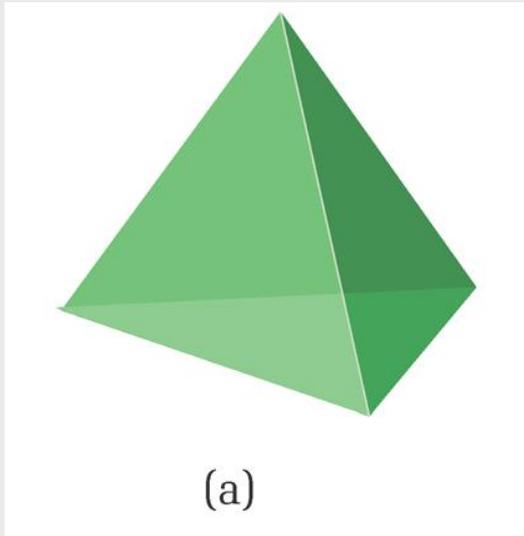
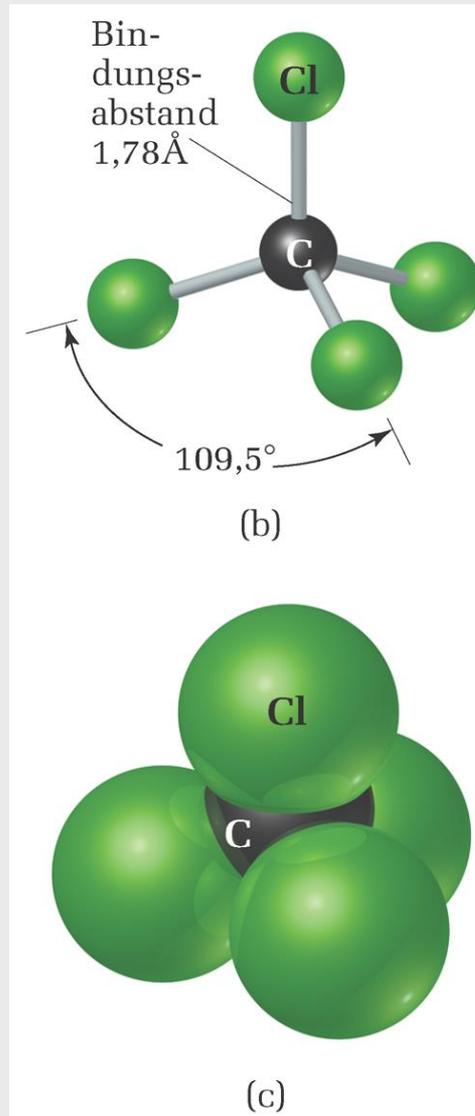


Darstellungsarten von Molekülstruktur



Polyeder

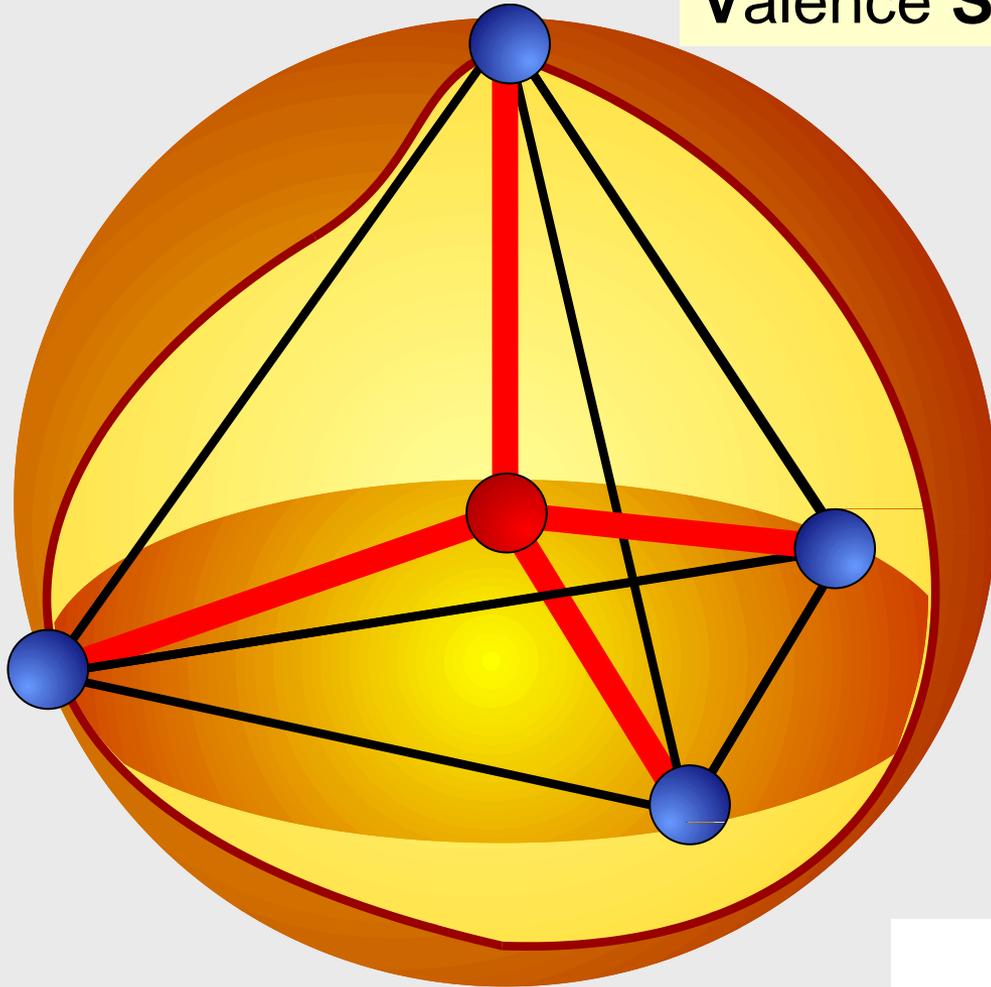


Kugel-
Stab-Modell

Kalotten-
Modell
(Kugelkappen)

VSEPR-Methode

Valence **S**hell **E**lectron **P**air **R**epulsion



Valenzelektronenpaar-
Abstoßungs-Modell

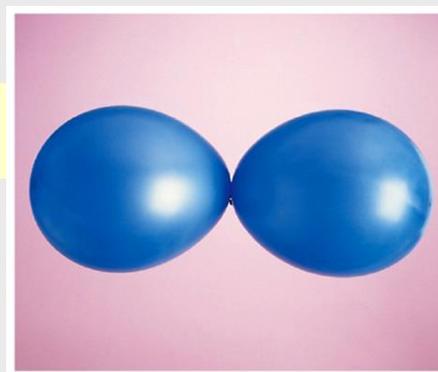
Gillespie-Nyholm-
Methode



Ronald J. Gillespie (*1924) und
Sir Ronald Sydney Nyholm (1917-1971) –
die „Väter“ der VSEPR-²Theorie

VSEPR-Methode

- Freie und bindende Elektronenpaare ordnen sich so um ein Zentralatom an, dass die gegenseitigen abstoßenden Wechselwirkungen minimiert werden
- Die Abstoßung zwischen zwei freien Elektronenpaaren ist größer als zwischen einem freien und einem bindenden Elektronenpaar
- Die Abstoßung zwischen einem freien und einem bindenden Elektronenpaar ist größer als die zwischen zwei bindenden Elektronenpaaren
- Die Abstoßung zwischen bindenden Elektronenpaaren ist am geringsten
- Mehrfachbindungen werden wie Einfachbindungen behandelt



(a) Zwei Ballons nehmen eine lineare Anordnung ein.

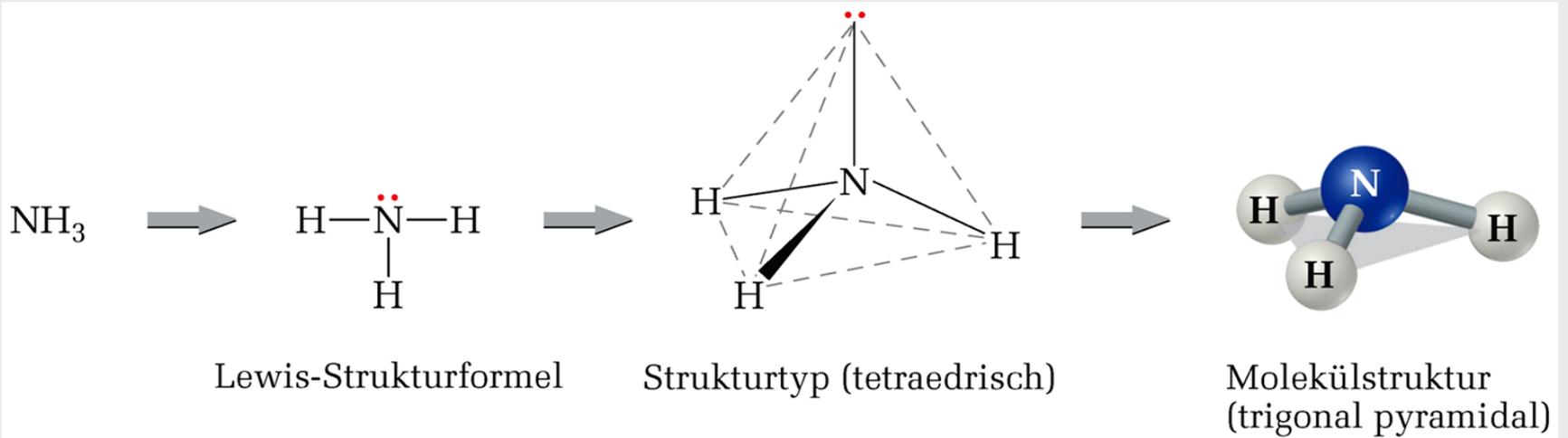


(b) Drei Ballons nehmen eine trigonale ebene Anordnung ein.

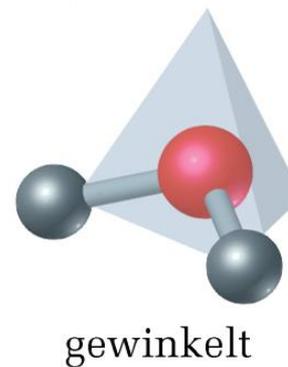
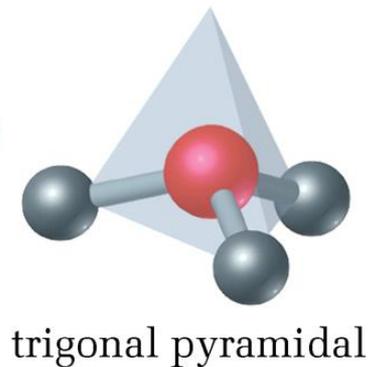
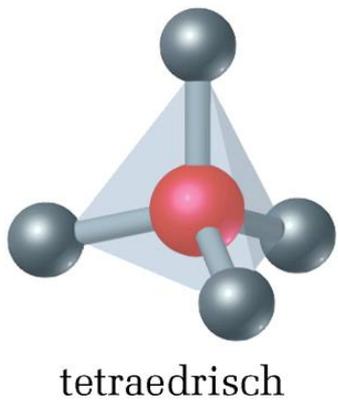
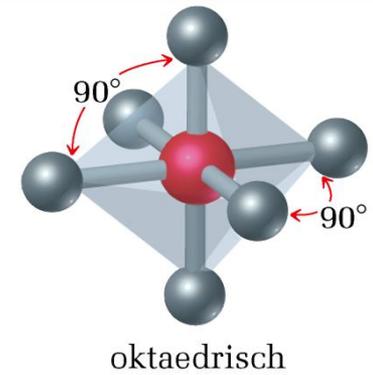
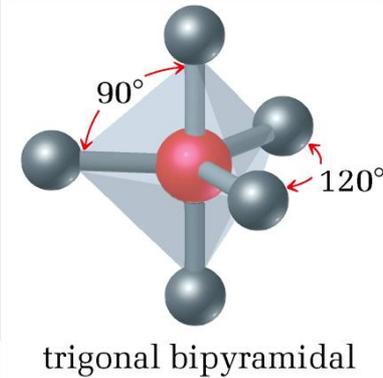
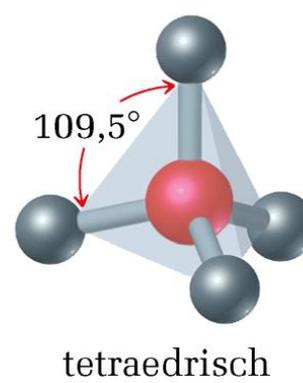
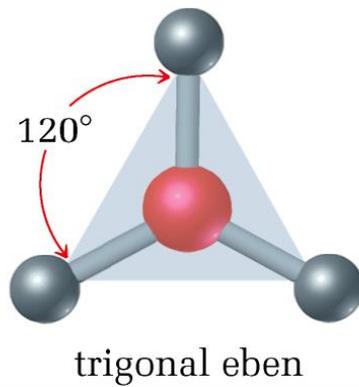
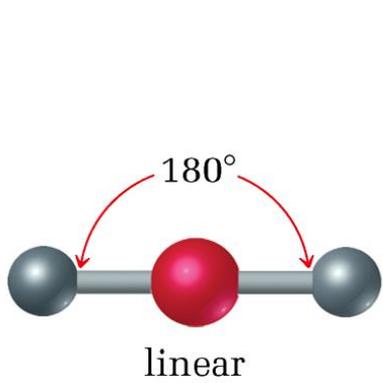


(c) Vier Ballons nehmen eine tetraedrische Anordnung ein.

VSEPR-Methode



VSEPR-Methode: Polyeder / freie Elektronenpaare



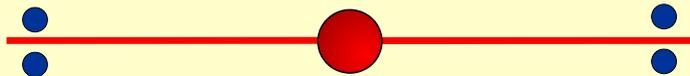
Zwei Elektronenpaare - Der AX₂-Typ

A ist das zentrale Atom

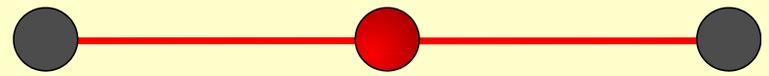
X steht für an A gebundene Atome

E steht für freie **Elektronenpaare** am Zentralatom

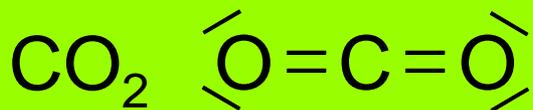
Elektronenpaare



Molekülgestalt



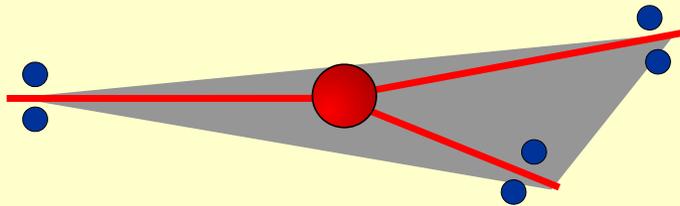
AX₂



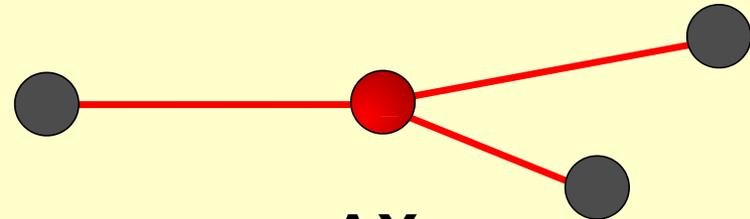
Kohlendioxid

Drei Elektronenpaare - Der AX_3 - und AX_2E -Typ

Elektronenpaare

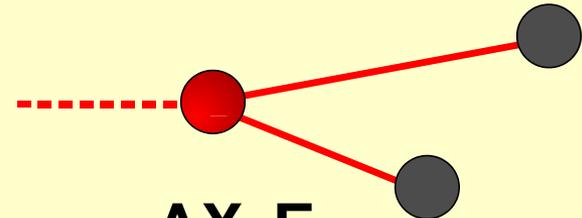


Molekülgestalt



AX_3

trigonal-planar

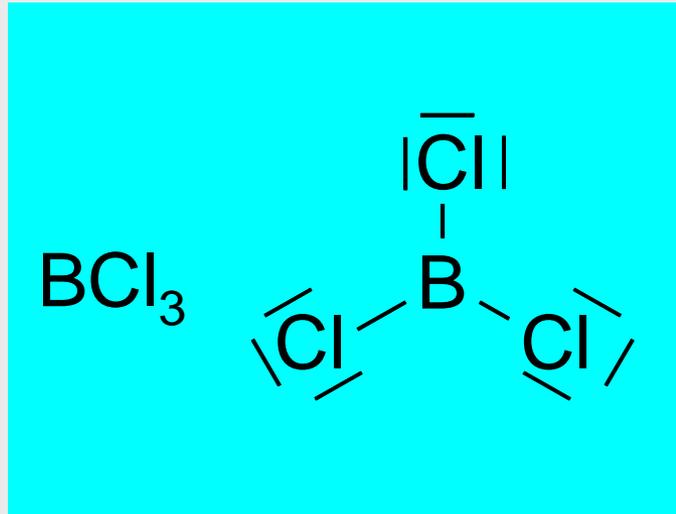


AX_2E

gewinkelt

Drei Elektronenpaare - Der AX_3 - und AX_2E -Typ

AX_3



Bortrichlorid

Zahl der Valenzelektronenpaare führt hier zur

Oktettunterschreitung,

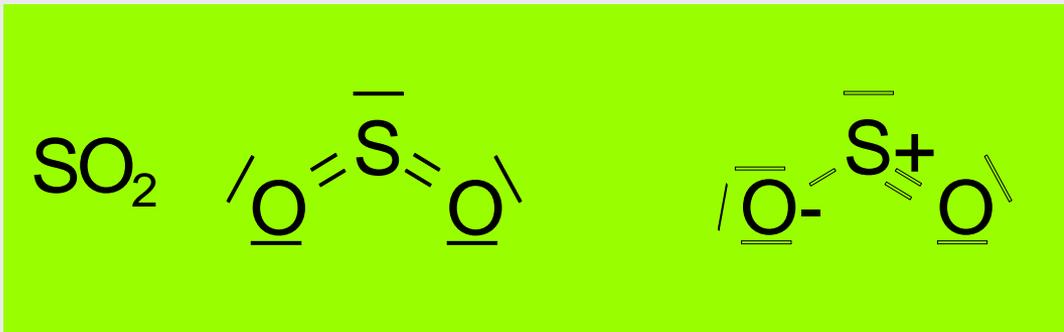
bei

Schwefeldioxid

jedoch zur **Oktettaufweitung**

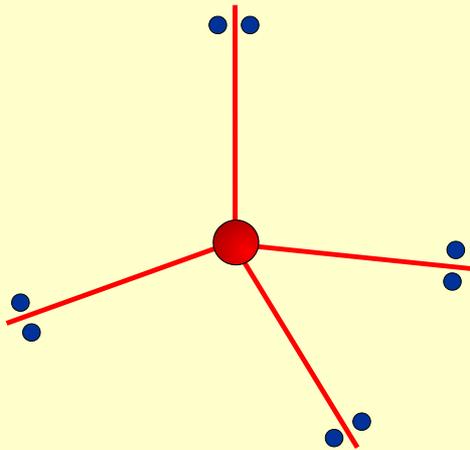
(Achtung: nur die rechte mesomere Grenzformel ist eine korrekte Lewis-Formel)

AX_2E

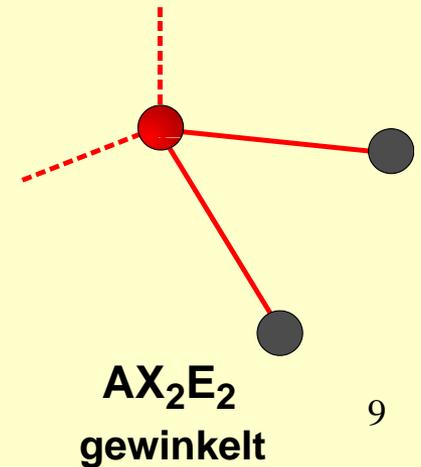
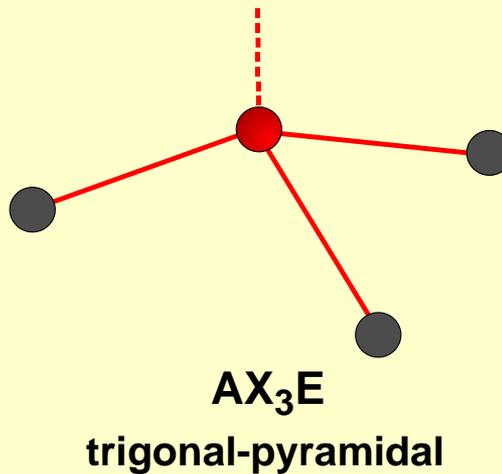
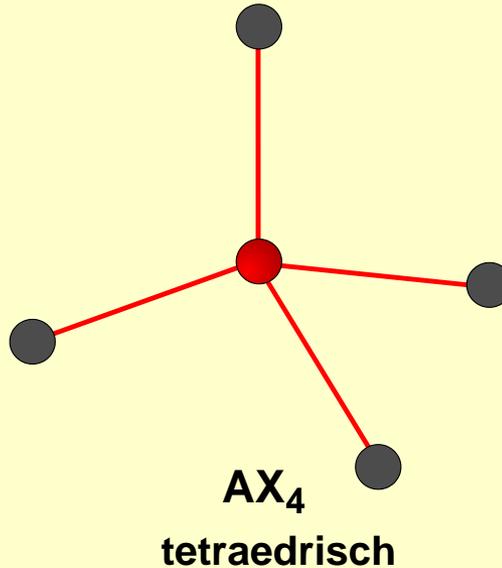


Vier Elektronenpaare - Der AX_4 -, AX_3E - und AX_2E_2 -Typ

Elektronenpaare

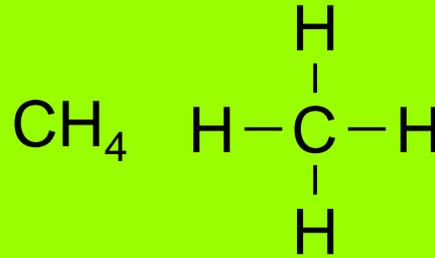


Molekülgestalt



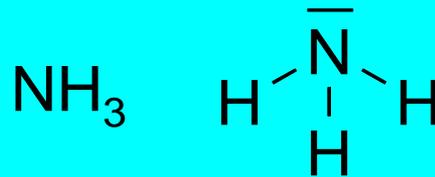
Vier Elektronenpaare - Der AX_4 -, AX_3E - und AX_2E_2 -Typ

AX_4



Methan

AX_3E



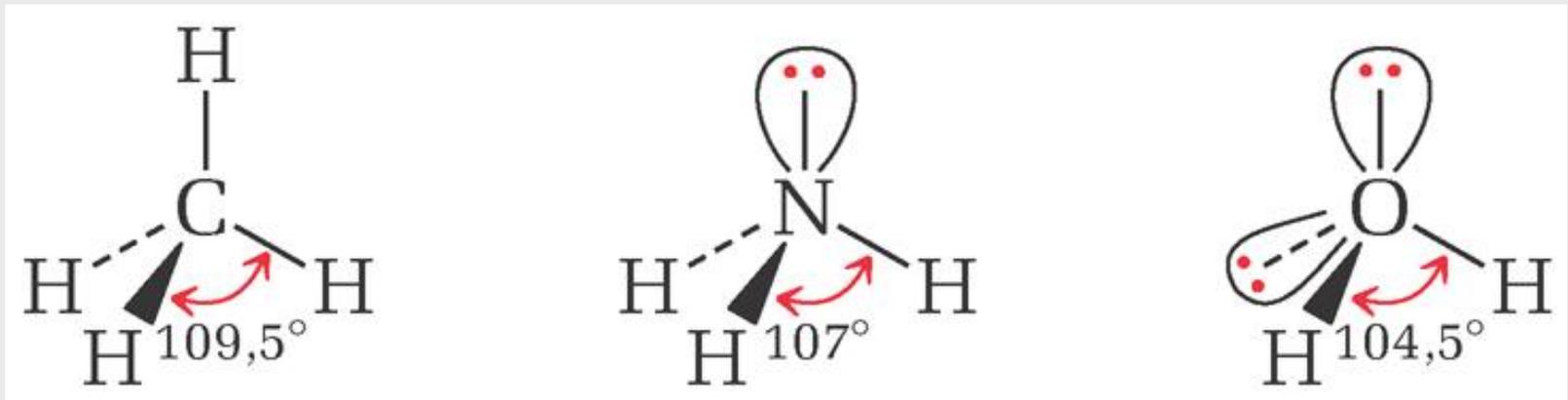
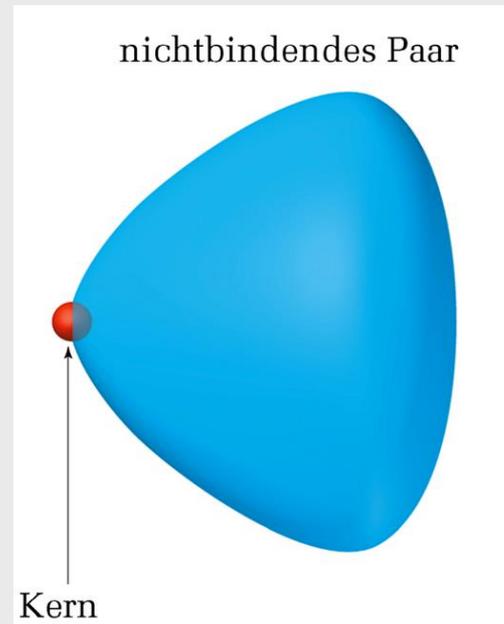
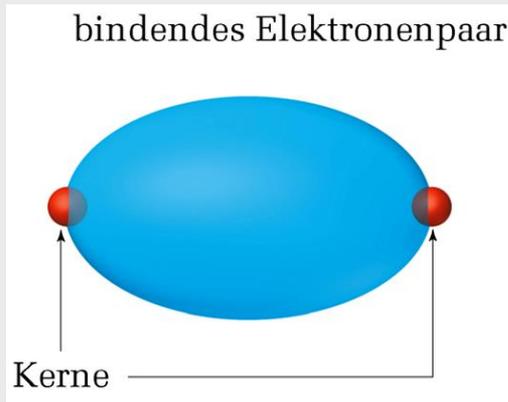
Ammoniak

AX_2E_2

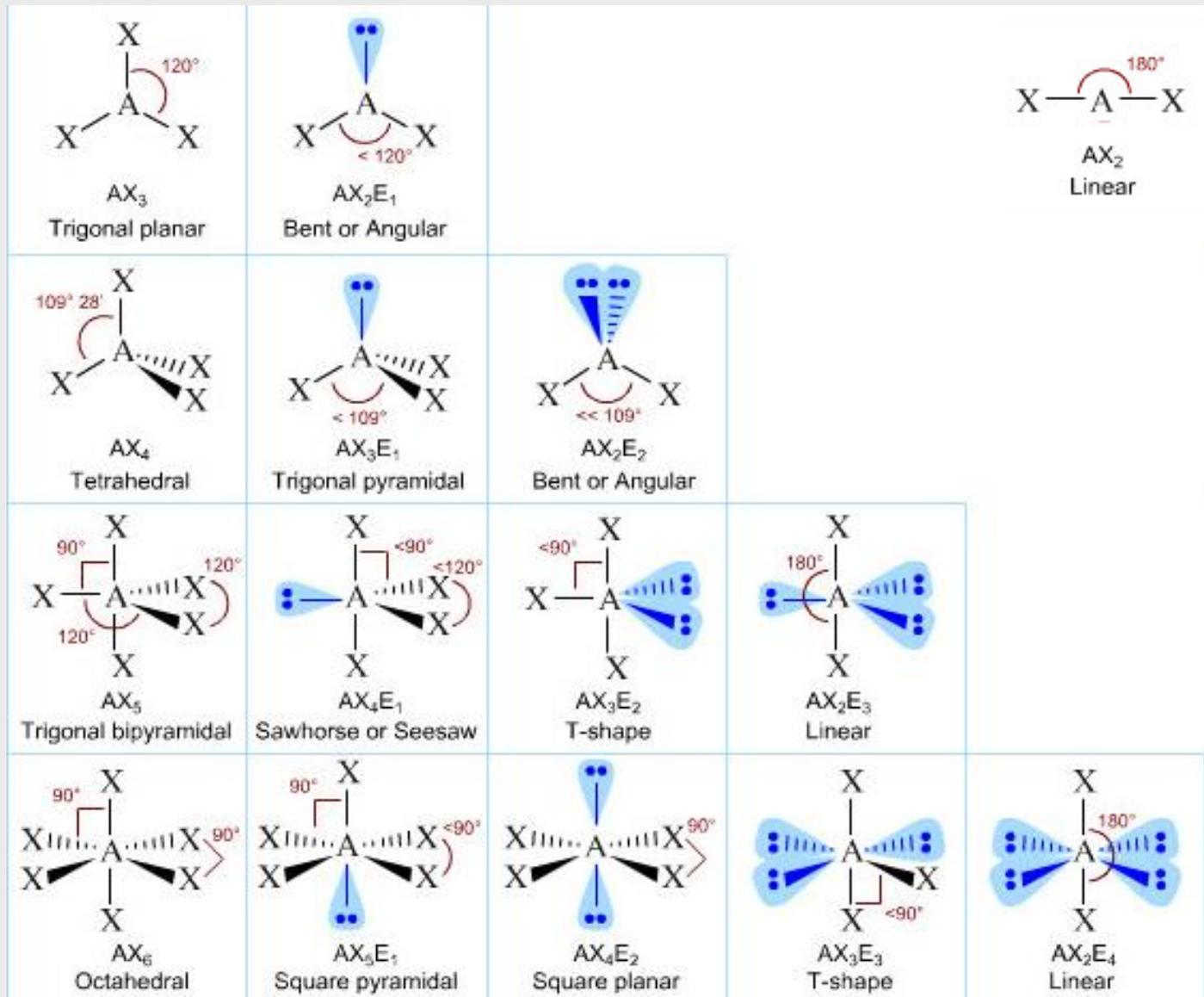


Wasser

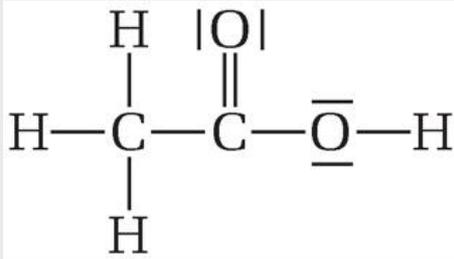
Raumbedarf nichtbindender Elektronenpaare



VSEPR-Modell: Übersicht über mögliche Anordnungen

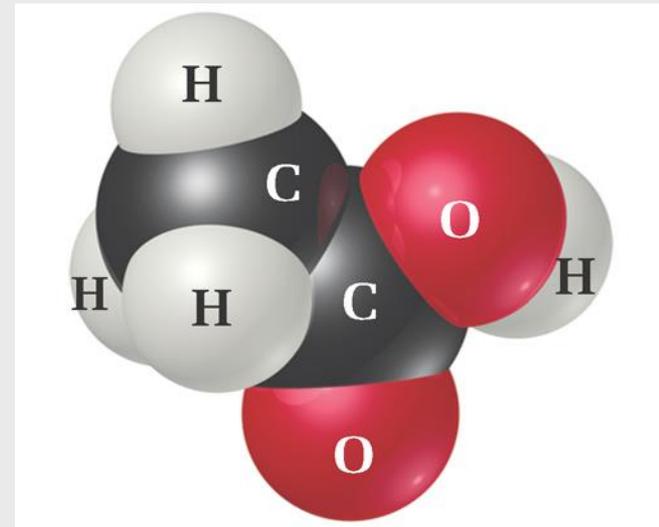
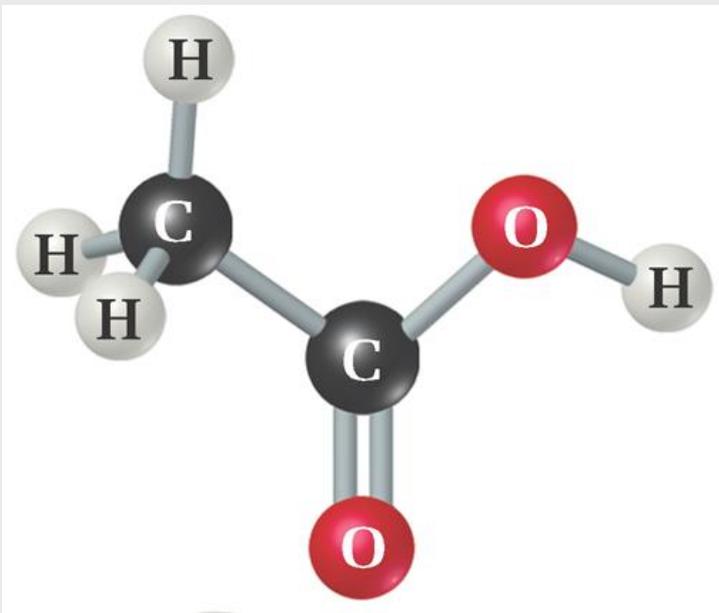


VSEPR-Modell: mehrere „Zentralatome“



Essigsäure

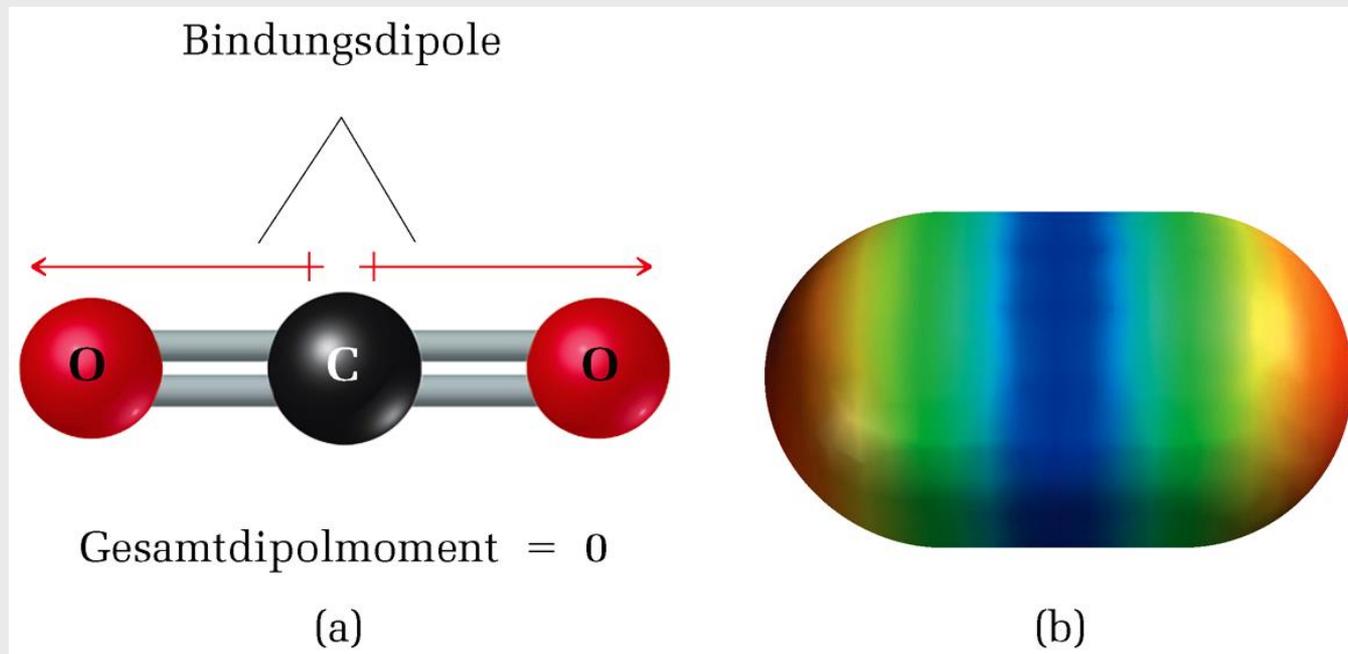
	$ \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C} \\ \\ \text{H} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{C} \end{array} $	$ \underline{\text{O}}-\text{H} $
Strukturtyp	tetraedrisch	trigonal eben	tetraedrisch
vorhergesagte Bindungswinkel	109,5°	120°	109,5°



Polare Bindungen

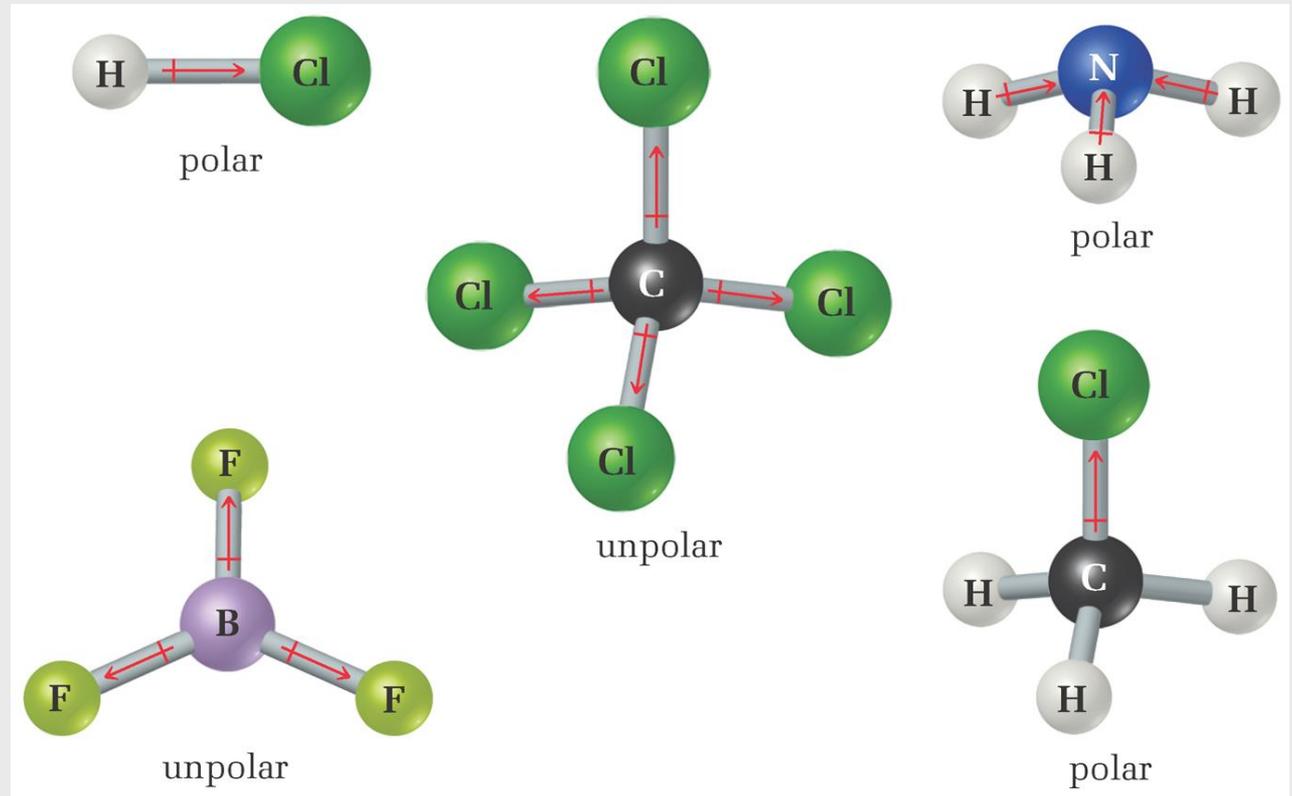
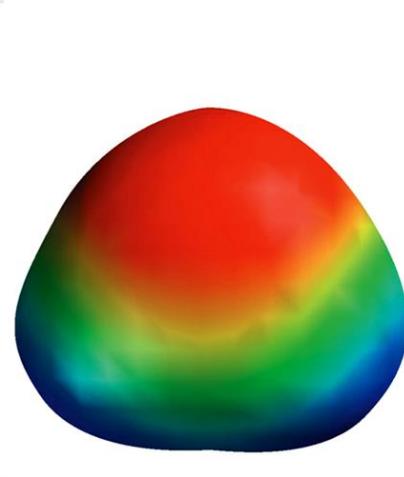
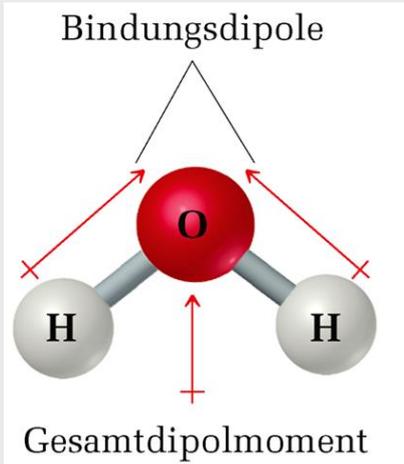
Bindungsdipol: Vektorgröße, zeigt in jeder Bindung in Richtung des elektronegativeren Elements, Länge $\sim \Delta\chi$

Gesamtdipolmoment: Vektorsumme der Bindungsdipole

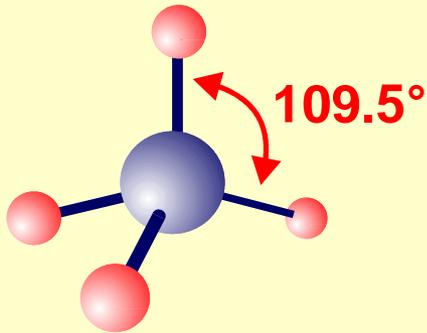


Farbcodierung auf einer Isooberfläche der Elektronendichte für CO_2 : höheres ESP – rot, niedrigeres ESP - blau ¹⁴

Polare und unpolare Moleküle

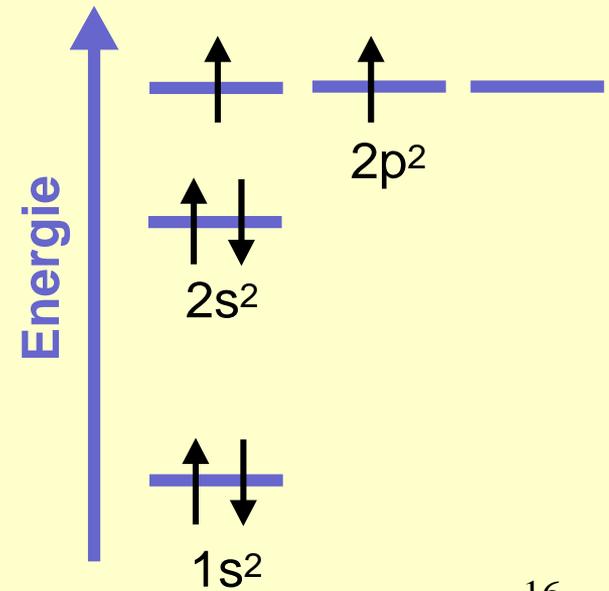
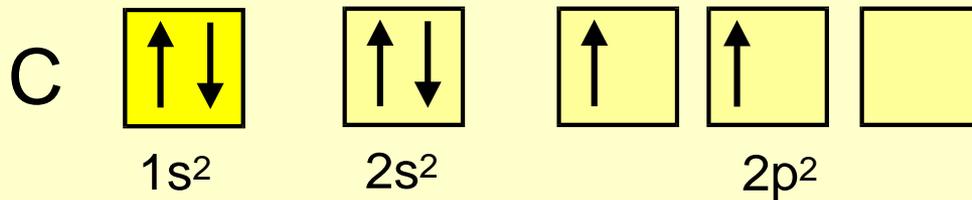


Kovalente Bindung - Hybridisierungsmodell

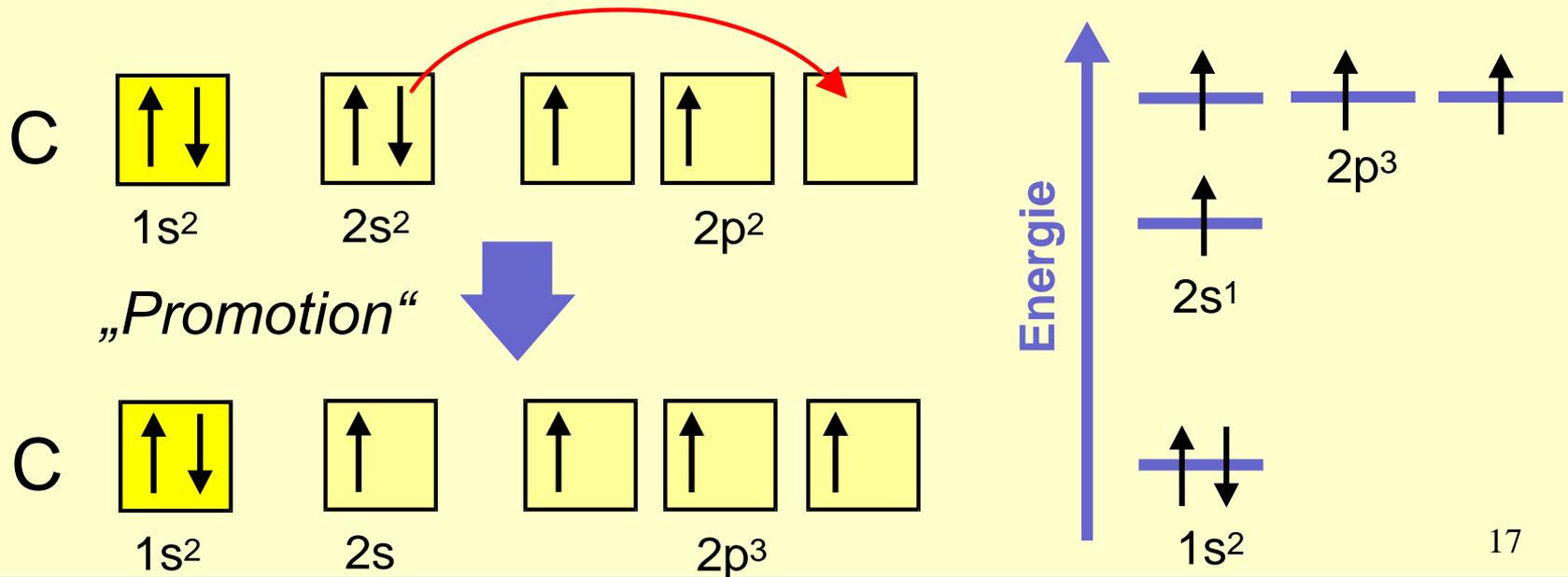
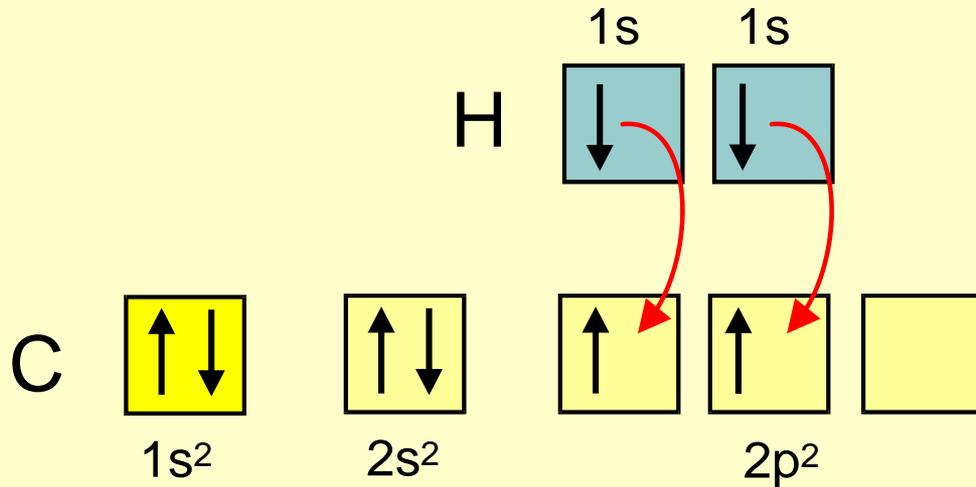


Methan, CH₄

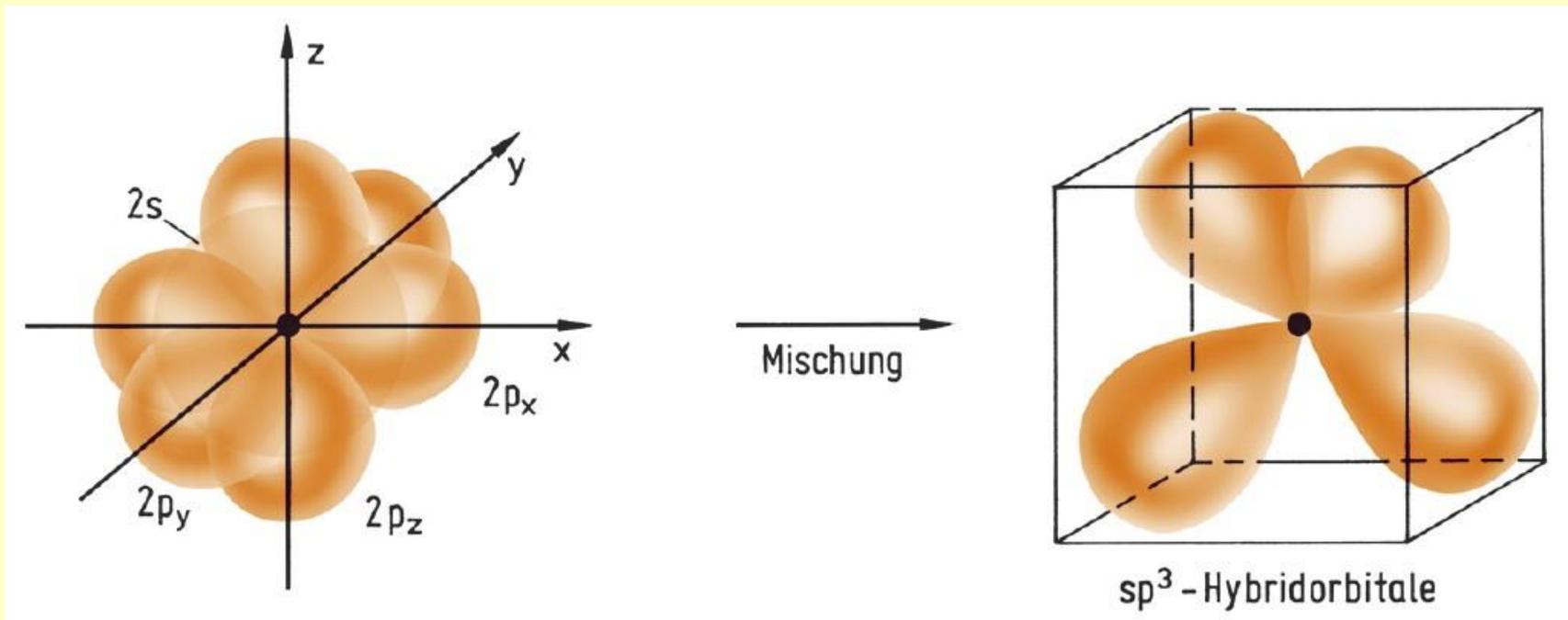
Elektronenkonfiguration C: [He]2s²2p²



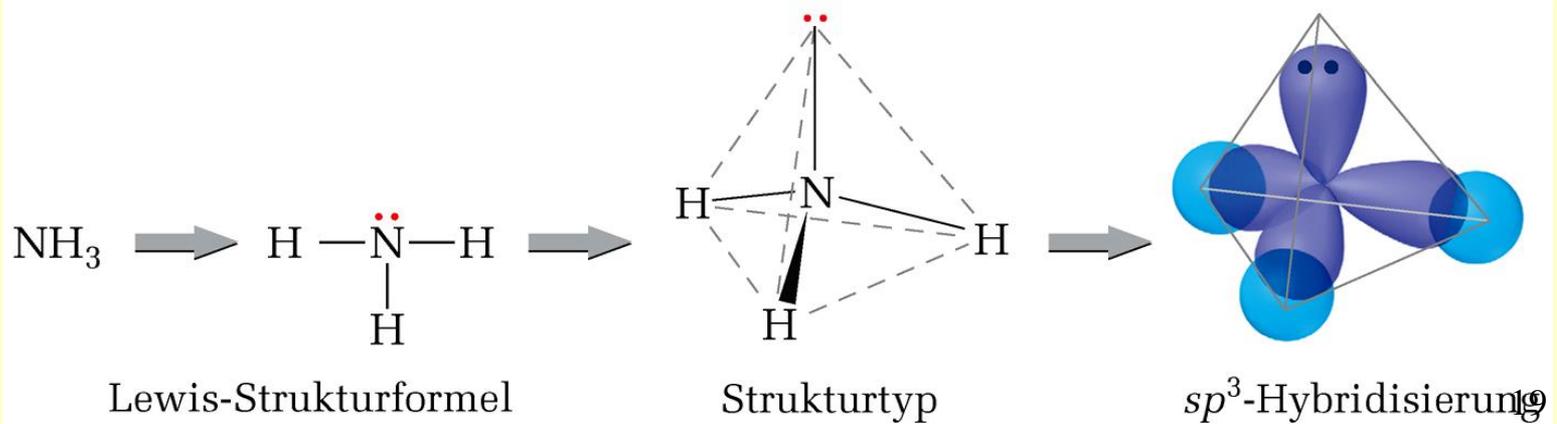
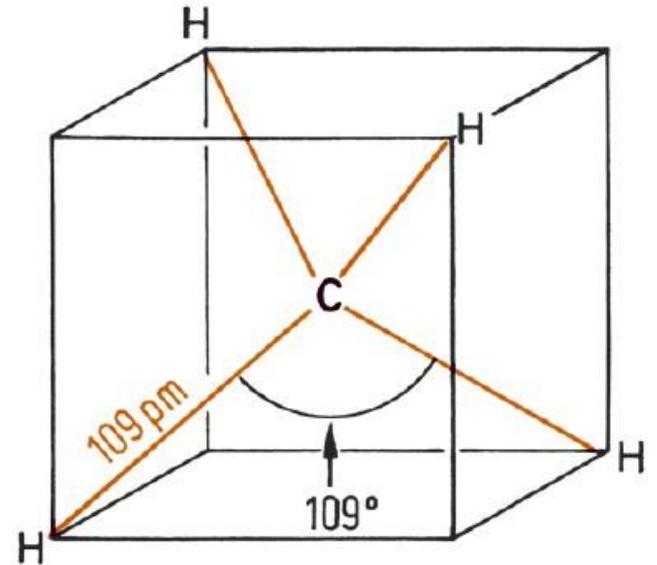
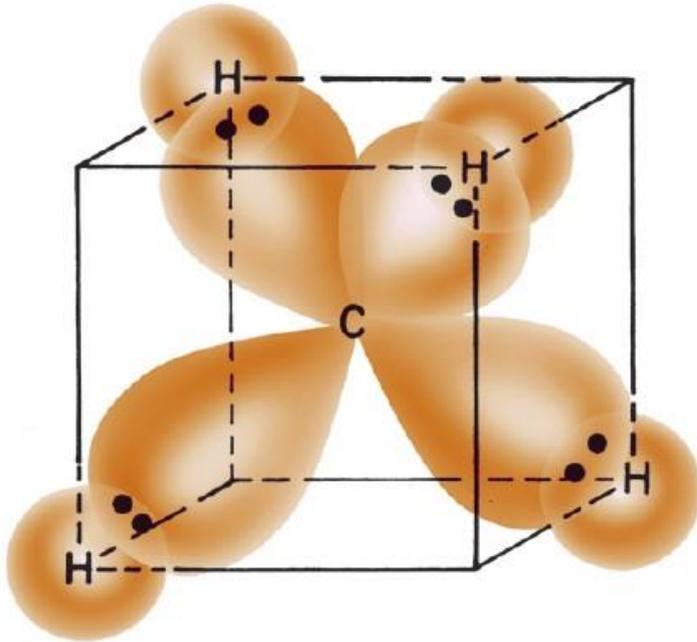
Hybridisierungsmodell



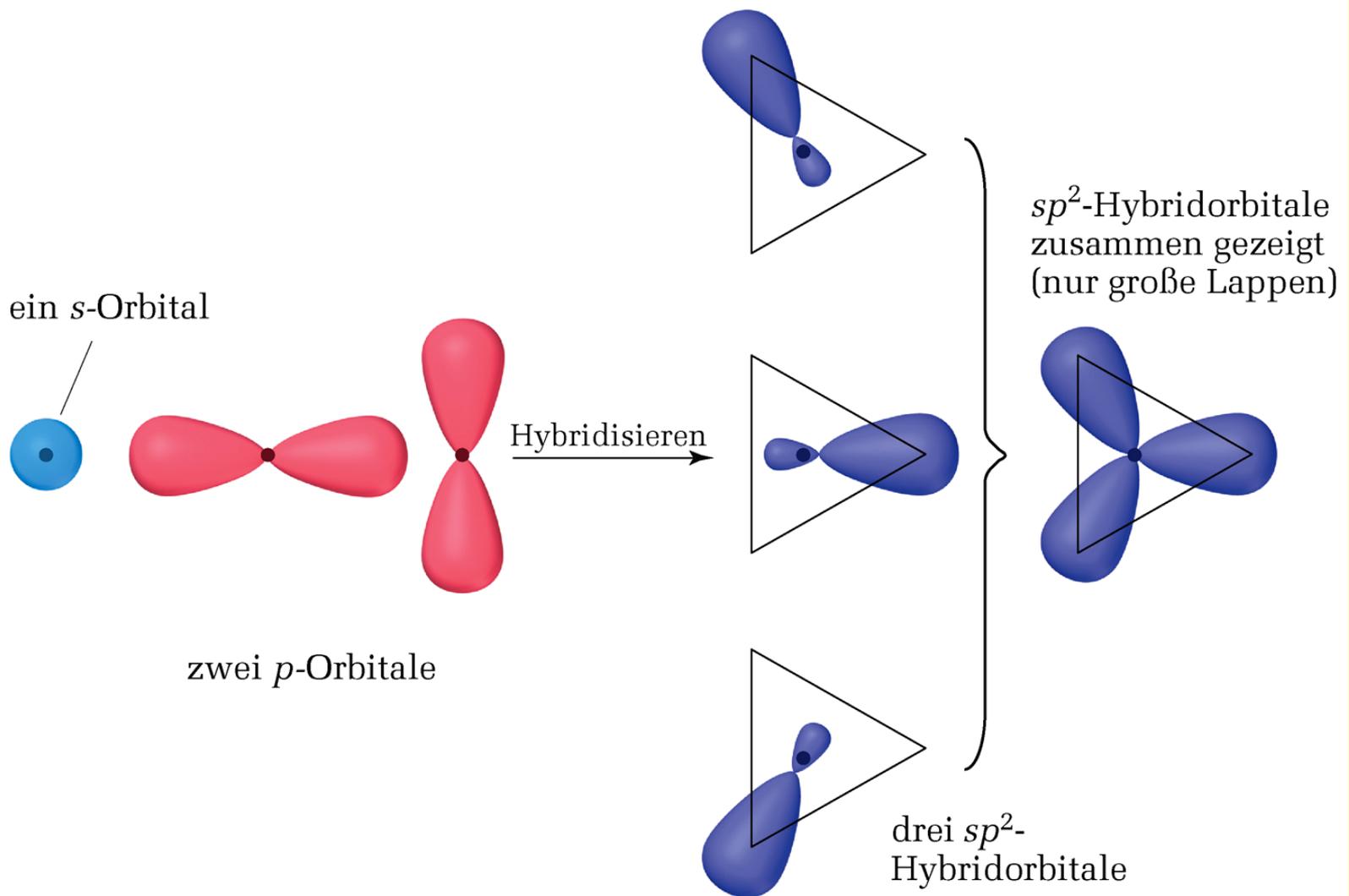
sp^3 – Hybridisierung



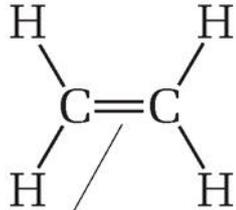
Hybridisierung – sp^3



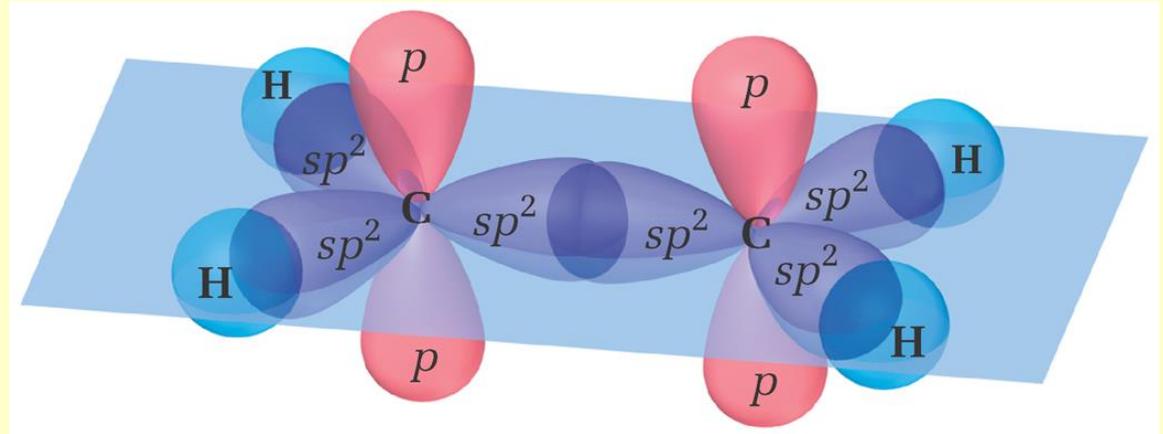
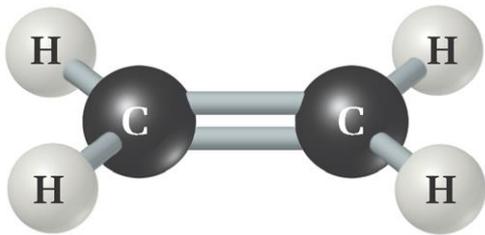
Hybridisierung – sp^2



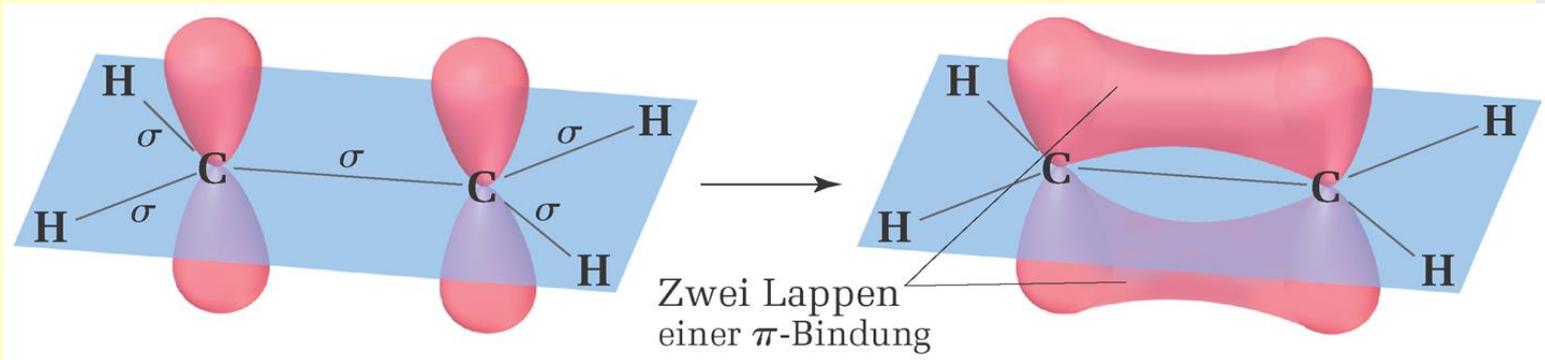
sp^2 - Hybridisierung: Ethylen



eine σ -Bindung plus
eine π -Bindung



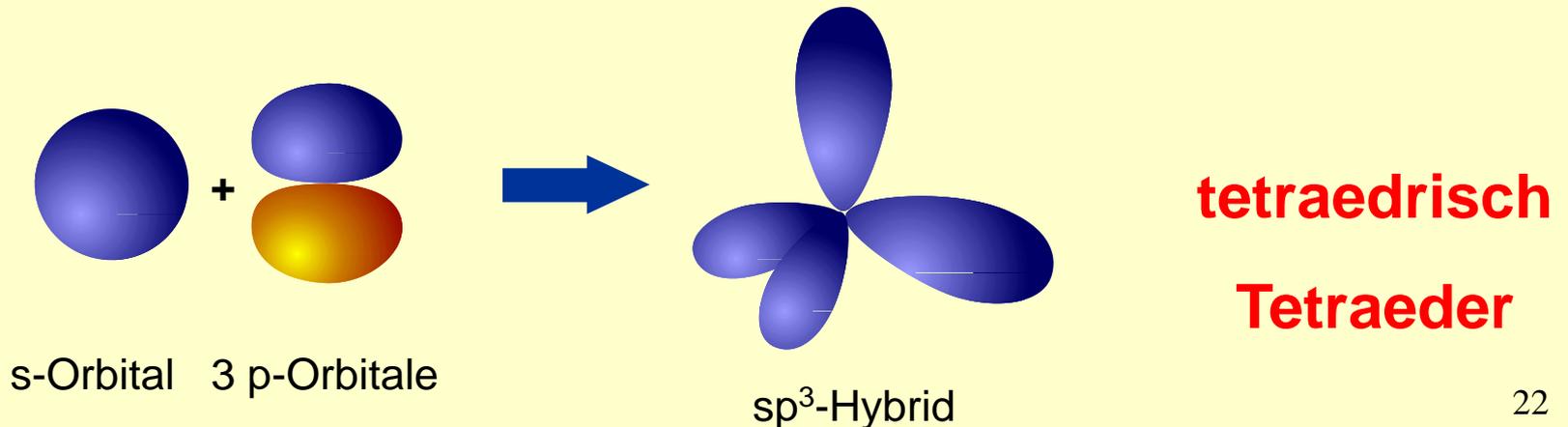
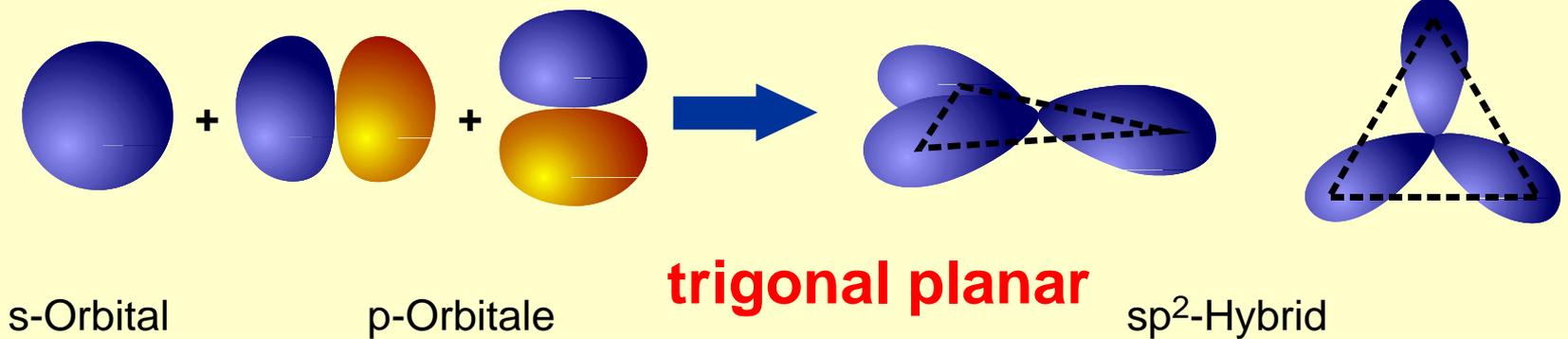
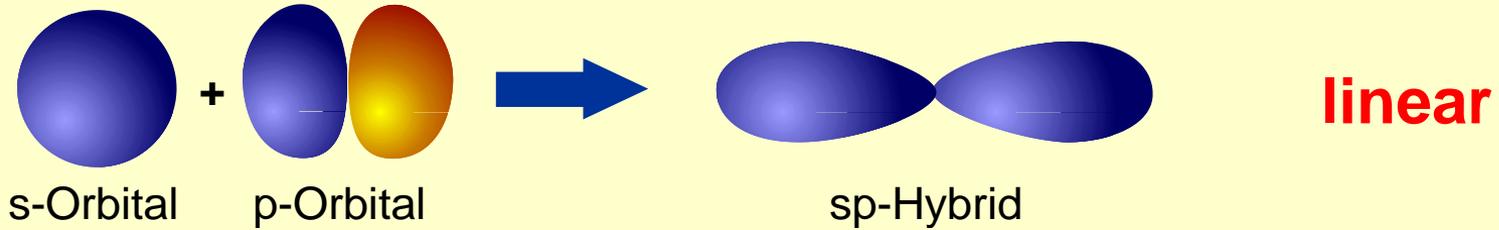
sp^2 -Orbitale bilden σ -Bindungen



Zwei Lappen
einer π -Bindung

unhybridisierte p-Orbitale bilden π -Bindung

Übersicht Hybridisierungstypen „s+p“



Vergleich der Konzepte zu kovalenten Bindungen

Lewis-Formeln

- **Oktettregel**
- Bindigkeit und Bindungsordnung wird vorhergesagt
- Keine strukturelle Voraussage
- Keine Erklärung von magnetischen Eigenschaften

MO-Theorie

- **LCAO-MO**
- Braucht AO's vergleichbarer Energie, Phase und räuml. Orient.
- Sagt BO und magnetische Eigenschaften voraus
- Schnell unübersichtlich

VB-Theorie

- **Hybridisierung**
- Geht aus von Atomorbitalen
- Sagt Molekülstruktur voraus
- Konzeptionell einfach
- Keine Erklärung von magnetischen Eigenschaften

Wichtige Begriffe

Molekülstruktur,
Polyeder, Kugel-Stab-Modell, Kalottenmodell,
VSEPR-Methode, wichtige Polyeder, Gesamtzahl der
Bindungspartner / der freien Elektronenpaare,
Molekülstrukturen von AX_nE_m - Molekülen,
Bindungsdipol, Gesamtdipolmoment,
polare und unpolare Moleküle,
Hybridisierung, Gestalt von $sp^{1/2/3}$ - Hybridorbitalen