

# Molekülgeometrie und VSEPR-Theorie

## Lernziele

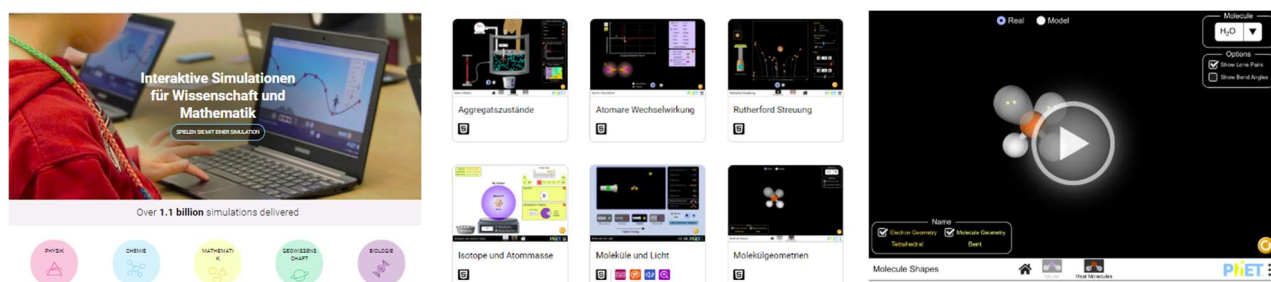
- Sie sind mit den typischen Winkeln und den zugehörigen Bezeichnungen für die Molekülgeometrie vertraut
- Sie sind in der Lage sein, die Geometrie und Bindungswinkel um ein Zentralatom auf der Grundlage des Prinzips der Abstoßung von Elektronenpaaren / Elektronendomänen vorherzusagen.
- Sie kennen weitere Faktoren, welche die Geometrie eines Moleküls beeinflussen

In grober Näherung kann die Geometrie um ein Atom herum bestimmt werden, indem man die Anzahl der bindenden und nichtbindenden Elektronenpaare an dem betreffenden Atom betrachtet. Vorhersagen über die Molekülform beruhen auf der Valenzschalen-Elektronenpaar-Abstoßungstheorie (VSEPR). Wie der Name schon sagt, beruht diese Theorie auf der einfachen Vorstellung, dass sich Elektronenpaare, die sich in derselben Valenzschale befinden und dieselbe Ladung tragen, gegenseitig abstoßen und sich daher so weit wie möglich voneinander entfernen.

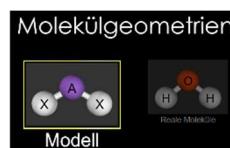
Allerdings ist der Begriff VSEPR, der sich offensichtlich auf Elektronenpaare bezieht, eigentlich eine zu starke Vereinfachung: Moleküle enthalten häufig mehrere Paare gemeinsamer Elektronen, die sich in Bezug auf die Abstoßung wie eine Einheit verhalten, weil sie gemeinsam ausgerichtet sind. Ein besserer Begriff als Elektronenpaar ist daher Elektronenbereich beziehungsweise Elektronendomänen. Dieser umfasst alle Elektronenplätze in der Valenzschale, unabhängig davon, ob sie von einsamen Paaren, einfach, doppelt oder dreifach gebundenen Paaren besetzt sind. Entscheidend für die Form ist die Gesamtzahl der Elektronendomänen also der Raumbereiche, in welchen sich Elektronen befinden.

Untersuchen Sie nun zuerst die verschiedenen Geometrien, die um ein Zentralatom herum auftreten können: Öffnen Sie die folgende Webseite: <https://phet.colorado.edu/de> wählen Sie dann **Chemie** aus und dann von den zur Verfügung stehenden Simulationen **Molekülgeometrien** und starten Sie die Simulation, indem Sie auf den Play-Button drücken.

Direkter Pfad: <https://phet.colorado.edu/de/simulations/molecule-shapes>



Betrachten Sie zunächst fiktive Modellmoleküle des Typs **AX<sub>n</sub>**: Kombinieren Sie in der Simulation die verschiedenen Bindungstypen beziehungsweise Anzahl freier Elektronenpaare mit dem Zentralatom A und notieren Sie sowohl die Winkel als auch die Namen für die Geometrie um das Zentralatom.



Beachten Sie, dass im Rahmen dieser Übung die Gesamtzahl der Elektronen am Zentralatom acht Elektronen nicht überschreiten sollte (Einhaltung der Oktett-Regel).

eine Einfachbindung trägt 2 Elektronen bei = (1 Domäne)

eine Doppelbindung steuert 4 Elektronen bei = (1 Domäne)

eine Dreifachbindung steuert 6 Elektronen bei = (1 Domäne)

ein nichtbindendes Elektronenpaar steuert 2 Elektronen bei = (1 Domäne)



Model

Bezeichnung

☒ Elektronengeometrie  
trigonal planar

☒ Molekülgeometrie  
gewinkelt

Optionen

☒ Nichtbindende Elektronenpaare anzeigen

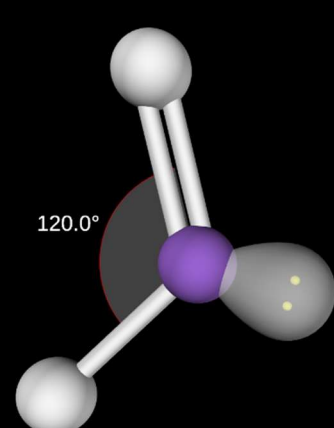
☒ Bindungswinkel anzeigen

Um das Molekül mit einer Formel zu beschreiben, wird im Rahmen dieses Arbeitsblatts das Zentralatom mit A, eine Einfachbindung mit E, eine Doppelbindung mit D, eine Dreifachbindung mit T und das nichtbindende Elektronenpaar mit N abgekürzt. Das Molekül  $AE_2D$  wäre folglich ein Molekül, in dem das Zentralatom zwei Einfachbindungen und eine Doppelbindung hat.

Zur Erinnerung (ein häufiger Fehler in Prüfungen): Ein Bindungswinkel kann nur angegeben werden, wenn drei Atome beteiligt sind! Der Bindungswinkel bezieht sich hierbei immer auf das in der Mitte befindliche Atom.

### Beispiel:

Es soll die Geometrie eines Moleküls mit der Summenformel  $AX_2$  untersucht werden, welches eine Einfachbindung (E), eine Doppelbindung (D) und ein nichtbindendes Elektronenpaar (N) besitzt. Gemäss den zuvor definierten Regeln wird dieses Molekül mit der Formel  $AEDN$  beschrieben. Die **Molekülgeometrie** in der Animation beschreibt die räumliche Anordnung der Atome X am Zentralatom A, die **Elektronengeometrie** die räumliche Anordnung der Elektronenpaare am Zentralatom A. Im letzteren Fall werden also auch die nichtbindenden Elektronenpaare berücksichtigt.



120.0°

Bindungen

☒

☒

☒

Nichtbindendes Elektronenpaar

☒

Alle entfernen

Optionen


☒ Nichtbindende Elektronenpaare anzeigen

☒ Bindungswinkel anzeigen

Bezeichnung

☒ Elektronengeometrie  
trigonal planar

☒ Molekülgeometrie  
gewinkelt



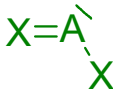
In diesem Molekül gibt es **3** Raumbereiche, welche von Elektronen in Anspruch genommen werden, nämlich die Einfachbindung ( $2e^-$ ), die Doppelbindung ( $4e^-$ ) und das nichtbindende Elektronenpaar ( $2e^-$ ). Diese drei Bereiche sind aufgrund der Elektronenabstossung maximal voneinander entfernt, woraus sich ein Bindungswinkel von **120°** ergibt. Die Anordnung der drei Atome bezeichnet man als **gewinkelt**, nimmt man das freie Elektronenpaar hinzu, so ist die Geometrie **trigonal planar**.

Die Lewis-Formel sollte so gezeichnet werden, dass die dargestellte Struktur der realen Geometrie möglichst nahekommt; die an A gebundenen Atome werden mit dem Symbol X wiedergegeben.

Molekül	Anzahl $e^-$ Domänen	Winkel	Molekül-Geometrie	Elektronen-Geometrie	Valenzstrichformel
EDN	3	120°	gewinkelt	trigonal planar	$  \begin{array}{c}  X=A \\  \diagdown \quad \diagup \\  \quad X  \end{array}  $

## Aufgabe 1

- Ergänzen Sie die folgende Tabelle mit den Winkeln und Bezeichnungen für die sechs weiteren Moleküle, indem Sie diese jeweils in der Simulation entsprechend den Angaben zusammensetzen.
- Zeichnen Sie die vollständige Valenzstrichformel des jeweiligen Moleküls. Das Zentralatom wird mit dem Atomsymbol A, die daran gebundenen Atome mit dem Atomsymbol X abgekürzt.
- Rotieren Sie dann auch das Molekül mit gedrückter Cursor-Taste, so dass Sie einen besseren Eindruck von der dreidimensionalen Struktur des Moleküls bekommen.

Molekül	Anzahl e <sup>-</sup> Domänen	Winkel	Molekül-Geometrie	Elektronen-Geometrie	Valenzstrichformel
AEDN	3	120°	gewinkelt	trigonal planar	
AE <sub>2</sub> D					
AE <sub>3</sub> N					
AE <sub>2</sub> N <sub>2</sub>					
AE <sub>4</sub>					
AD <sub>2</sub>					
AET					

## Aufgabe 2a

Als nächstes sollen Sie die Geometrie von vier realen Molekülen untersuchen. Wechseln Sie hierzu in der Simulation ins Fenster **Reale Moleküle**.

- Zeichnen Sie zuerst die vollständige (also mit allen nichtbindenden Elektronenpaaren) Lewisformel der vier vorgegebenen Moleküle.
- Ermitteln Sie die Anzahl vorhandener Elektronendomänen am zentralen Atom und leiten Sie sowohl den erwarteten Bindungswinkel als auch den Begriff für die Molekülgeometrie (gemäss **Aufgabe 1**) ab.
- Erst nachdem Sie die Vorhersagen zu den jeweiligen Molekülen gemacht haben, sollen Sie diese überprüfen: Wählen Sie hierfür das entsprechende Molekül in der Simulation aus und bestimmen Sie den realen Winkel



Reale Moleküle

Bezeichnung

☒ Elektronengeometrie tetraedisch

☒ Molekülgeometrie gewinkelt

Optionen

☒ Nichtbindende Elektronenpaare anzeigen

☒ Bindungswinkel anzeigen

Molekül

Molekül	Valenzstrichformel	Anzahl e <sup>-</sup> Domänen	erwarteter Bindungswinkel	Bezeichnung Molekül-Geometrie	realer Bindungswinkel
CH <sub>4</sub>					
NH <sub>3</sub>					
H <sub>2</sub> O					
CO <sub>2</sub>					

Untersuchen Sie die Ergebnisse der obigen Tabelle: In welchen Fällen kommt es zu einer Abweichung zwischen dem erwarteten und dem realen Bindungswinkel? Was haben diese Moleküle gemeinsam?

In den Fällen, bei denen es eine Abweichung gibt, ist der reale Winkel immer kleiner als der erwartete Winkel ... was kann man daraus schliessen?

Zur Vertiefung können Sie nun das erlernte Konzept noch auf eine Reihe weiterer einfacher Moleküle anwenden. Allerdings müssen Sie hier Ihre Ergebnisse mit Hilfe einer anderen Website überprüfen.

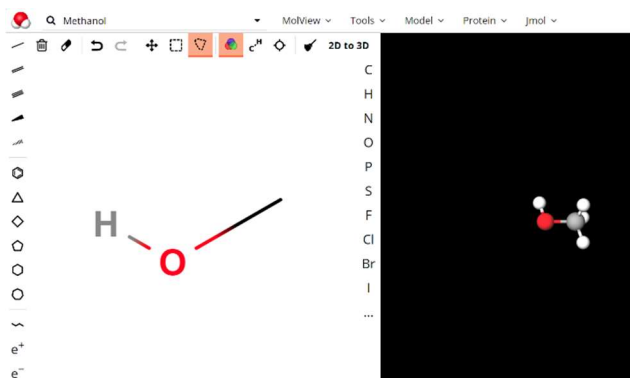
## Aufgabe 2b

Zeichnen Sie zuerst die vollständige (also mit allen nichtbindenden Elektronenpaaren) Valenzstrichformel der fünf vorgegebenen Moleküle. Ermitteln Sie die Anzahl vorhandener Elektronendomänen am zentralen (unterstrichenen) Atom und geben Sie den Begriff für die Molekülgeometrie an.

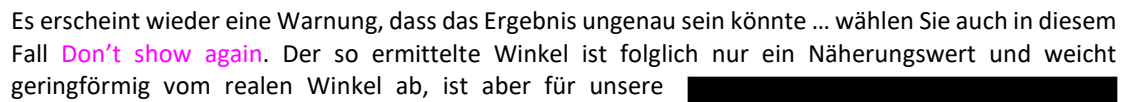
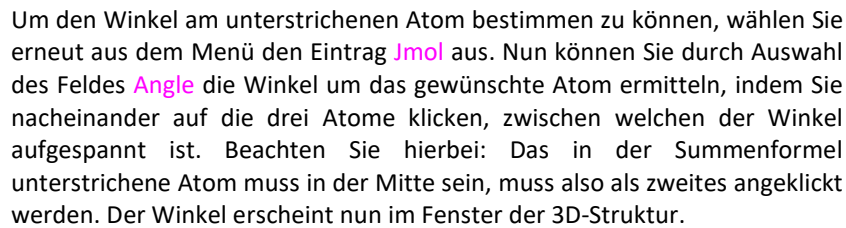
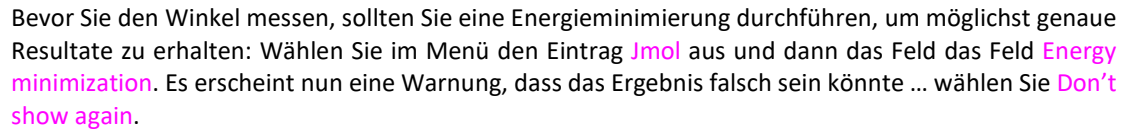
Geben Sie nun den erwarteten Bindungswinkel ohne und mit Effekt des nichtbindenden Elektronenpaars an. Falls ein solcher Effekt vorliegt, reicht die Angabe, dass der Winkel kleiner sein wird, als gemäss Anzahl Elektronendomänen erwartet, also z.B.  $<120^\circ$ .

Molekül	Valenzstrichformel	Bezeichnung Molekül-Geometrie	erwarteter Winkel	gemessener Winkel
<u>H</u> CN hydrogen cyanide				
<u>H</u> NO Nitroxyl				
<u>C</u> H <sub>2</sub> O Methanal				
<u>C</u> <sub>2</sub> H <sub>2</sub> Ethyne				
<u>C</u> <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Ethene				

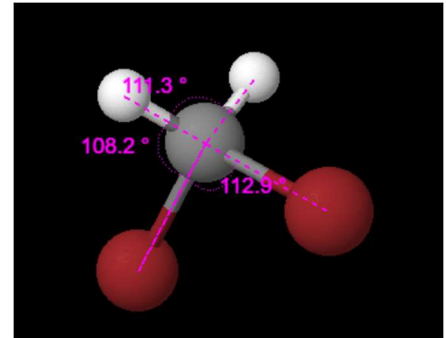
Kontrollieren Sie nun Ihre Lösungen, indem Sie die Website <https://molview.org> öffnen



Geben Sie im Fenster oben links den Englischen Substanznamen (blauer Name in der Tabelle) ein und drücken Sie **Enter** - im rechten Fenster ist nun die 3D-Struktur des Moleküls zu sehen (im Beispiel das Molekül Methanol).



Je nach Molekül (zum Beispiel bei  $\text{C}_2\text{H}_4$ ) können zwei Winkel am unterstrichenen Atom ermittelt werden, je nachdem, welche Atome in der 1. und 3. Position ausgewählt werden. Die geringfügigen Abweichungen vom erwarteten Bindungswinkel sind die Folge der unterschiedlichen Grössen der an das Zentralatom gebundenen Atome. Ein Beispiel, anhand dessen sich dieser Effekt zeigen lässt, ist das Molekül Dibrommethan  $\text{C}_2\text{H}_2\text{Br}_2$ : Die grossen Bromatome benötigen mehr Platz, was zu einer deutlichen Aufweitung des Tetraederwinkels führt.



Von welchen drei Faktoren hängt der Bindungswinkel ab?