

DE CHEMISCHE BINDINGEN Valentiebindingen en molecuulorbitalen

1. Van omloopbanen tot orbitalen

1.1. Elektron: deeltje of golf ?

Elektronen en andere subatomische partikels kun je best **niet** bekijken alsof het harde brokjes materie zijn (zoals ultra-kleine biljartballen).

Heel speciaal is dat elektronen zowel eigenschappen hebben van een partikel als van een golf.

DiffRACTIE van een elektronenstraal bij doorgang door een kristal is duidelijk een golfverschijnsel. Anderzijds is het eveneens mogelijk om het gewicht van een elektron te bepalen en dat is duidelijk een eigenschap van een partikel (materie).

Ook licht dat uit fotonen bestaat heeft eigenschappen die wijzen op een golfkarakter en fotonen hebben ook eigenschappen van materie (fotonen hebben een effectief momentum = massa x snelheid).

Deze deeltjes-golf dualiteit werd voor het eerst door De Broglie voorgesteld. Hij postuleerde dat alle materie karakteristieken heeft van zowel partikels als van een golf.

In zijn beroemde vergelijking wordt de golflengte uitgedrukt in functie van de massa en snelheid.

$$\lambda = h/mv \quad (h = \text{de constante van Planck} = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js})$$

In het atoommodel van Bohr bewegen de elektronen in banen rond de kern, een beetje zoals de planeten rond de zon. Dat model is een duidelijk partikel model. Om het golfkarakter weer te geven is het model van Bohr waardeloos.

Informatie over een elektron heeft 2 belangrijke componenten : de positie en het momentum.

MAAR volgens het onzekerheidsprincipe van Heisenberg is het onmogelijk om op hetzelfde tijdstip de positie en het moment van een elektron te bepalen.

Immers als je de positie van een elektron wil bepalen dan is het nodig om te kijken waar het zich bevindt. Omdat een elektron zo klein is zouden we een supermicroscop nodig hebben. En om een object te zien is het ook nodig dat de golflengte van het licht dat erop schijnt kleiner is dan het object.

Een atoom is veel kleiner dan de golflengte van zichtbaar licht. En een elektron is nog veel kleiner dan de kern van het atoom. Dus hebben we licht nodig met een zeer korte golflengte.

En omdat $\lambda = h/mv$ moet mv heel groot zijn. Dus is er hoogenergetische elektromagnetische straling nodig.

Stel dat we een hoogenergetische elektronenbundel gebruiken om een elektron te "zien".

Wanneer de elektronenbundel het elektron treft zal een gedeelte van het momentum van deze elektronenbundel overgebracht worden op het elektron. Dus wordt het originele momentum van dit elektron gewijzigd. Als we opnieuw willen 'zien' waar het elektron zich bevindt is dit onmogelijk zonder een nieuwe belichting en dus weer een verandering van momentum.

Als we de positie meer accuraat willen bepalen dan hebben we nog een kortere golflengte en dus een meer energetische belichting nodig. Het gevolg is dat het momentum nog meer zal veranderen.

Hoe precieser we de positie bepalen, hoe minder precies we het momentum kennen en omgekeerd. Dit wordt uitgedrukt in de vergelijking :

$$\text{Onzekerheid in positie} \times \text{Onzekerheid in momentum} \geq h/4\pi$$

Dus kijken naar een object, in dit geval een elektron, verandert zijn eigenschappen (positie en momentum). Een object waar we naar kijken heeft dus andere eigenschappen dan een object waar we niet naar kijken.

Omdat we niet juist de positie en het momentum op hetzelfde ogenblik kunnen bepalen spreken we van de waarschijnlijkheid om een elektron op een bepaalde aan te treffen op ene bepaald tijdstip.

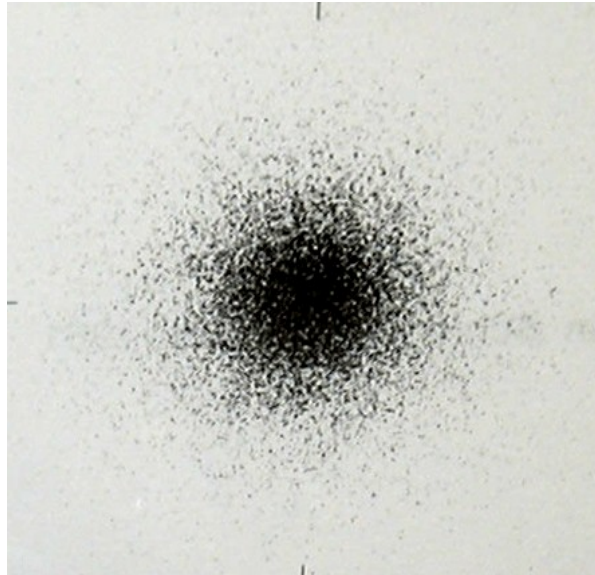
Wanneer de waarschijnlijkheid om een elektron in een bepaald aan te treffen groot is dan zegt men dat op dit punt de elektronendensiteit groot is.

Deze ruimte en de beschrijving van zijn elektronendensiteit wordt ORBITAAL genoemd.

De term "orbitaal" (=omloopbaan) verwijst duidelijk naar het atoommodel van Bohr.

Hieronder zie je een weergave van de elektronendensiteit voor het waterstofatoom in zijn grondtoestand (25000 puntjes).

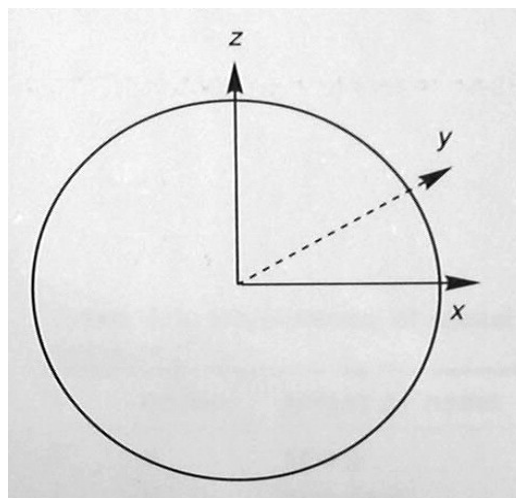
De zijde van het vierkant is 400pm ($1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$) met de atoomkern in het centrum.



Deze voorstelling van de elektronendensiteit is grafisch O.K. maar voor het maken ervan is een computerprogramma nodig. Daarom worden een andere weergave gebruikt: men berekent gewoon het oppervlak waar de elektronendensiteit een bepaalde waarde heeft (bvb. 90%).

Als je de omtrek hiervan tekent dan geeft dit diagram de vorm weer van de orbitaal.

Hieronder weergave van de omtrek van het waterstofatoom in de grondtoestand.



1.2. Benaming van orbitalen

Orbitalen worden genoemd naar de quantumnummers.

De eerste 3 quantumnummers voor orbitale zijn n , l en m_l

n = het primaire quantum nummer (het nummer voor de orbitaalgrootte)
de waarde van $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

l = het hoekmoment quantum nummer (het nummer voor de orbitaal vorm)
de waarde van l is een geheel getal van 0 tot $(n-1)$

m_l = het magnetisch quantum nummer (het orbitaal oriëntatie nummer)
de waarden zijn afhankelijk van l en kunnen variëren van $-l$ over 0 tot $+l$

Dus voor $n=1$ hebben we enkel $l=0$ en $m_l = 0$ en we hebben maar 1 orbitaal

Voor $n=2$ hebben we $l=0$ en $l=1$ en dus $m_l = -1, 0, +1$ en dus $1 + 3 = 4$ orbitalen

Voor $n=3$ hebben we $l=0, 1$ en 2 en dus $m_l = -2, -1, 0, +1, +2$. Hier hebben we voor $l=0$ 1 orbitaal, voor $l=1$ 3 orbitalen en voor $l=2$ 5 orbitalen dus samen 9 orbitalen.
enz...

De naam van de orbitalen :

Het eerste gedeelte is het hoofdquantumnummer n

Het tweede deel is afhankelijk van het orbitaal vormgetal l , maar wordt aangegeven met een letter.

l	naam	oorsprong van de naam
0	s	sharp
1	p	principal
2	d	diffuse
3	f	fundamental

Omgekeerd is het ook zo dat de naam van een orbitaal de quantumnummers weergeeft.

Voor $n=3$ en $l=0$ is er maar één orbitaal mogelijk met $m_l = 0$: de 3s orbitaal

Voor $n=3$ en $l=1$ zijn er 3 orbitalen mogelijk met $m_l = -1, 0, +1$: de 3p orbitalen

Voor $n=3$ en $l=2$ zijn er 5 orbitalen mogelijk met $m_l = -2, -1, 0, +1, +2$: de 3d orbitalen

Elk orbitaal kan maximaal 2 elektronen bevatten. In een orbitaal kan er ofwel geen enkel elektron zitten ofwel één elektron ofwel twee elektronen maar **nooit drie of meer**.

Wanneer er 2 elektronen in een orbitaal zitten dan verschillen die toch door hun rotatie of spin.

Dit wordt weergegeven door het spinquantumgetal. De waarde hiervan is $-1/2$ en $+1/2$.

De spin wordt grafisch weergegeven door een pijltje opwaarts of neerwaarts gericht.

2. Grafische aanduiding van de elektronenconfiguratie

Dit geeft de mogelijkheid de verdeling van elektronen over de verschillende magnetische schillen aan te duiden alsook de aanwezigheid van een spin-up en/of een spin-down elektron in een magnetische schil.

Dit is niet mogelijk in de tabel van het periodiek systeem van de elementen. Het is immers moeilijk deze tabel hiervoor zo aan te passen. Zo zou bvb. een subschil met 14 elektronen dan verdeeld worden in 7 rechthoekjes met ieder 2 pijltjes (of meer rechthoekjes als elke magnetische schil geen twee spins heeft.)

Enkele voorbeelden:

Boor [₅B] : $1s^2 2s^2 2p^1$

1s 2s 2p



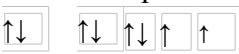
Stikstof [₇N] : $1s^2 2s^2 2p^3$

1s 2s 2p



Zuurstof [₈O] : $1s^2 2s^2 2p^4$

1s 2s 2p



Hierbij valt op dat de twee spins in een magnetische schil niet moeten opgevuld zijn, voordat een volgende magnetische schil een elektron krijgt (zoals bij N en O)

3. De Valentiebindingstheorie (VB)

3.1. Inleiding

De valentiebindingstheorie verklaart de aard van een chemische binding in termen van valenties. De valentiebindingstheorie komt voort uit de regel dat het centrale atoom in een molecuul de voorkeur geeft aan het vormen van elektronenparen conform geometrische beperkingen zoals *bij benadering* gedefinieerd door **de octetregel**.

Dit is een eenvoudige vuistregel die zegt dat atomen op een zodanige manier proberen te combineren dat ze elk acht elektronen in hun valentieschil hebben, zodat ze dezelfde elektronenconfiguratie krijgen als een edelgas.

De regel is toepasbaar voor de hoofdgroep-elementen, in het bijzonder koolstof, stikstof, zuurstof en de halogenen (chlor, broom, jood) en metalen zoals natrium, kalium, calcium of magnesium.

De valentieschil van een element is vol en meest stabiel wanneer ze 8 elektronen bevat.

Deze stabiliteit is de reden dat de edelgassen zo weinig reactief zijn. Er kunnen maximaal 8 valentie-elektronen in een atoom in de grondtoestand omdat de p-subschillen altijd gevolgd worden door de s-subschil van de volgende schil.

Dit betekent dat wanneer er eenmaal 8 valentie-elektronen zijn (dus: als de p-subschil vol is), het volgende elektron in de volgende schil gaat en die schil wordt dan de valentieschil.

Een gevolg van de octetregel is dat atomen over het algemeen reageren door het verkrijgen, verliezen of delen van elektronen om een compleet octet aan valentie-elektronen te krijgen.

Uitzonderingen op de octetregel:

1. De duetregel voor de eerste schil. Het edelgas helium heeft twee elektronen in de buitenste schil en is erg stabiel. Omdat er geen 1p-subschil bestaat, wordt de 1s direct gevolgd door de 2s en kan schil 1 maar twee valentie-elektronen bevatten. Waterstof heeft zodoende maar één extra elektron nodig om een stabiele configuratie te vormen en lithium moet er eentje verliezen.
2. Een elektronentekort vindt plaats in covalente bindingen als een atoom minder dan acht elektronen heeft en geen ongepaard elektron over heeft waarmee het een extra binding kan maken. Dit komt vaak voor bij boorverbindingen die dan maar zes elektronen in de valentieschil hebben, zoals boortrifluoride (BF_3). Het komt ook voor bij enkele zeer reactieve stoffen, zoals carbenen (*).
3. Vrije radicalen, zoals stikstofmonoxide (NO), bevatten een of meer atomen die een oneven aantal elektronen hebben.
4. Atomen met drie of meer elektronenschillen kunnen meer dan acht elektronen in hun valentieschil kwijt (hypervalentie). Voorbeelden zijn fosfor in fosforpentachloride (PCl_5) en zwavel in zwavelhexafluoride (SF_6).
5. De 18-elektronregel heeft voorrang op de octetregel bij de overgangsmetalen.

(*) **Een carbeen is** een kort-levende, zeer reactieve organische molecuul met een divalente koolstof. Dit koolstofatoom heeft maar 6 valentie-elektronen. Het divalente C-atoom is sp^2 gehybridiseerd en heeft een vrij elektronenpaar. De algemene formule is: **$R_1R_2C:$**

3.2. De geschiedenis van de VB.

In 1916 veronderstelde Gilbert Lewis dat een chemische binding wordt gevormd door de interactie van twee gedeelde bindingselektronen met moleculen. Deze voorstelling wordt daarom Lewisstructuur genoemd.

Walter Heitler ontdekte in 1925 hoe de Schrödingervergelijking gebruikt kon worden om te laten zien hoe de golf functies van twee waterstofatomen samengaan om een covalente binding te vormen.

Samen met Fritz London werkte hij de details van de theorie uit.

Later gebruikte Linus Pauling het idee van paarbinding van Lewis samen met de Heitler-Londontheorie om twee andere concepten van de valentiebindingstheorie te ontwikkelen, namelijk de resonantie (1928) en de orbitaalhybridisatie (1930).

Chemische resonantie (ook *mesomerie* genoemd) is het verschijnsel dat in een chemische verbinding de elektronendistributie over verschillende mogelijke structuren verdeeld wordt. Vaak zijn deze verschillende structuren aan elkaar verwant door een spiegeling of een andere symmetrieoperatie.

Voor bepaalde moleculen kan men meerdere correcte Lewisstructuren opstellen, hoewel geen van die structuren volledig in overeenstemming is met de eigenschappen van die stof. De werkelijke elektronendistributie ligt dan tussen deze structuren in en is dus een superpositie van al deze mesomeren. Er wordt gezegd dat de molecule "resoneert" tussen deze verschillende structuren.

Of ook : dat de structuur een resonantie hybride is van al deze mesomeren.

Resonantie (mesomerie) in chemische verbindingen zorgt voor een grote stabiliteit.

De energie van de resonantie hybride is altijd lager dan de brekende energie van elke afzonderlijke alternatieve structuur.

Opmerkingen:

1. Het 'verschijnsel' resonantie verdwijnt echter zodra men de klassieke Lewistheorie vervangt door betere golfmechanische beschrijvingen zoals de moleculaire orbitaaltheorie. Dit is dus een artefact van een te simpel model dat het golfkarakter van de elektronen niet goed in rekening kan brengen.

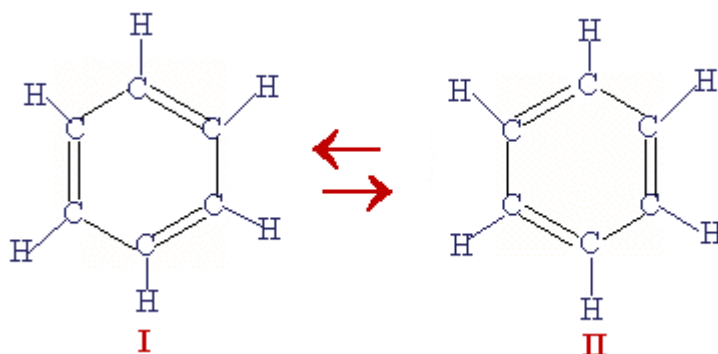
2. de term "resonantie" is verwarrend want in de natuurkunde betekent "resonantie" iets heel anders.

Resonantie wordt in dit verband dan ook bij voorkeur vervangen door "delocalisatie".

Zo ook kan de term "mesomeer" vervangen worden door "intermediaire toestand".

2.3. Linus Pauling en de structuur van benzeen.

Kékulé stelde in 1858 voor dat de molecule een ringstructuur was met 6 C-atomen (zoals cyclohexaan) maar met 3 dubbele bindingen. Er zijn 2 structuren met de 3 dubbele bindingen en volgens Kékulé oscilleert de benzeen molecule heel snel tussen deze 2 toestanden.



Maar dit stelt enkele problemen o.a.

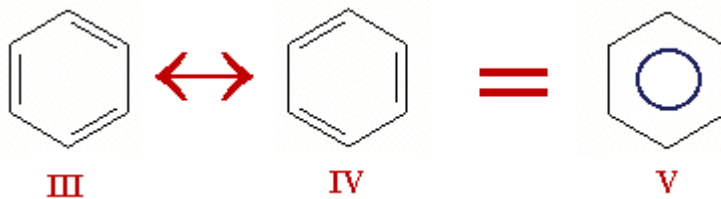
1. Waarom prefereert benzeen substitutiereacties boven additie?
2. Uit onderzoek blijkt de bindingsafstand tussen de 6 atomen gelijk te zijn en ligt die tussen de afstand van een C=C en van een C-C binding.
Dit is in tegenspraak met het Kékulé model dat alternerende C=C en C-C bindingen voorstelt.

In 1931 lost Linus Pauling deze problemen op met de **resonantie-theorie**.

Zijn voorstel van de benzeenstructuur is:

De 6 C atomen worden in een zeshoek geplaatst (zoals cyclohexaan) en aan ieder C-atoom hangt er één H-atoom vast. Deze 12 atomen van benzeen vormen een vlakke structuur met C in de sp^2 hybride toestand en met tussen de C-atomen 120° bindingshoeken.

Om de structuur van benzeen af te beelden gebruiken we daarom best fig. V (een zeshoek met een cirkel erin) want de structuren III en IV bestaan immers niet!! In de benzeenring zijn de elektronen gedelokaliseerd over de gehele ring. Dit wordt weergegeven door een cirkel in het midden van de zeshoek.



Deze delocalisatie (resonantie) geeft meteen ook een antwoord op de vragen:

- 1) waarom benzeen bij voorkeur substituties heeft en moeilijk addities toestaat.
Immers wanneer er bij benzeen een additie gebeurt dan is de resonantie gestoord en wordt de molecule minder stabiel. Daarom zal benzeen eerder een substitutie laten doorgaan (bvb. Br voor H, ...) en zo de resonantie behouden.
- 2) waarom benzeen 6 bindingen heeft met een lengte tussen C=C en C-C
Volgens de resonantie-theorie zijn er tussen de C-atomen geen C=C of C-C bindingen maar zijn er 6 gelijke hybride bindingen.

3.3. De valentiebinding (VB) theorie

Een valentiebindingsstructuur is een Lewisstructuur. Waar een enkele Lewisstructuur niet volstaat om de toestand te beschrijven worden verschillende valentiebindingsstructuren gebruikt. Elk van deze VB-structuren komt dan overeen met één specifieke Lewisstructuur.

De combinatie van VB-structuren is het belangrijke punt voor de resonantietheorie (of delocalisatie theorie).

De VB-theorie zegt dat in een molecule de overlappende atomaire orbitalen van de deelnemende atomen een chemische binding vormen. Vanwege de overlapping is het zeer waarschijnlijk dat elektronen zich in de bindingsregio bevinden.

De VB-theorie ziet chemische bindingen als zwakke gekoppelde orbitalen (=kleine overlapping).

De overlappende atomaire orbitalen verschillen.

Er zijn twee types van overlappende orbitalen : σ en π .

σ -bindingen ontstaan als de orbitalen van twee gedeelde elektronen elkaar head-to-head overlappen (co-axiale overlapping).

π -bindingen ontstaan als twee parallelle orbitalen overlappen.

Bijvoorbeeld:

De binding tussen twee s-orbitaal elektronen is een σ -binding, omdat twee bollen altijd coaxiaal zijn.

Een σ -binding bestaat altijd uit één binding tussen 2 atomen.

Een dubbele binding bestaat uit één σ -binding + één π -binding.

Een driedubbele binding bestaat uit één σ -binding en 2 π -bindingen.

Een π -binding zal zich nooit vormen tussen s-orbitalen, wel tussen p-orbitalen.

1.4. De hedendaagse VB theorie

De valentiebindingstheorie completeert nu de molecuulorbitaaltheorie (MO-theorie) die het VB-idee dat elektronenparen gelokaliseerd zijn tussen twee specifieke atomen in een molecule niet volgt.

De MO verklaart dat elektronenparen verdeeld zijn in sets van moleculaire orbitalen die zich kunnen uitstrekken over de gehele molecule.

De MO-theorie kan magnetische eigenschappen op een rechttoe-rechtaan manier voorspellen. Hiervoor is de VB-theorie gecompliceerder alhoewel ze dezelfde resultaten geeft.

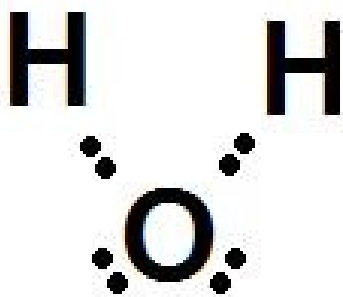
De VB-theorie ziet de eigenschappen van cyclische aromatische koolwaterstoffen als het gevolg van resonantie tussen Kekuléstructuren, Dewarstructuren (zie opmerking pag.9) en mogelijk ionische structuren.

De MO-theorie ziet dit allemaal als een delocalisatie van de n-elektronen.

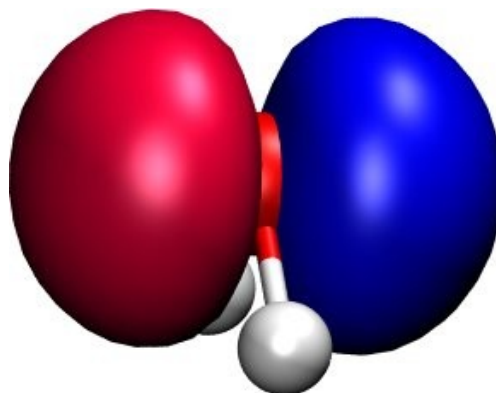
De onderliggende wiskunde is ook meer gecompliceerd bij de VB-theorie, hetgeen ervoor zorgt dat deze theorie meestal alleen wordt uitgewerkt voor relatief kleine moleculen.

Anderzijds geeft de VB-theorie een nauwkeuriger beeld van de reorganisatie van de elektronenlading die plaatsvindt als bindingen worden verbroken en worden gevormd tijdens een chemische reactie.

In het bijzonder voorspelt de VB-theorie correct de dissociatie van homonucleaire di-atomaire moleculen (zoals N_2 , O_2 ,...) in gescheiden atomen, terwijl de eenvoudige MO-theorie een dissociatie voorspelt in een mengsel van atomen en ionen.



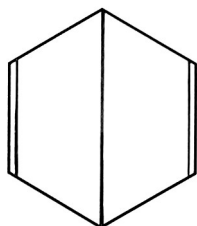
De Lewisstructuur van water



**De moleculaire orbitaalstructuur van water
(HOMO = Highest Occupied Molecular Orbital)**

Opmerkingen i.v.m. benzeen

1. Er bestaat ook een niet-aromatische structuur van benzeen : dewarbenzeen



Hoewel benzeen niet de structuur had die James Dewar in 1867 voorstelt, is er later wel een isomeer met die structuur gevonden en naar Dewar genoemd.

Dewarbenzeen of bicyclo[2.2.0]hexa-2,5-dieen is een bicyclisch isomeer van benzeen. Dit is geen aromatische structuur en dewarbenzeen is veel minder stabiel dan 'normaal' benzeen.

Dewarbenzeen kan uit benzeen gemaakt worden door bestraling met UV-licht. Het reactiemengsel moet gekoeld worden want bij temperatuurverhoging wordt dewarbenzeen weer omgezet in 'normaal' aromatisch benzeen.

2. Gevaren bij gebruik van benzeen

Zoals veel organische oplosmiddelen is benzeen zeer brandgevaarlijk. Maar er is meer. De structuur van benzeen maakt dat het mogelijk is dat deze molecule past tussen de baseparen in DNA en zo kan benzeen mutageen werkzaam zijn. Daarom wordt benzeen als solvent vervangen door het veiliger toluen. Immers door in benzeen een H te vervangen door een CH_3 groep wordt de structuur van de molecule veranderd (de methylgroep is veel groter dan het waterstofatoom) en zo kan toluen niet tussen de baseparen van het DNA ingepast worden.

4. De moleculaire orbitaal theorie (MO)

4.1. Inleiding

Bij een atoom dat zich alléén bevindt in de ruimte en geen aantrekkingskracht ondervindt van om het even welk ander atoom of van een elektrisch of magnetisch veld, bevinden de elektronen zich in atoomorbitalen. Zodra er zich echter enige aantrekkingskracht voordoet vervormen de orbitalen van het atoom.

Bij de vorming van een molecule uit twee of meer atomen komt deze vervorming dus ook voor en alle individuele atoomorbitalen "versmelten" tot één geheel : de molecuulorbitaal.

Een **orbitaal** is een begrip in de natuurkunde om min of meer aanschouwelijk betekenis te geven aan de baan van een elektron in een atoom.

In het klassieke atoommodel van Bohr bevindt een elektron zich in een schil, een bolvormig gebied rondom de kern.

In de kwantummechanica wordt de positie van een elektron in een geïsoleerd atoom beschreven door de golf functie van dat elektron. Door deze golf functie, die zelf ook als **orbitaal** wordt aangeduid, wordt een kansverdeling gegeven over de mogelijke posities van het elektron.

In principe bestaat de mogelijkheid het elektron op zeer grote afstand van de kern aan te treffen, maar de kans daarop is zeer gering. De meest waarschijnlijke posities, met gezamenlijk een kans van 90% om het elektron aan te treffen, vormen de orbitaal.

De orbitaal is dus het trefkansgebied van een elektron binnen de grenzen van het atoom. Men zegt ook : **orbitalen zijn functies die de verdeling van de elektronen in een atoom of in een molecule beschrijven.**

Aan elke functie is ook een energieniveau verbonden.

In atomen onderscheiden we van laag naar hoog de 'schillen' 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d enz.

Elk p niveau is nog eens onderverdeeld in 3 functies, elk d niveau in 5.

In moleculen worden de moleculaire orbitalen (MO's) voorgesteld als combinaties van atoomorbitalen (AO's). AO's van verschillende atomen kunnen zulke combinaties vormen als ze

- niet teveel in energie verschillen
- ruimtelijk overlappen, waarbij de symmetrie een belangrijke rol speelt.

De Mo's worden ook gerangschikt naar hun energie.

Tussen twee atomen komt een covalente binding tot stand als de totale energie van de elektronen in de MO's lager is dan in de oorspronkelijke AO's.

Golf functies kunnen moeilijk in beeld worden gebracht. Het zijn immers driedimensionale functies. Een mogelijke weergave is een *stippendiagram* waarin een grote kans om het elektron aan te treffen wordt aangegeven met een grote stippendichtheid. De contourvlakken die een zo klein mogelijk volume omsluiten waarop 90% kans is het elektron er aan te treffen geven de een beeld van de orbitaal.

4.2. Elektron : deeltje of golf ?

4.2.1. De deeltjesvisie

De vorm van de orbitalen kan men in theorie wiskundig bepalen, maar de plaats van de elektronen niet. De vorm van de orbitaal wordt aangegeven voor het gebied waar het elektron 90% van zijn tijd doorbrengt. Dit zou suggereren dat het elektron ook wel eens 'even' ergens anders kan zijn. Hoewel de vergelijking niet op alle punten klopt kun je het vergelijken met een steen die aan een touw heel erg snel rondgedraaid wordt. Er is maar één steen, maar je weet ook dat als je binnen de straal van de cirkel komt er een grote kans bestaat dat je de steen tegen je schenen krijgt. De steen is niet overal tegelijk, maar je moet er wel overal langs zijn baan altijd rekening mee houden.

Dit is één interpretatie van de orbitaal.

4.2.2. De golfvisie

De andere interpretatie gaat uit van de dualiteit van de materie want hoe vreemd dit ook klinkt : **deeltjes zijn golven en golven zijn deeltjes.**

Wanneer een golf opgesloten wordt in een beperkte ruimte ontstaan er staande golven. Dit is een algemeen verschijnsel dat bijvoorbeeld ook verantwoordelijk is voor de werking van vele muziekinstrumenten. De beperking van de bewegingsruimte van de golf kan de vorm aannemen van een doos of een kooi met duidelijke wanden maar het verschijnsel treedt ook op wanneer een golf (lees: deeltje) op een andere manier vastgehouden wordt, zoals een elektron aangetrokken wordt door de positief geladen kern van een atoom (de wet van Coulomb). Er is dan wel geen duidelijk afgescheiden wand, maar de amplitude van de golf sterft geleidelijk uit met de afstand van de molecule,.

Dit is vergelijkbaar dat met de verminderde dichtheid van de aardse atmosfeer op grotere hoogte.

Bij een moleculair orbitaal is de kluistering niet beperkt tot de ruimte rond één kern, maar geschiedt rond twee of meer kernen.

Staande golven worden altijd gekenmerkt door een (geheel) aantal knopen en buiken.

Ook speelt het begrip fase een rol. Aan weerszijden van een knoopvlak wisselt de fase altijd van teken. De energie van de orbitaal hangt sterk af van hoeveel knopen en buiken er zijn. Hoe meer knoopvlakken des te hoger is de energie

In de golfvisie vullen de elektronen van een molecule dus een aantal van deze staande golfpatronen op.

En zoals dat ook het geval is voor een AO kunnen er in een MO maar 2 elektronen voorkomen.

Zowel de vorm, het aantal knopen en buiken als de energie van de orbitalen kan berekend worden. Maar van zodra er meer dan één elektron in de moleculaire orbitaal zit zal er afstoting ontstaan tussen de elektronen onderling. Hierdoor is de MO van het H_2^+ -ion eigenlijk de enige moleculaire orbitaal waarvan men perfect de vorm kan berekenen.

Gelukkig zijn er voor ingewikkeldere moleculen met veel meer elektronen goede benaderingen mogelijk die veel inzicht geven in het fysische en chemische gedrag van een molecule.

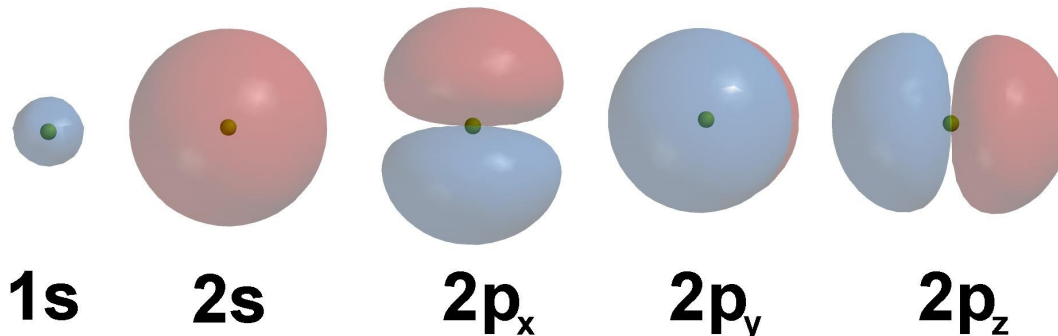
4.3. De vorm van orbitalen

Orbitalen komen in verschillende vormen voor en op verschillende niveaus.

De vormen worden aangeduid met de letters s, p, d en f en verder alfabetisch g,h,...

*De letters s,p,d en f zijn afkomstig van de beginletters van de kenmerken van de spectraallijnen,
namelijk sharp, principal, diffuse en fundamental.*

De niveaus (schilnummers) worden aangeduid met een cijfer dat voor de letter wordt geplaatst.



2.3.1. De s-orbitaal

Dit is de eenvoudigste orbitaal en hij is bolvormig.

De golffunctie van de laagste s-orbitaal (1s) heeft overal hetzelfde teken, zodat de orbitaal geheel aaneengesloten is. Het maximum van de kansverdeling ligt *op de kern* van het atoom, waar in de klassieke mechanica het elektron beslist niet kon komen, en de kansdichtheid neemt af met toenemende afstand tot de kern.

De 2s en hogere orbitalen hebben knoopvlakken, vlakken waar de golffunctie door nul gaat.

De knoopvlakken van de 2s, 3s enzovoorts zijn concentrische boloppervlakken.

De kansverdeling van de elektronen is op die vlakken nul, het elektron kan alleen aan weerszijden van zo'n vlak worden aangetroffen.

2.3.2. De p-orbitalen

De laagste p-orbitaal is 2p; deze vertoont een haltervorm, waarvan het knooppunt samenvalt met de atoomkern. Er is 1 knoopvlak dat midden tussen de twee armen van de halter loopt.

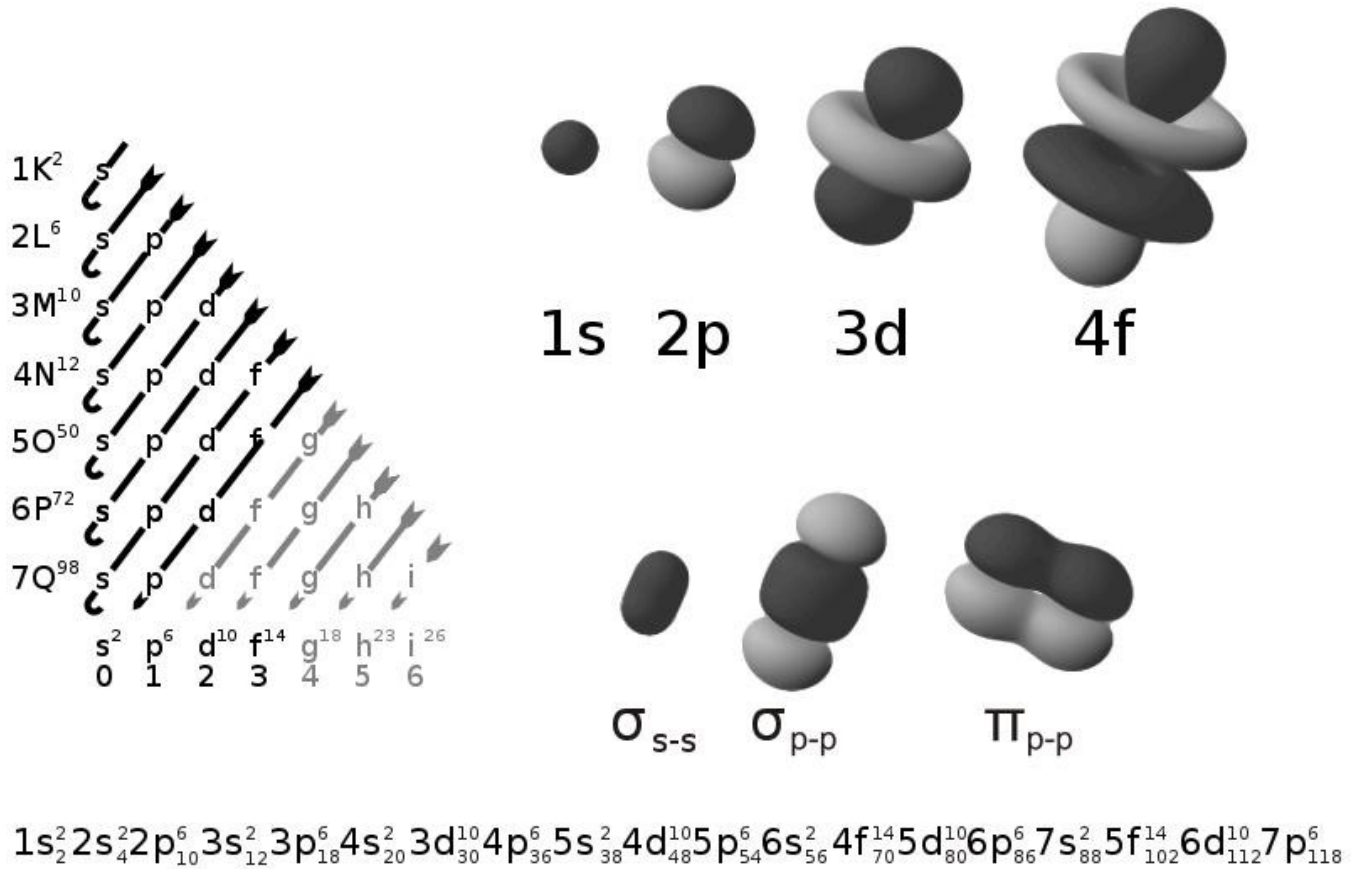
Een p-orbitaal is een lineaire combinatie van drie mogelijke p-orbitalen van eenzelfde subniveau.

Deze zijn in de ruimte geïntendeerd volgens drie loodrecht op elkaar staande richtingen.

Hogere p-orbitalen (3p, 4p, ...) hebben naast het knoopvlak tussen de halters ook nog knoopvlakken - een beetje zoals als de hogere s-orbitalen - in de vorm van een bolschil.

4.3.3. De hogere orbitalen

De d-, f-, en hogere orbitalen vertonen meer en meer ingewikkelde vormen. Ze hebben van 2 tot 3 en zelfs meer knoopvlakken.



Bovenaan : vorm van de 1s, 2p, 3d en 4f orbitalen

Onderaan : vorm van de sigma- en pi- bindingen

5. Hybridisatie

5.1. Inleiding

Hybridisatie is het mengen van elektronen-orbitalen van een atoom.

Hybridisatie wordt soms gebruikt om de vorming van chemische bindingen te verklaren.

Covalente bindingen tussen atomen kunnen worden gevormd wanneer twee atomen die vlak bij elkaar liggen twee energie-gunstige orbitalen hebben die overlappen en wanneer in die beide orbitalen samen 2 elektronen zitten.

Atoomorbitalen zijn heel ongunstig om te overlappen.

Alleen in de waterstof molecule H_2 is het mogelijk om atoom-orbitalen op een eenvoudige manier met elkaar te laten overlappen: de 1s orbitaal van het ene atoom en de 1s orbitaal van het andere atoom overlappen daar.

Voor de hogere elementen spelen vrijwel altijd mengsels (wiskundig gezien zijn dit lineaire combinaties) van de atoomorbitalen een rol. Het maken van deze combinaties wordt hybridiseren genoemd.

5.2. Orbitalen combineren



Geometrie en bindingshoeken bij sp^2 en sp^3 hybridisatie

Voor de meest simpele en begrijpelijke gevallen worden combinaties gemaakt tussen de s- en p-orbitalen uit de valentieschil van het atoom. De combinaties hebben specifieke rangschikkingen die afhangen van het type van hybridisatie:

- Wanneer een s-orbitaal mengt met één enkele p-orbitaal, worden 2 sp orbitalen gevormd (één naar links en één naar rechts) en blijven er loodrecht daarop 2 p orbitalen over.
- Wanneer een s-orbitaal mengt met 2 p-orbitalen, worden 3 sp^2 orbitalen gevormd (onder 120° in een vlak), en blijft er loodrecht op dat vlak 1 p orbitaal over.
- Wanneer een s-orbitaal mengt met 3 p-orbitalen, worden 4 sp^3 orbitalen gevormd alsof het atoom het midden vormt van een tetraëder met de hybride-orbitalen wijzend naar de vier punten.

5.3. Waarom hanteert men het hybridisatiemodel?

Men heeft hybridisatie nooit onder de microscoop kunnen waarnemen. Geen mens heeft het ooit gezien. En toch weet men dat de orbitalen hybridiseren.

Kijk even naar het element koolstof.

C heeft 6 elektronen.

De elektronenconfiguratie ziet er dus als volgt uit:

2 elektronen op de 1s schil, 2 elektronen op de 2s schil en 2 elektronen op de 2p-schil.

Men noteert dit op de volgende manier:

```
1s2.....2s2.....2p2
↑↓.....↑↓.....↑↑
```

De stabiliteitsregels stellen dat de stabielste elektronenconfiguratie de edelgasconfiguratie is, ofwel een volledig bezet subniveau en als dat niet kan bereikt worden een halfbezet subniveau.

Als we deze stabiliteitsregels op koolstof toepassen, dan krijgen we de volgende situatie:

```
1s2.....2s1.....2p3
↑↓.....↑.....↑..↑..↑
```

Dit wordt **de intermediaire toestand** genoemd.

Als je nu de verbinding methaan zou willen vormen (CH_4), dan is dit nu mogelijk want de s-orbitaal is halfbezet en elk van de drie p-orbitalen is eveneens halfbezet zodanig dat een covalente binding perfect mogelijk zou zijn van het C-atoom met 4 H-atomen.

Maar... dit zou dan wel betekenen dat de covalente binding met de s-orbitaal niet gelijkwaardig is met de covalente bindingen met de p-orbitalen.

Immers, p-orbitalen zijn energierijker!

Maar onderzoek heeft uitgewezen dat alle hoeken van een CH_4 -molecule gelijk zijn en dus dat alle covalente bindingen in CH_4 in éénzelfde energierijke toestand zijn. Daarom gaat men ervan uit dat de p-orbitalen naar een lagere energietoestand overgaan en de s-orbitalen naar een hogere.

Er worden zo 4 gelijke hybride-orbitalen gevormd.

Voorstelling:

```
1s2.....h.h..h.h
↑↓.....↑.↑.↑.↑
```

Met het hybridisatiemodel kunnen dus de identieke bindingshoeken in methaan perfect verklaard worden.

5.4. Welke hybridisatie treedt er op?

Als een atoom covalent gebonden bindingspartners heeft, dan moet men (behalve voor waterstof) het hybridisatiemodel toepassen. Vooral voor koolstof, zuurstof en stikstof levert dit een goede beschrijving van het gedrag van de atomen in verbindingen.

Als je hebt besloten welke elementen gehybridiseerd zullen worden, moet je je nog afvragen welke orbitalen deelnemen aan de hybridisatie.

Hiervoor is ook een eenvoudige regel :

Het aantal bindingsrichtingen dat je nodig hebt bepaalt het aantal noodzakelijke gehybridiseerde orbitalen

LET OP : Een vrij elektronenpaar telt ook als een bindingsrichting.

Dus:

koolstof in CH₄ : (= 4 bindingsrichtingen): $1S + 3P \rightarrow sp^3$

koolstof in etheen : (= 3 bindingsrichtingen): $1S + 2P \rightarrow sp^2$

koolstof in ethyn : (= 2 bindingsrichtingen): $1S + 1P \rightarrow sp$

zuurstof in water, alkanolen en ethers:

(2 bindingsrichtingen + 2 vrije elektronenparen = totaal 4) : $1S + 3P \rightarrow sp^3$

zuurstof in aldehyden, ketonen en

het dubbel gebonden zuurstofatoom **in carbonzuren, esters en amides :**

(1 bindingsrichting + 2 vrije elektronenparen = totaal 3) : $1S + 2P \rightarrow sp^2$

stikstof in ammoniak :

(3 richtingen + 1 vrij elektronenpaar = totaal 4) : $1S + 3P \rightarrow sp^3$

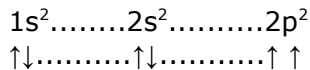
5.5. Waarom hanteert men het hybridisatiemodel?

Men heeft het nooit onder de microscoop kunnen waarnemen.
Geen mens heeft het ooit gezien.
En toch weet men dat de orbitalen hybridiseren.

Beschouw eens het element koolstof.
C heeft 6 elektronen.

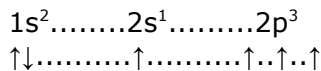
De elektronenconfiguratie ziet er dus als volgt uit: 2 elektronen op de 1s schil, 2 elektronen op de 2s schil en 2 elektronen op de 2p-schil.

Men noteert dit op de volgende manier:



De stabiliteitsregels stellen dat de stabielste elektronenconfiguratie de edelgasconfiguratie is en dus een volledig bezet subniveau. Als een volledige bezetting niet kan bereikt worden dan wordt er gestreefd naar een halfbezet subniveau.

Als we deze stabiliteitsregels op koolstof toepassen, dan krijgen we de volgende situatie:



We noemen dit de intermediaire toestand.

Als je nu de verbinding methaan wil vormen (CH_4) is dit in deze toestand perfect mogelijk. De s-orbitaal is halfbezet en elk van de drie p-orbitalen is eveneens halfbezet zodanig dat een covalente binding mogelijk zou zijn met 4 waterstofatomen.

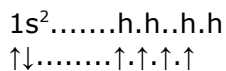
MAAR ... dit betekent dat de covalente binding met de s-orbitaal minder energierijk is dan de covalente bindingen met de p-orbitalen.

De p-orbitalen zijn immers energierijker!

En uit onderzoek blijkt dat alle hoeken van een CH_4 -molecule gelijk zijn.

Men moet hieruit concluderen dat alle covalente bindingen in éénzelfde energetische toestand zijn. Daarom gaat men ervan uit dat de p-orbitalen naar een lagere energietoestand overgaan en de s-orbitaal naar een hogere energietoestand. Ze vormen zo de hybride-orbitalen.

Voorstelling: de ene (2s) orbitaal en de drie (2p) orbitalen vormen nu samen vier (sp^3) orbitalen. sp^3 betekent dus 4 orbitalen gevormd door hybridisatie van één s-orbitaal en drie p-orbitalen.



Zo heb je dus ook (sp^2) orbitalen door hybridisatie van één s-orbitaal en twee p-orbitalen en (sp) orbitalen door hybridisatie van één s-orbitaal en één p-orbitaal.

Met het hybridisatiemodel kunnen de identieke bindingshoeken in methaan perfect verklaard worden.

5. Bindingen

Twee orbitalen (hybride of atoomorbitalen) met een soortgelijke symmetrie en in aangrenzende atomen liggend kunnen tot een binding leiden.

Er kunnen zelfs meerdere paren van orbitalen gevormd worden tussen hetzelfde paar atomen. Dit is dan een meervoudige binding.

De eerste binding tussen twee atomen wordt een **σ -binding** genoemd.

Een σ -binding bestaat altijd uit **één enkele binding** tussen 2 atomen.

Een σ -binding wordt gekenmerkt door een overlapzone met de grootste elektronendichtheid gesitueerd op de bindingslijn tussen de twee atomen. Dit gebeurt wanneer de orbitalen elk naar het andere atoom "wijzen".

Een σ -binding heeft een rotatie-as met oneindige symmetrie (rotatie-symmetrie) en er is **volledige rotatievrijheid** want de overlap tussen de orbitalen blijft bij rotatie bestaan.

Indien er **meer dan één binding** is tussen twee atomen (bijvoorbeeld in C_2H_4 en N_2) overlappen de orbitalen die daarvoor verantwoordelijk zijn aan twee kanten van de bindings-as (boven en onder het vlak, of voor en achter het vlak). Deze bindingen worden **π -bindingen** genoemd.

Wanneer er een π -binding tussen twee atomen zit, heeft die binding **geen rotatievrijheid** meer (draaien om de binding zou de overlap tussen de orbitalen verminderen).

π -bindingen worden meestal gevormd door ongehybridiseerde p-orbitalen op de twee atomen.

Als 2 atomen één dubbele binding vormen dan zullen de rest van de orbitalen (een s en twee p orbitalen) tot drie sp^2 orbitalen hybridiseren.

Een ander voorbeeld:

Wanneer een atoom 2 dubbele bindingen vormt, blijven er 1 s en 1 p (bijvoorbeeld p_x) orbitaal over om 2 sp orbitalen te vormen. Deze wijzen respectievelijk naar links en naar rechts. Één van de overblijvende p orbitalen (bijvoorbeeld p_z) vormt een dubbele binding "boven en onder" met een tweede atoom, en de ander (p_y) "voor en achter" met een derde atoom.

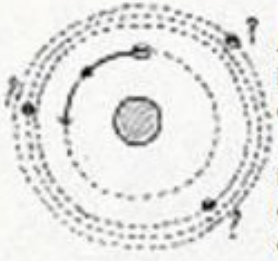
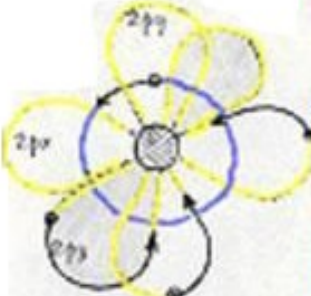



Opmerking :

Wanneer atomen in de derde of hogere periodes hybride orbitalen vormen wordt het ingewikkeld.

Dan kunnen ook d (of zelfs f) orbitalen mee gehybridiseerd worden. Dit levert een rijk gamma aan verschillende mogelijkheden voor omringing op.

Dat uit zich bvb. in de zeer diverse omringingsvoorkeuren van de overgangsmetalen. Het is heel moeilijk om deze omringingen te voorspellen, maar met behulp van de hybridisatietheorie en wat driedimensionaal inzicht zijn ze toch allemaal te verklaren.

SAMENVATTING

 <p>Nu hebben we dus één 2s en drie 2p-electronen. Alle vier 'orbitalen' hebben dus elk één electron.</p> <p>Let op: nu kijken we naar de ruimtelijke vorm van een p-orbitaal (sub-nivo)</p>	 <p>Het 2s-orbitaal blijft bolvormig. De drie sp-orbitalen, vanwege hun ruimtelijke oriëntatie, duiden we aan met 2px, 2py en 2pz. Alle vier orbitalen kunnen gaan mixen: hybridizeren.</p>	
 <p>de 2s- en de drie 2p-orbitalen hebben gemixed en er zijn in plaats daarvan vier nieuwe orbitalen gevormd van het type sp³</p> <p>optie 1</p>	 <p>de 2s- en twee 2p-orbitalen hebben gemixed, 2p_z blijft ongewijzigd. Er zijn drie nieuwe mix-orbitalen van het type sp²</p> <p>optie 2</p>	 <p>de 2s- en de sp_x-orbitaal mixen en vormen twee nieuwe orbitalen van het type sp. 2p_y en 2p_z blijven ongewijzigd.</p> <p>optie 3</p>

Over optie 1:

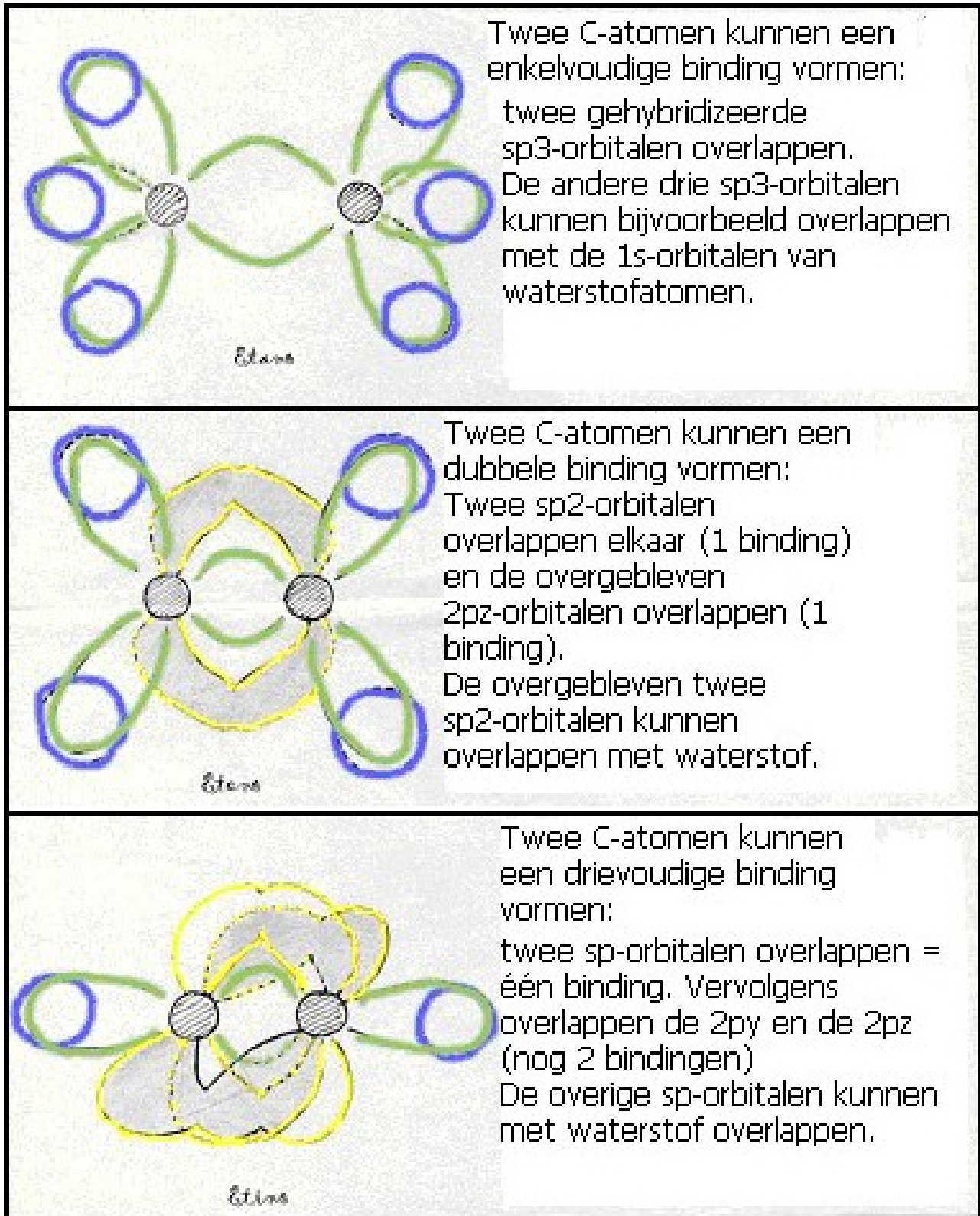
Hier maakt het koolstofatoom vier sigma (σ) bindingen met vier andere atomen, ook met andere C-atomen. In dit geval mogen we het C-atoom zien als een atoom met vier gelijke bindingen van het type σ (sp³ bindingen) dat in de enkelvoudige bindingen overlapping vertoont met 3 gehybridiseerde orbitalen, bijvoorbeeld met de orbitalen van waterstofatomen.

Substitutieprocessen maken dit type bindingen niet kapot. Ze blijven gewoon sp³ met elektronen van het type σ .

Over dubbele en drievoudige bindingen (opties 2 en 3):

Bij koolstofatomen met sp² of sp hybridizatie hebben we onverzadigde bindingen met elektronen van het type σ en , die additie kunnen ondergaan.

Gedurende dit additieproces vermindert het aantal elektronen van het type n ten gunste van elektronen van het type σ .



6. Reactiemechanisme

6.1. Inleiding

Een chemische reactie heeft altijd te maken met een herverdeling van valentie-elektronen op het moment dat bepaalde deeltjes in contact treden met elkaar met voldoende energie. Bij een chemische reactie verdwijnen chemische bindingen en worden er nieuwe gemaakt.

De reactie is het resultaat van een complex proces dat uit diverse stappen bestaat. Er zal altijd een eerste stap zijn (initiatie), de volgende stappen (continuatie) en zoiets als een terminatie, dus de eindstappen die de reactie beëindigen.

Al die stappen samen noemen we ook wel: het reactiemechanisme.

In zo'n mechanisme is altijd wel zoiets als een "aanval" van sommige deeltjes op andere deeltjes. De aanvallende deeltjes hebben normaal gesproken voldoende energie daarvoor (anders lukt het niet); ze zijn energie-rijk.

Daarnaast hebben soms ook katalysatoren een belangrijke invloed op het mechanisme. Ze doen wel mee, maar komen onveranderd tevoorschijn uit de reactie.

In de biochemie spreken we van bio-katalysatoren of enzymen.

Katalysatoren stimuleren een proces, of beter: bepaalde stappen in een proces.

In plaats van met een katalysator kan een chemisch proces ook opgestart worden door bijvoorbeeld lichtstraling, die een binding onstabiel maakt en daarmee een deeltje veel reactiever. Er vormen zich dan actieve deeltjes (met voldoende energie) die de reactie continueren en uiteindelijk ook stoppen.

In de koolstofchemie kennen we twee types van reactiemechanismen:

1. Er kan een aanval plaats vinden van een positief op een negatief geladen deeltje (elektrofiel) of omgekeerd: een aanval van een negatief op een positief deeltje (nucleofiel).
2. Het ander mechanisme is dat van 'radikalen', d.w.z. deeltjes die zeer reactief zijn wegens hun ongepaarde elektron maar radikalen hebben verder geen + of - ladingen.

6.2. HOMO en LUMO

Het Engelstalige acroniem HOMO staat voor "Highest Occupied Moleculair Orbital" ofwel "hoogste bezette moleculaire orbitaal". Met deze afkorting geeft men het door elektronen bezette energieniveau aan dat de hoogste energie heeft.

De tegenhanger ervan wordt aangegeven met LUMO dat staat voor "Lowest Unoccupied Moleculair Orbital" ofwel "laagste onbezette moleculaire orbitaal". Dit is het eerstvolgende niveau dat leeg is.

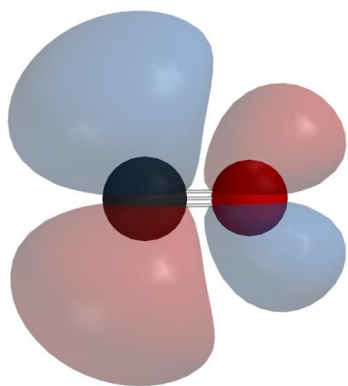
De kloof in energie tussen deze beide niveaus is van groot belang voor de eigenschappen van de molecule. Het bepaalt bijvoorbeeld vaak de kleur van de verbinding. Indien het verschil klein genoeg is, is het mogelijk deze te overbruggen met een foton met een energie die zo klein is dat zichtbaar licht geabsorbeerd wordt. In dat geval zal er een zichtbare kleur zijn.

Vaak is het energieverval zo groot dat alleen hoogenergetische ultraviolette fotonen opgenomen kunnen worden.

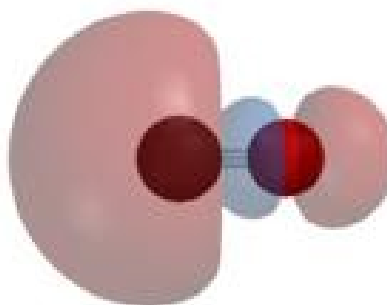
De vorm van de HOMO en LUMO, dat wil zeggen de manier waarop hun elektronendichtheid verdeeld is over de molecule en vooral hoe deze uitsteekt naar buiten toe, is van groot belang voor de wisselwerking die de molecule kan ondergaan met andere atomen en moleculen.

Bijvoorbeeld in koolmonoxide CO is het feit dat zowel de HOMO als de LUMO uitpuilen aan de koolstofkant van de molecule mede verantwoordelijk voor de sterke wisselwerking die deze molecule kan aangaan met atomen van de overgangsmetalen.

Hieronder zie je de afbeelding van de HOMO en LUMO van koolstofmonoxide CO.



De π^* 2p LUMO van CO



De σ 2p HOMO van CO

6.3. De vorming van moleculaire orbitalen

De versmelting van twee atoomorbitalen van naburige atomen levert altijd weer twee nieuwe moleculaire orbitalen op. (Dit is een algemeen verschijnsel: uit oude orbitalen ontstaan altijd evenveel nieuwe orbitalen)

De twee nieuwe orbitalen verschillen daarin dat de ene -de zogenaamde "bindende orbitaal"- géén knoopvlak heeft en de andere - de zogenaamde "antibindende orbitaal" - wél een knoopvlak heeft dat loodrecht op de verbindingsslijn tussen de twee atomen staat en hen scheidt.

De antibindende orbitaal (aangegeven met een asterisk *) heeft in de regel een hogere energie dan de oorspronkelijke atoomorbitalen, de bindende orbitaal heeft dan dus een lagere energie. Een binding ontstaat als er wel elektronen in de bindende orbitaal, maar niet in de antibindende orbitaal geplaatst worden.

De grootste energiewinst treedt op wanneer de bindende orbitaal verder geen knoopvlakken kent en de energie van de twee betrokken atoomorbitalen dicht bij elkaar gelegen is.

De orbitaal heeft dan cilindersymmetrie rond de verbindingsslijn van de twee atomen. Een dergelijke binding heet een σ -binding (sigma-binding).

Er kan ook een knoopvlak zijn dat door de atomen loopt. Dit gebeurt bijvoorbeeld wanneer twee naburige p-orbitalen zijdelings gecombineerd worden. In dat geval is de energiesplitsing tussen bindende en antibindende orbitaal minder groot en de resulterende binding zwakker.

Een dergelijke binding heet een π -binding (pi-binding).

In ons voorbeeld van koolstofmonoxide heeft de $n^*(2p)$ LUMO van CO twee knoopvlakken:

één horizontaal vlak omdat het een orbitaal met π -symmetrie betreft
en één verticaal vlak omdat het een antibindende p^* orbitaal betreft.

Bij een beschrijving van een molecule met moleculaire orbitalen wordt meestal niet aangenomen dat atomaire orbitalen van verschillende symmetrie, zoals s- en p-orbitalen, onderling "versmelten", een proces dat bekend staat als hybridisatie.

Hybridisatie is een concept uit de valentiebindings-theorie, maar dikwijls worden er begrippen uit de VB en de MO theorieën gecombineerd of door elkaar gebruikt.

Diegenen die op deze materie dieper willen ingaan (en die het engels machtig zijn) kunnen volgende werken raadplegen:

Uitgegeven door UNIVERSITY PRESS

Chemical Bonding

Mark J. Winter

ISBN13: 9780198556947

ISBN10: 0198556942 paper

96 pages

Apr 1994

Prijs : ongeveer \$30.00

Description

This short text is intended for first year undergraduates and introduces some concepts of chemical bonding in a clear, descriptive and essentially non-mathematical fashion. The text will find a place alongside textbooks containing more detailed formal coverage and mathematical descriptions. This book could form the basis of an introductory course on chemical bonding. The book addresses aspects of atomic orbital structure and uses this to develop a discussion of the bonding in diatomic and polyatomic molecules using Lewis dot structures, hybrid orbital, and molecular orbital methods. The prediction of molecular shape is addressed through the VSEPR method. It is valuable for students in first-year chemistry courses, as well as non-chemistry students requiring a readable introduction to chemical bonding.

"This book is a great summary and overview on bonding. It presents the different bonding theories in chronological sequence and consequently increasing complexity, from the discovery of sub-atomic particles to MO theory. Great synthesis and review of topic for upperclassmen; good illustrations and introduction for underclassmen."--Dr. Susan Marine, Centre College

In de TUTORIAL reeks uitgegeven door de Royal Society of Chemistry

Structure and Bonding **Jack Barrett (Author)**

ISBN: 978-0-85404-647-8

Copyright: 2001

Paperback

188 pages

Prijs: £15.95

Description

Structure and Bonding covers introductory atomic and molecular theory as given in first and second year undergraduate courses at university level. This book explains in non-mathematical terms where possible, the factors that govern covalent bond formation, the lengths and strengths of bonds and molecular shapes.

Throughout the book, theoretical concepts and experimental evidence are integrated. An introductory chapter summarizes the principles on which the Periodic Table is established, and describes the periodicity of various atomic properties which are relevant to chemical bonding. Symmetry and group theory are introduced to serve as the basis of all molecular orbital treatments of molecules. This basis is then applied to a variety of covalent molecules with discussions of bond lengths and angles and hence molecular shapes. Extensive comparisons of valence bond theory and VSEPR theory with molecular orbital theory are included. Metallic bonding is related to electrical conduction and semi-conduction. The energetics of ionic bond formation and the transition from ionic to covalent bonding is also covered.

Quantum Mechanics for Chemists **David O Hayward (Author)**

ISBN: 978-0-85404-607-2

Copyright: 2002

Format: Paperback

Extent: 192 pages

Price: £15.95

Description

Quantum Mechanics for Chemists is designed to provide chemistry undergraduates with a basic understanding of the principles of quantum mechanics. The text assumes some knowledge of chemical bonding and a familiarity with the qualitative aspects of molecular orbitals in molecules such as butadiene and benzene. Thus it is intended to follow a basic course in organic and/or inorganic chemistry.

The approach is rather different from that adopted in most books on quantum chemistry in that the Schrödinger wave equation is introduced at a fairly late stage, after students have become familiar with the application of de Broglie-type wavefunctions to free particles and particles in a box. Likewise, the Hamiltonian operator and the concept of eigenfunctions and eigenvalues are not introduced until the last two chapters of the book, where approximate solutions to the wave equation for many-electron atoms and molecules are discussed. In this way, students receive a gradual introduction to the basic concepts of quantum mechanics.