

Elektronegativität

Elektronegativität (Abkürzung **EN**; Formelzeichen χ (griechisch **Chi**)) ist ein relatives Maß für die Fähigkeit von **Atomen**, in **chemischen Bindungen** die bindenden **Elektronenpaare** an sich zu ziehen.^[1] Die Elektronegativität wird von der jeweiligen **Kernladung** und dem **Atomradius** bestimmt und kann zur Abschätzung der **Polarität** und des Ionenbindungscharakters einer Bindung zwischen zwei Atomen genutzt werden: Je höher der Unterschied der Elektronegativitäten der gebundenen Elemente ist, desto **polarer** ist die Bindung.

Atome mit hoher Elektronegativität bezeichnet man auch als *elektronegativ*, und Atome mit geringer Elektronegativität als *elektropositiv*. Die Elektronegativität eines Atoms in einem Molekül bzw. in einem Anion ist abhängig von der **Ionisierungsenergie** bzw. von der **Elektronenaffinität** und ist umso größer, je weniger Elektronen auf der Außenschale zur **Edelgaskonfiguration** fehlen, weil die „Lücken“ bestrebt sind aufgefüllt zu werden. Daher nimmt die Elektronegativität in der Regel innerhalb einer **Elementperiode** von links nach rechts zu, da die **Kernladungszahl** höher wird. Innerhalb einer **Elementgruppe** nimmt die Elektronegativität von oben nach unten ab, hauptsächlich weil der Abstand zum Kern größer wird und damit die Anziehungskraft des Kerns auf die Bindungselektronen abnimmt.

Nichtmetalle sind stärker elektronegativ als Metalle, nehmen bevorzugt Elektronen auf und haben deshalb höhere Werte der Elektronegativität als Metalle, die nur schwach elektronegativ sind und bevorzugt Elektronen abgeben. Die Annahme, dass Edelgase keine Elektronegativität zeigen, weil sie sich in einem sehr stabilen Zustand befinden und weil Werte für Elektronegativitäten von Edelgasen in den Tabellen der zitierten Lehrbücher^[2] und ^[3] fehlen, ist nicht zutreffend. Nachdem auch von **Edelgasen** chemische Verbindungen hergestellt worden waren, konnten auch z. B. für **Xenon** und **Krypton** Werte für die Elektronegativitäten der Pauling-Skala berechnet werden, die in etwa den Werten der Halogene entsprechen. Mit neueren Methoden konnten auch für die Elektronegativitätsskalen nach Mulliken und Rochow Zahlenwerte für die übrigen Edelgase berechnet werden, die höher sind als die der Halogene. Bei Helium betragen sie beispielsweise 5,50 nach Allred-Rochow und 4,86 nach Mullikan.^[4]

Inhaltsverzeichnis

Bestimmungen und Genauigkeit

Anwendungen

Einteilungssysteme

Allred-Rochow-Skala

Mulliken-Skala

Pauling-Skala

Andere Elektronegativitäts-Skalen

Fußnoten und Einzelnachweise

Literatur

Weblinks

Bestimmungen und Genauigkeit

Es existieren verschiedene Methoden zur Berechnung der EN. Dabei ist die Hauptschwierigkeit, dass sich die EN auf das Verhalten eines bestimmten Atoms in einem Atomverband mit **Einfachbindungen** bezieht und nicht auf einzelne, isolierte Atome im Gaszustand, wie es bei der Ionisierungsenergie und der Elektronenaffinität der Fall ist. Die Elektronegativität ist damit abhängig von Art und Anzahl der mit dem betreffenden Atom verbundenen Atome und es ist möglich, dass z. B. ein Chlor-Atom in der Verbindung **Phosphortrichlorid**, in der drei Cl-Atome als Liganden an ein P-Atom gebunden sind, eine andere Elektronegativität hat als ein Chlor-Atom im Anion **Chlorat**, in dem das Cl-Atom von drei O-Atomen als Liganden umgeben ist. Zusätzlich können sich bei Berechnungen von Werten für Elektronegativitäten und bei numerischen Angaben von Werten ohne **Einheiten** die Berechnungsverfahren außer auf Ionisierungsenergie und Elektronegativität auch noch auf weitere verschiedene Eigenschaften der Moleküle stützen. Das hat dazu geführt, dass es drei Skalen (Rochow-Skala, Mulliken-Skala, Pauling-Skala) für berechnete Elektronegativitäten gibt mit jeweils leicht unterschiedlichen **Werten** für die nach verschiedenen Methoden berechneten Elektronegativitäten.^[2]

Trotz der genannten Schwierigkeiten und der darauf beruhenden Einschränkungen und Unsicherheiten bleibt das Konzept der *Elektronegativität* nützlich, wenn man den nach verschiedenen Methoden berechneten Werten nicht zu viel Gewicht beimisst.^[3]

Anwendungen

Die Werte der Elektronegativitäten können genutzt werden, um abzuschätzen, ob eine vorgegebene Atombindung **polar** oder **unpolar** kovalent ist oder ob es sich um eine **ionische Bindung** handelt. So ergeben sich z. B. für die drei folgenden Verbindungen des Fluors **F₂**, **HF** und **LiF** die folgenden Differenzen der Elektronegativität:

- für elementares **Fluor** **F₂** : Differenz 4,0–4,0 = 0, unpolar kovalente Bindung, denn die Bindungselektronen sind gleichmäßig zwischen den beiden Fluoratomen verteilt.
- für Fluorwasserstoff **HF** : Differenz 4,0–2,1 = 1,9, polar kovalente Bindung, denn die Bindungselektronen sind ungleichmäßig zu Gunsten des Fluoratoms verteilt. Das führt auch dazu, dass das Molekül HF den Charakter eines **Dipols** und damit auch ein **Dipolmoment** hat, dessen Größe die physikalischen Eigenschaften des Moleküls stark beeinflusst.
- für **Lithiumfluorid** **LiF** : Differenz 4,0–1,0 = 3,0, ionische Bindung, denn der im Beispiel größte Wert für die Differenz der Elektronegativitäten zeigt an, dass die Bindungselektronen stark ungleichmäßig zu Gunsten des Fluoratoms verteilt sind.^[2]

Durch Berechnung der **Elektronegativitätsdifferenz** zwischen möglichen Reaktionspartnern lassen sich auch unter Zuhilfenahme von Faustregeln Aussagen zur Heftigkeit aktivierter Reaktionen und zur chemischen Bindung in den dabei entstehenden Stoffen treffen.

Aus der Bindungsart ergibt sich außerdem, ob eine chemische Verbindung in Wasser löslich ist (hydrophil) oder in Fett (lipophil, dann fast immer auch hydrophob).

Einteilungssysteme

Das Elektronegativitätsmodell wurde 1932 durch Linus Pauling eingeführt und später mehrmals verfeinert. Heute finden neben der Pauling-Skala auch die Skalen von Allred-Rochow und Mulliken Verwendung.

Diese ist besonders wichtig und relevant.

Allred-Rochow-Skala

Die Elektronegativität nach der Theorie Albert L. Allred und Eugene G. Rochow (1958)^[5] wird oft auch mit χ_{AR} oder χ_{AR} bezeichnet.

Die Skala beruht auf der Überlegung, dass die Elektronegativität proportional zur elektrostatischen Anziehungskraft F ist, die die Kernladung Z auf die Bindungselektronen (von inneren Elektronen abgeschirmt) ausübt:

$$F \sim \frac{e^2 \cdot Z_{\text{eff}}}{r^2}$$

wobei r der Atomradius, e die Elementarladung und Z_{eff} die effektive Kernladungszahl ist.

Allred-Rochow-Werte der Elektronegativität im Periodensystem der Elemente																
IUPAC-Gruppe	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Periode																
1	H 2,20															
2	Li 0,97	Be 1,47											B 2,01	C 2,50	N 3,07	O 3,50
3	Na 1,01	Mg 1,23											Al 1,47	Si 1,74	P 2,06	S 2,44
4	K 0,91	Ca 1,04	Sc 1,20	Ti 1,32	V 1,45	Cr 1,56	Mn 1,60	Fe 1,64	Co 1,70	Ni 1,75	Cu 1,75	Zn 1,66	Ga 1,82	Ge 2,02	As 2,20	Se 2,48
5	Rb 0,89	Sr 0,99	Y 1,11	Zr 1,22	Nb 1,23	Mo 1,30	Tc 1,36	Ru 1,42	Rh 1,45	Pd 1,30	Ag 1,42	Cd 1,46	In 1,49	Sn 1,72	Sb 1,82	Te 2,01
6	Cs 0,86	Ba 0,97	La 1,10	Hf 1,23	Ta 1,33	W 1,40	Re 1,46	Os 1,52	Ir 1,55	Pt 1,44	Au 1,42	Hg 1,44	Tl 1,44	Pb 1,55	Bi 1,67	Po 1,76
7	Fr 0,86	Ra 0,97	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv

Mulliken-Skala

In der Mulliken-Skala (1934 von Robert S. Mulliken vorgeschlagen) wird die Elektronegativität als Mittelwert aus der Ionisierungsenergie E_I und der Elektronenaffinität E_{ea} (*electron affinity*) berechnet:^[6]

$$\chi_M = \frac{E_{ea} + E_I}{2}$$

Diese Energie wird in Elektronenvolt angegeben.^{[1][6]}

Mit folgender Formel kann die Mulliken-Skala recht gut an die Pauling-Skala angepasst werden:^[6]

$$\chi_P = 1,35 \chi_M^{1/2} - 1,37$$

Es sind auch andere Umrechnungsformeln in Gebrauch, wie zum Beispiel die lineare Formel:^{[7][8]}

$$\chi_P = 0,336 (\chi_M - 0,615)$$

Pauling-Skala

Das Pauling-Modell beruht auf der Elektronegativitätsdifferenz zweier Atome A und B als Maß für den ionischen Anteil ihrer Bindung A-B.^[1] Sie setzt die Kenntnis der experimentell ermittelten Bindungsdissoziationsenergien der Moleküle A-B, A₂ und B₂ voraus.

Die Elektronegativitätsdifferenz zweier Atome A und B ergibt sich gemäß:

$$D_{AB} - \sqrt{D_{AA}D_{BB}} = 96,48 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} (\chi_A - \chi_B)^2$$

Zur Berechnung der dimensionslosen Elektronegativitätswerte der chemischen Elemente aus der Differenz wurde für Fluor der Wert $\chi_F = 3,98$ als Referenzpunkt festgelegt.

In der Literatur finden sich oft unterschiedliche Werte für die EN nach Pauling, was auf folgende Gründe zurückzuführen ist:

1. Die Bindungsdissoziationsenergien sind für manche Elemente bzw. Verbindungen experimentell schwer zugänglich.

- Früher verwendete Referenzwerte waren $\chi_F = 4,00$ und $\chi_H = 2,10$.
- Statt des geometrischen Mittels $\sqrt{D_{AA}D_{BB}}$ wurde früher auch das arithmetische Mittel $\frac{D_{AA}+D_{BB}}{2}$ verwendet.
- Schließlich finden sich in der Literatur unterschiedliche Werte für den Proportionalitätsfaktor.

Pauling-Werte der Elektronegativität im Periodensystem der Elemente^[9]

IUPAC-Gruppe	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
Periode																	
1	H 2,2																
2	Li 0,98	Be 1,57											B 2,04	C 2,55	N 3,04	O 3,44	F 3,98
3	Na 0,93	Mg 1,31											Al 1,61	Si 1,9	P 2,19	S 2,58	Cl 3,16
4	K 0,82	Ca 1	Sc 1,36	Ti 1,54	V 1,63	Cr 1,66	Mn 1,55	Fe 1,83	Co 1,88	Ni 1,91	Cu 1,9	Zn 1,65	Ga 1,81	Ge 2,01	As 2,18	Se 2,55	Br 2,96
5	Rb 0,82	Sr 0,95	Y 1,22	Zr 1,33	Nb 1,6	Mo 2,16	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,28	Pd 2,2	Ag 1,93	Cd 1,69	In 1,78	Sn 1,96	Sb 2,05	Te 2,1	I 2,66
6	Cs 0,79	Ba 0,89	La* 1,1	Hf 1,3	Ta 1,5	W 2,36	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9	Tl 1,8	Pb 1,8	Bi 1,9	Po 2	At 2,2
7	Fr 0,7	Ra 0,9	Ac** 1,1	Rf —	Db —	Sg —	Bh —	Hs —	Mt —	Ds —	Rg —	Cn —	Nh —	Fl —	Mc —	Lv —	Ts —
Lanthanoide	*	La 1,1	Ce 1,12	Pr 1,13	Nd 1,14	Pm 1,1 ^[13]	Sm 1,17	Eu 1,2 ^[13]	Gd 1,2	Tb 1,1 ^[13]	Dy 1,22	Ho 1,23	Er 1,24	Tm 1,25	Yb 1,1 ^[13]	Lu 1,27 ^[13]	
Actinoide	**	Ac 1,1	Th 1,3	Pa 1,5	U 1,38	Np 1,3	Pu 1,28 ^[13]	Am 1,13 ^[13]	Cm 1,28 ^[13]	Bk 1,3 ^[13]	Cf 1,3 ^[13]	Es 1,3 ^[13]	Fm 1,3 ^[13]	Md 1,3 ^[13]	No 1,3 ^[13]	Lr 1,3 ^[13]	

Andere Elektronegativitäts-Skalen

Nach Leland C. Allen wird die Elektronegativität aus dem Energiezustand der Valenzelektronen berechnet, was eine spektroskopische Bestimmung erlaubt. R. T. Sanderson führt die Elektronegativität wie Allred und Rochow auf die effektive Kernladung zurück.

Fußnoten und Einzelnachweise

- Eintrag zu *electronegativity*. In: IUPAC (Hrsg.): *Compendium of Chemical Terminology*. The "Gold Book". doi:10.1351/goldbook.E01990 (<https://doi.org/10.1351/goldbook.E01990>) – Version: 2.1.5.
- Theodore L. Brown, H. Eugene LeMay, Bruce E. Bursten: *Chemie. Die zentrale Wissenschaft*. Pearson Studium, 2007, ISBN 978-3-8273-7191-1, S. 364–368.
- Theodore L. Brown, H. Eugene LeMay, Chemie. Ein Lehrbuch für alle Naturwissenschaftler| VCH VerlagsgesellschaftD6940 Weinheim, 1988, ISBN 3-527-26241-5, S. 199
- L. C. Allen, J. E. Huheey: *The definition of electronegativity and the chemistry of the noble gases*. In: *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*. 1980, 42, S. 1523–1524, doi:10.1016/0022-1902(80)80132-1 (<https://doi.org/10.1016/0022-1902%2880%2980132-1>).
- A. L. Allred, E. G. Rochow: *A scale of electronegativity based on electrostatic force*. In: *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*. 5, 1958, S. 264, doi:10.1016/0022-1902(58)80003-2.
- Peter W. Atkins und Julio de Paula: *Physikalische Chemie*. 5. Auflage. Wiley-VCH-Verl, Weinheim 2013, ISBN 978-3-527-33247-2, S. 410.
- Steven G. Bratsch.: *Revised Mulliken Electronegativities*. In: *Journal of chemical education*. 65. Auflage. Nr. 1, 1988, S. 38.
- Mitunter werden auch andere numerische Parameter in der Umrechnungsformel verwendet (ebenda).
- David R. Lide (Hrsg.): *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 90. Auflage. (Internet-Version: 2010), CRC Press / Taylor and Francis, Boca Raton FL, *Molecular Structure and Spectroscopy*, S. 9-98.
- Für die Pauling-Skala nicht bestimmt, vgl.
L. C. Allen, J. E. Huheey: *The definition of electronegativity and the chemistry of the noble gases*. In: *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*. Band 42, 1980, S. 1523–1524, doi:10.1016/0022-1902(80)80132-1 (<https://doi.org/10.1016/0022-1902%2880%2980132-1>).
T. L. Meek: *Electronegativities of the Noble Gases*. In: *Journal of chemical education*. Band 72, Nr. 1, 1995, S. 17–18.
- L. C. Allen, J. E. Huheey: *The definition of electronegativity and the chemistry of the noble gases*. In: *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*. Band 42, 1980, S. 1523–1524, doi:10.1016/0022-1902(80)80132-1 (<https://doi.org/10.1016/0022-1902%2880%2980132-1>).
- T. L. Meek: *Electronegativities of the Noble Gases*. In: *Journal of chemical education*. Band 72, Nr. 1, 1995, S. 17–18.
- Elektronegativität (Tabellarische Übersicht)*. (http://www.unitererra.de/rutherford/tab_en.htm) unitererra.de, abgerufen am 18. Juli 2012.

Literatur

Bücher


- Linus Pauling: *The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals*. Mei Ya Publications Taipei, 1960.
- Hans Rudolf Christen, Gerd Meyer: *Grundlagen der allgemeinen und anorganischen Chemie*. Sauerländer, Frankfurt am Main 1997. ISBN 3-7941-3984-4.

Zeitschriftenaufsätze

- Robert S. Mulliken: *A New Electroaffinity Scale; Together with Data on Valence States and on Valence Ionization Potentials and Electron Affinities*. In: *The Journal of Chemical Physics*. Band 2, Nr. 11, 1934, S. 782–793, doi:10.1063/1.1749394 (<https://doi.org/10.1063/1.1749394>).
- A. L. Allred: *Electronegativity values from thermochemical data*. In: *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*. Band 17, Nr. 3–4, Mai 1961, S. 215–221, doi:10.1016/0022-1902(61)80142-5 (<https://doi.org/10.1016/0022-1902%2861%2980142-5>).

- A. L. Allred, E. G. Rochow: *A scale of electronegativity based on electrostatic force*. In: *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*. Band 5, Nr. 4, 1958, S. 264–268, doi:10.1016/0022-1902(58)80003-2 (<https://doi.org/10.1016/0022-1902%2858%2980003-2>).
- William B. Jensen: *Electronegativity from Avogadro to Pauling*, 2 Teile, *Journal of Chemical Education*, Band 73, 1996, S. 11–20, Band 80, 2003, S. 279–287
- S. G. Bratsch: *Revised Mulliken Electronegativities*. In: *Journal of Chemical Education*. Band 65, Nr. 1, 1988, S. 34–41.
- R. T. Sanderson: *Chemical principles revisited: Principles of electronegativity – Part I. General nature*. In: *Journal of Chemical Education*. Band 65, Nr. 2, 1988, S. 112–118.
- R. T. Sanderson: *Chemical principles revisited: Principles of electronegativity – Part II. Applications*. In: *Journal of Chemical Education*. Band 65, Nr. 3, 1988, S. 227–231.
- L. C. Allen: *Electronegativity is the average one-electron energy of the valence-shell electrons in ground-state free atoms*. In: *Journal of the American Chemical Society*. Band 111, Nr. 25, 1989, S. 9003–9014, doi:10.1021/ja00207a003 (<https://doi.org/10.1021/ja00207a003>).

Weblinks

 **Wiktionary: Elektronegativität** – Bedeutungserklärungen, Wortherkunft, Synonyme, Übersetzungen

- Elektronegativitäten (EN) (http://www.cci.ethz.ch/vorlesung/de/ac1/ac1_node26.html) auf *The Creative Chemistry on the Internet*
 - ChemGlobe – Elektronegativität (<http://www.chemglobe.org/general/chembindung/en.php>)
 - Elektronegativität bei UNI TERRA (https://web.archive.org/web/20160306050327/http://www.unitertra.de/rutherford/tab_en.htm) (web archive)
-

Abgerufen von „<https://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Elektronegativität&oldid=229510678>“

Diese Seite wurde zuletzt am 5. Januar 2023 um 12:59 Uhr bearbeitet.

Der Text ist unter der Lizenz „Creative-Commons Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen“ verfügbar; Informationen zu den Urhebern und zum Lizenzstatus eingebundener Mediendateien (etwa Bilder oder Videos) können im Regelfall durch Anklicken dieser abgerufen werden. Möglicherweise unterliegen die Inhalte jeweils zusätzlichen Bedingungen. Durch die Nutzung dieser Website erklären Sie sich mit den Nutzungsbedingungen und der Datenschutzrichtlinie einverstanden. Wikipedia® ist eine eingetragene Marke der Wikimedia Foundation Inc.