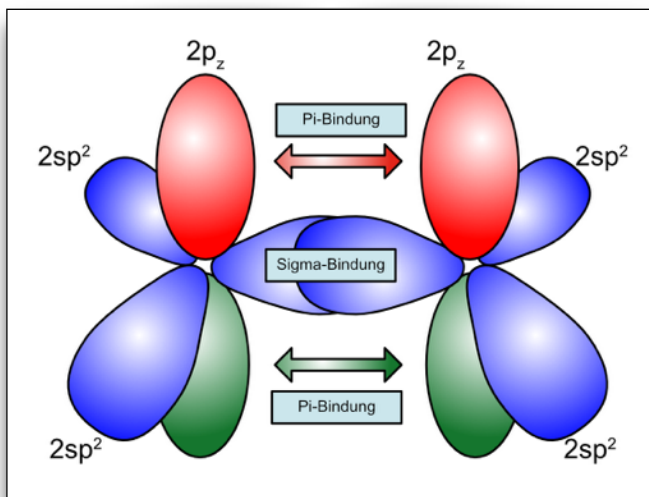
Die  $120^\circ$ -Anordnung der  $sp^2$ -Orbitale erklärt übrigens auch die Raumstruktur vieler Moleküle wie zum Beispiel Ethen. Beim Ethen liegen alle sechs Atome in einer Ebene, und die Bindungswinkel H-C-H betragen genau  $120^\circ$ . Auch die Struktur der Kohlenstoff-Radikale und Carbenium-Ionen kann jetzt leicht erklärt werden.

### Aufgaben

- Ergänzen Sie das Arbeitsblatt C um das **Energiediagramm** eines  $sp^2$ -hybridisierten C-Atoms.
- Erläutern Sie mit Hilfe Ihrer Kenntnisse über die  $sp^2$ -Hybridisierung, wieso bei der  $S_N2$ -Reaktion ein **pentavalenter Übergangszustand** möglich ist.

## Die C=C-Doppelbindung

Wie kann man nun die C=C-Doppelbindung mit Hilfe des Konzeptes der  $sp^2$ -Hybridisierung erklären?



In diesem Bild sehen wir zwei  $sp^2$ -hybridisierte C-Atome. Jedes  $sp^2$ -Hybridorbital ist mit *einem* Elektron besetzt (die Elektronen sind nicht mit eingezeichnet). Die Sigma-Bindung entsteht dadurch, dass sich zwei dieser  $sp^2$ -Orbitale überlappen, jedes C-Atom steuert dabei *ein*  $sp^2$ -Orbital bei. Diese Bindung ist sehr stabil und entspricht einer normalen unpolaren kovalenten Bindung. Um sie zu „sprengen“, ist sehr viel Energie notwendig. Bei normalen chemischen Reaktionen kann diese Energie nicht aufgebracht werden.

Wenden wir uns nun den  $p_z$ -Orbitalen zu. Die  $p_z$ -Orbitale der beiden C-Atome stehen parallel zueinander. In der Zeichnung sieht man das nicht so gut, aber die beiden  $p_z$ -Orbitale können auch überlappen. In der Zeichnung ist diese Überlappung durch die beiden Pfeile angedeutet. Die beiden „oberen“ Orbitallappen bilden die obere Hälfte eines gemeinsamen Molekülorbitals (MO), und die beiden unteren Orbitallappen bilden die untere Hälfte dieses gemeinsamen MOs. Jedes  $p_z$ -Orbital steuert *ein* Elektron zu dieser pi-Bindung bei. Die beiden Bindungselektronen können sich sowohl in der oberen Hälfte wie auch in der unteren Hälfte des MOs aufhalten. Eine Vorhersage, wo sich eines dieser Elektronen gerade befindet, ist *nicht* möglich.

Da sich die beiden  $p_z$ -Orbitale nur sehr *schwach* überlappen, ist die pi-Bindung, welche durch diese Überlappung entsteht, auch nur sehr schwach. Bereits nicht besonders reaktive Substanzen können diese pi-Bindung aufsprengen. Diese Art von Reaktion haben Sie ja kennengelernt, als wir über die elektrophile Addition gesprochen haben.

### Aufgaben

Bei den Alkinen liegt eine C-C-Dreifachbindung im Molekül vor. Weder mit der  $sp^3$ - noch mit der  $sp^2$ -Hybridisierung kann man die Existenz einer solchen Dreifachbindung erklären.

5. Erweitern Sie das Modell des C-Atoms so, dass man auch eine Dreifachbindung erklären kann.
6. Zeichnen Sie das Energiediagramm eines solchen C-Atoms.
7. Stellen Sie eine C-C-Dreifachbindung durch eine Zeichnung dar.
8. Diskutieren Sie die Frage, ob es bei der Dreifachbindung zwei oder drei verschiedene Bindungsarten gibt.