

A. Ionische, kovalente und van der Waals - Bindung

Bindungs- Typ	ionisch hetero polar	kovalent homöopolar	v. d. Waals
	Ionen - Moleküle	Atom - Moleküle	v. d. Waals - Moleküle
z.B. allgem.	NaCl, CsBr $A^{W+} B^{W-}$, $A \neq B$ insbes. einwertig: $A^+ B^-$	CO, NO H_2, N_2 homonuklear AA symmetr. Element-Mol. AB heteronuklear unsym. Atom-Moleküle	Hg_2 , Hg Ar AA AB
dielekt. Verhalten	stark polar $P_{A+B^-} \neq 0$	$P_{AB} \neq 0$ $P_{AA} = 0$ polar unpolar	unpolar
Dissoziations- aus Grund- zustand	Ionen	neutrale Atome	neutrale Atome
Charak- teristika	fest, flüssig, wässrige Lösung: weitgehend in Ionen dissoziiert	gasförmig und flüssig gleiche Struktur	sehr schwach gebunden
Bindungs- Mechanismus	elektrostatische Anziehung zw. Ionen $Na^+ Cl^-$ ([Ne]- [Ar]- Edelgaschale)	Platzwechsel (Austausch) von Elektronenpaaren	Multipolkräfte (el. Dipol-Dipol; el. Dipol-Quadrup.) (wie verflüssigtes Edelgas)

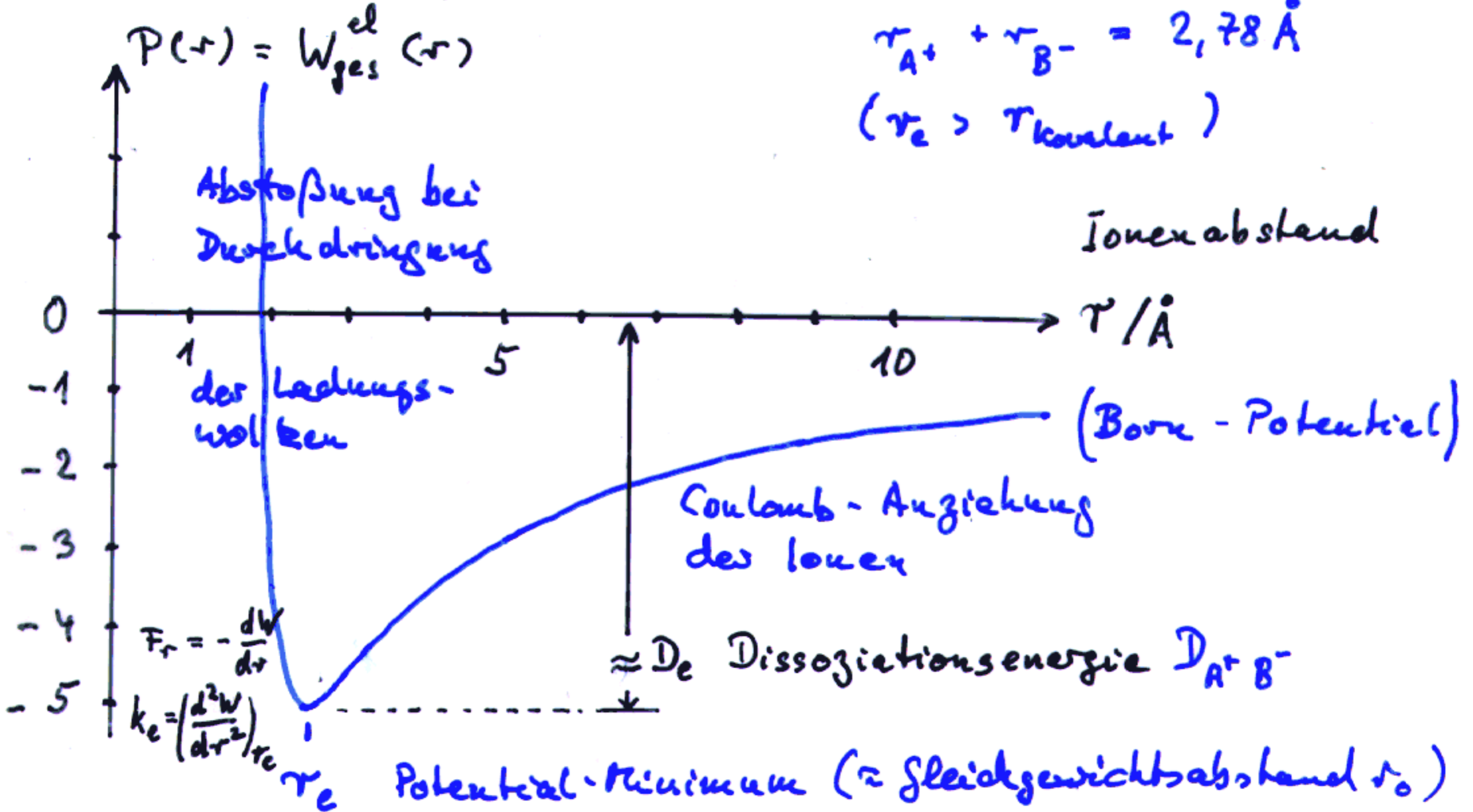
a) Potentialkurven

z.B.: Ionenbindung $\text{Na}^+ \dots \text{Cl}^-$

$r_e \approx 2,51 \text{ \AA}$

$r_{A^+} + r_{B^-} = 2,78 \text{ \AA}$

($r_e > r_{\text{kouvalent}}$)



$$W_{\text{ges}}^{\text{Molekül}} = W_{\text{kin}}^{\text{Kerne}} + W_{\text{kin}}^{\text{Elektr.}} + W_{\text{pot}}^{\text{Molek}}$$

↳ Coulomb-Wechselw.

Born-Oppenheimer- /
Adiabatische Näherung



Kern-Kern
Kern-Elektron
Elektron-Elekt.

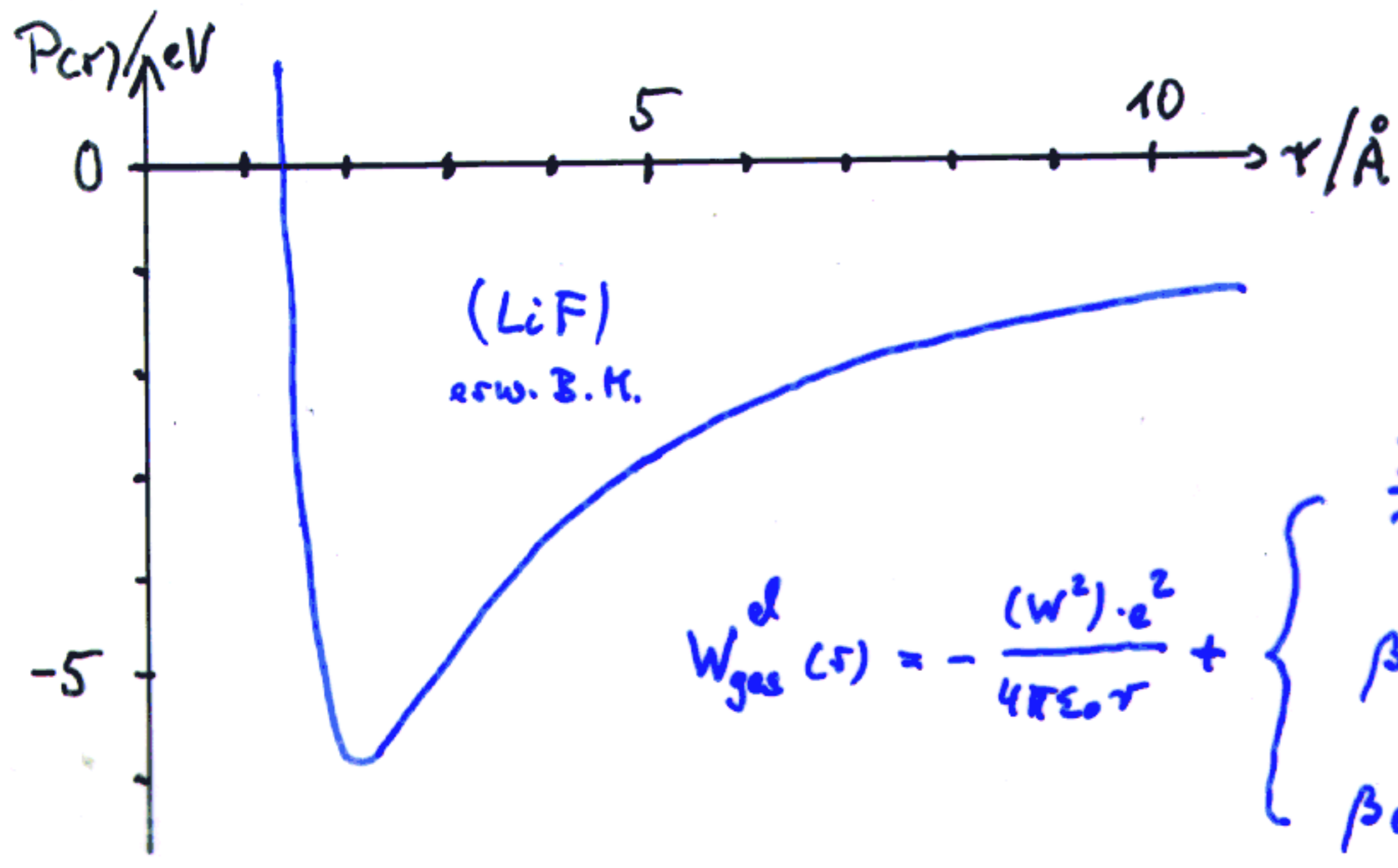
$$W_{\text{ges}}^{\text{Molekül}} = W_{\text{kin}}^{\text{Kerne}} + W_{\text{ges}}^{\text{el}}(r_{AB})$$

Potentialkurve
"Potentielle Energie"
für Kernbewegung

$$W_{\text{ges}}^{\text{Molekül}} = W_{\text{kin,trans}} + W_{\text{kin,rot}} + W_{\text{vibr.}} + W_{\text{ges}}^{\text{el}}(r_{AB})$$

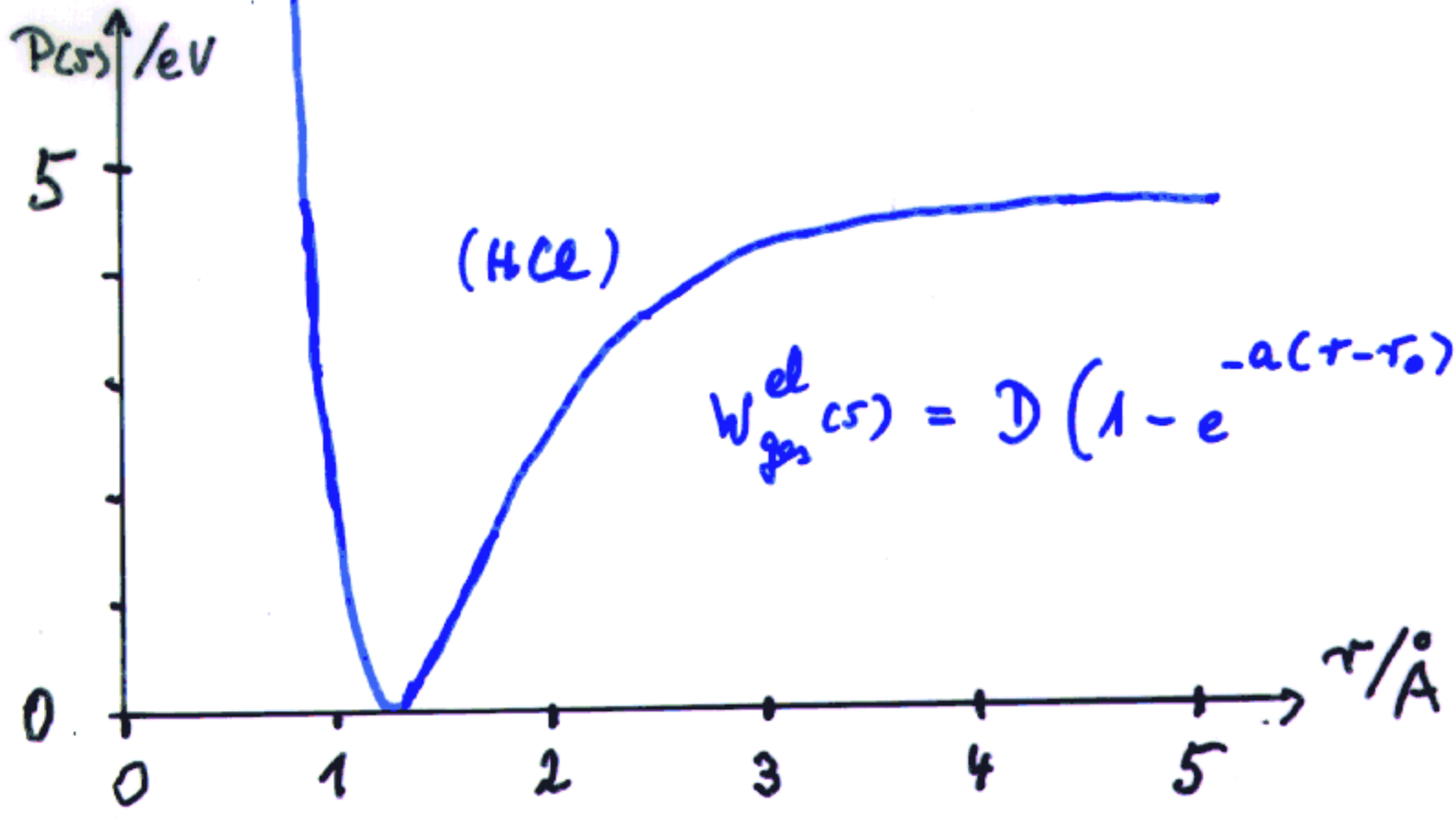
Schwerpunkt-
bewegung
(Dopplereffekt)

b) empirische Ansätze für Potentiale



ionisch

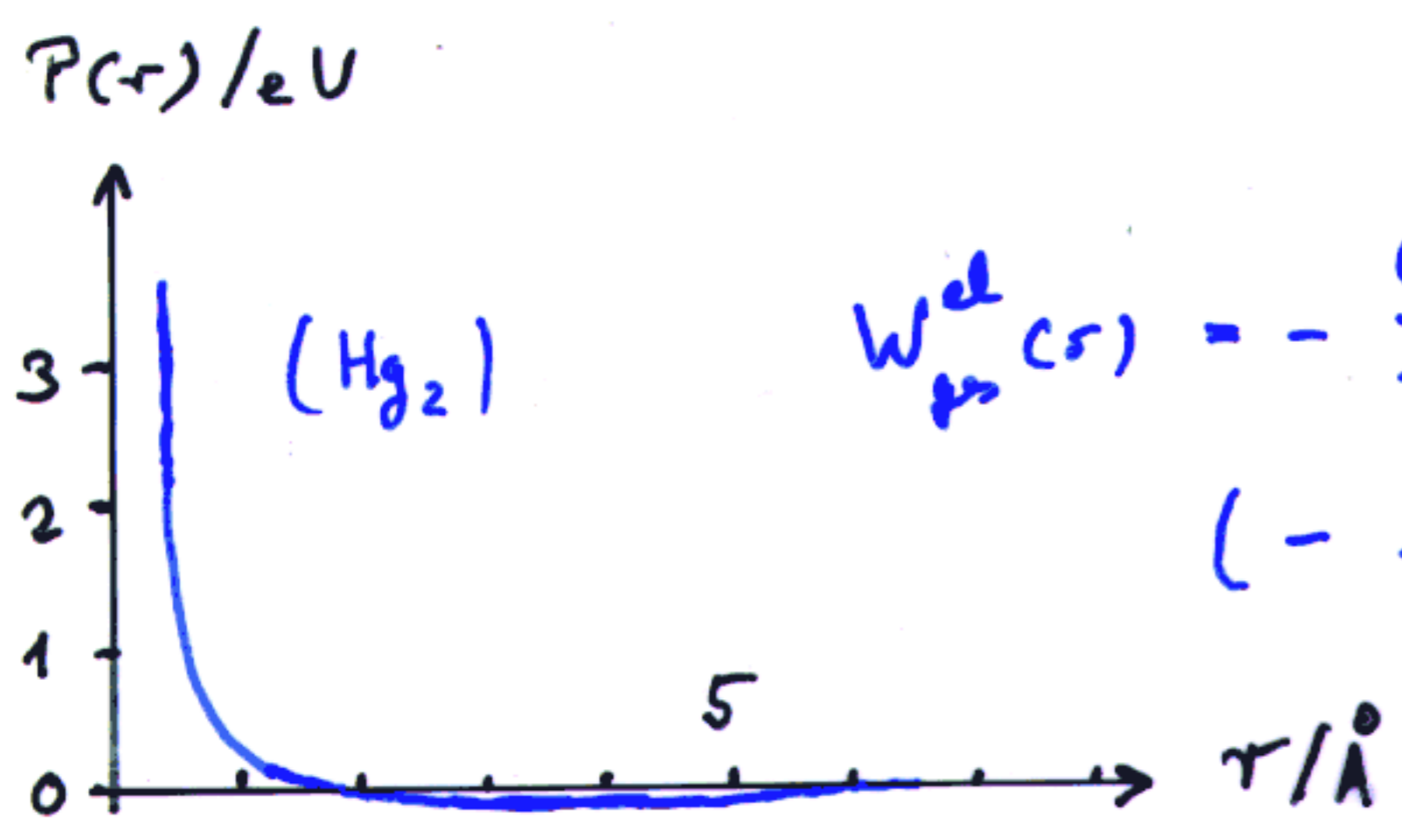
$$W_{\text{ges}}^{\text{el}}(r) = -\frac{(W^2) \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \left\{ \begin{array}{l} \frac{B}{r^n} \quad (n=9,10) \quad \text{Born-} \\ \beta e^{-r/\rho} \quad \text{Born-Mayer-} \\ \beta e^{-r/\rho} - \frac{d}{r^6} \quad \text{erweitertes} \\ \text{Born-Mayer-} \\ \text{Potential} \end{array} \right.$$



kovalent

$$W_{\text{ges}}^{\text{el}}(r) = D (1 - e^{-a(r-r_0)})^2$$

Morse-Potential



van der Waals-Bindg.

$$W_{\text{ges}}^{\text{el}}(r) = -\frac{C_{DD}}{r^6} + \beta e^{-r/\rho}$$

($-\frac{C_{DD}}{r^8}$)

→ 2-4 Parameter aus Experiment