

4 Zusammenfassung Chemie - Molekulare Geometrie I

Bis jetzt wissen wir noch nicht, wie die räumliche Anordnung der einzelnen Atome eines Moleküls aussieht - wir werden dieses Problem mit Hilfe der *VSEPR Theorie*^a lösen.

VSEPR Theorie

Die Form und Grösse eines Moleküls wird vollständig durch die Bindungslänge und Bindungswinkel der enthaltenen Bindungen definiert, dafür muss man sich Elektronenpaare als Domänen vorstellen. Es gilt zwischen vier Elektronendomänen zu unterscheiden:

- (1) Einfachbindung (EB)
- (2) Elektronenpaar (EP), lokalisiert an einem Atom
- (3) Doppelbindung (DB)
- (4) Dreifachbindung (TB)

Für die grösse der Domänen kann ungefähr folgendes angenommen werden:

$$\text{TB} > \text{DB} \geq \text{EP} > \text{EB}$$

Generell kann gesagt werden:

Je grösser eine Elektronendomäne, desto stärker wird eine relativ kleinere Elektronendomäne von dieser abgestossen.

Wie lässt sich die räumliche Anordnung nun bestimmen?

Innerhalb eines Moleküls ordnen sich die Elektronendomänen soweit voneinander entfernt an wie nur möglich, damit die Abstossungseffekte minimiert werden. (Dadurch ist die Energie des Moleküls am niedrigstens!)

⇒ Kurz - Elektronendomänen meiden sich.

Vorgehen:

- a. Zeichnen einer Lewis-Stuktur:
→ Mit dieser kann die Anzahl und Arten der anwesenden Elektronendomänen bestimmt werden.
- b. Unter Berücksichtigung der Abstossungseffekte der Elektronendomänen, kann die räumliche Anordnung der Elektronendomänen zueinander bestimmt werden.
Nicht vergessen: Es geht darum die Abstossungseffekte der Elektronendomänen zu vermindern → Diese wollen soweit wie möglich voneinander entfernt sein.
- c. Die finale Molekülgeometrie wird basierend auf den bindenden Elektronendomänen bestimmt.
→ Wenn alle Elektronendomänen bindende Elektronenpaare sind, dann stimmt die finale Molekülgeometrie mit der Geometrie der Elektronendomänen^b überein.
(Übersicht siehe Wiederholung von Konzepten der 4. Übung)

^aVSEPR := valence shell electron pair repulsion

^bauch Pseudogeometrie genannt

Molekülform und Molekülpolarität

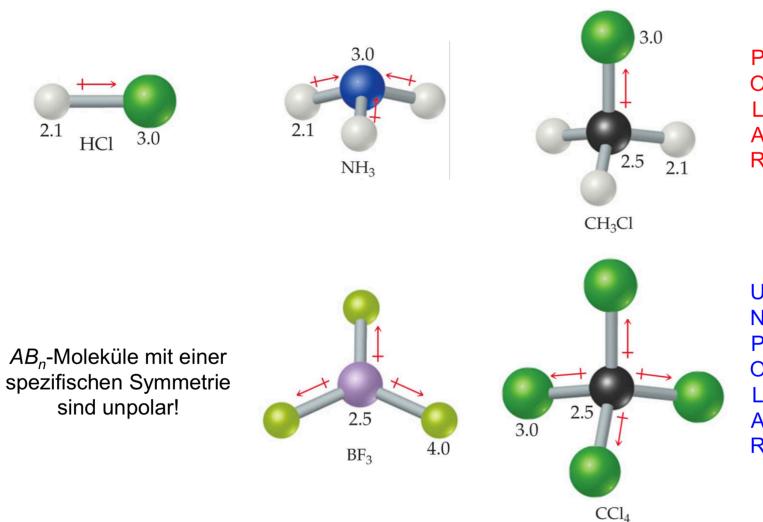
Um zu bestimmten, ob das vorliegende Molekül einen Gesamtdipolmoment μ besitzt, müssen zwei Punkte berücksichtigt werden:

- (1) Polaritäten jeder einzelnen Bindung innerhalb des Moleküls - entscheidet die Richtung eines einzelnen Bindungsdipols.

→ Verwendung von Elektronegativitäten (siehe 3 Zusammenfassung)

- (2) Molekülgeometrie - diese entscheidet die Lage eines einzelnen Bindungsdipols

⇒ Das Gesamtdipolmoment μ eines Moleküls berechnet sich aus der Vektorsumme all seiner Bindungsdipole.



Valenzbindungstheorie

Es handelt sich dabei um ein Näherungsverfahren zur Beschreibung von kovalenten Bindungen, wobei lediglich die Valenzelektronen betrachtet werden. Nach der Valenzbindungstheorie entsteht eine kovalente Bindung durch die Überlappung zweier Atomorbitale. Dabei behalten die Atomorbitale ihre ursprüngliche Form.

Beschreibung^c:

[...]zwei Atome rücken aufeinander zu; ein Orbital des einen Atom, mit einem ungepaarten Elektron besetzt, überlappt sich zunehmend mit einem Orbital des anderen Atoms, das auch mit einem ungepaarten Elektron besetzt ist; die beiden Atomorbitale verschmelzen zu einem gemeinsamen Orbital beider Atome, das von den eingebrachten Elektronen besetzt wird (Spinpaarung).

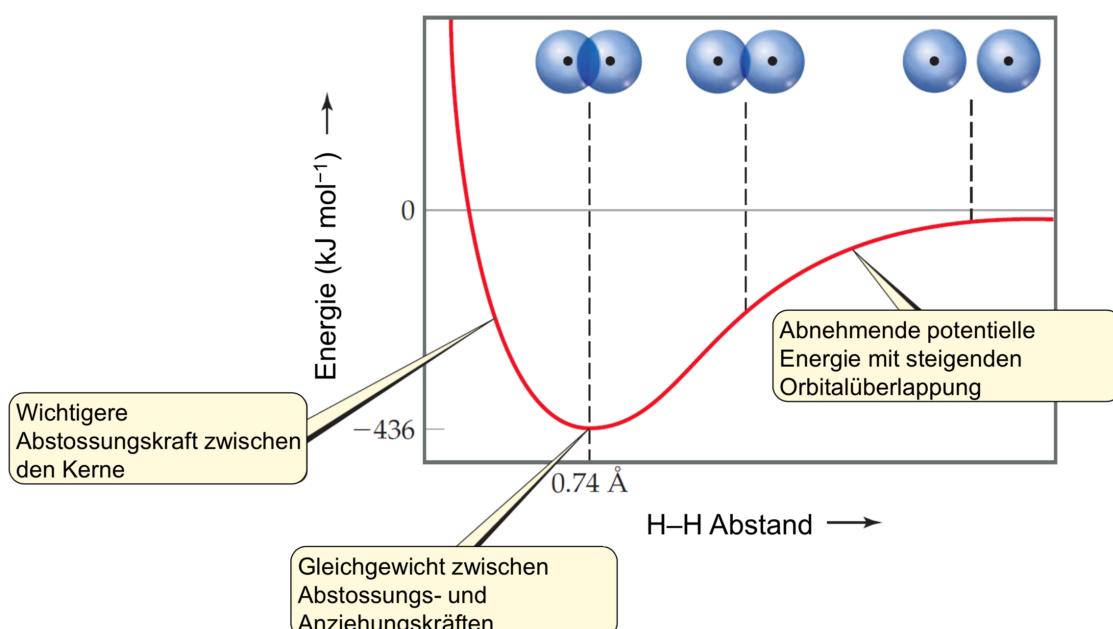


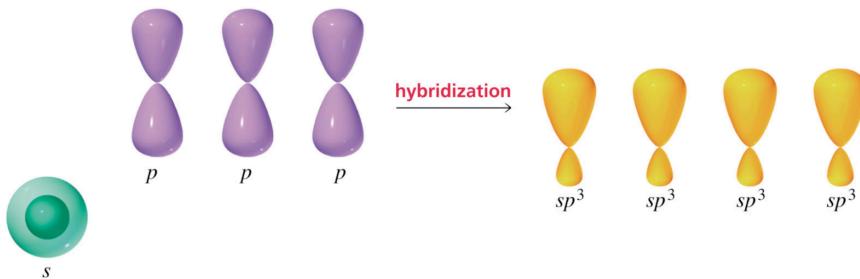
Abbildung 1: Gezeigt ist die Entstehung einer kovalenten Bindung zwischen zwei H-Atomen (Entstehung von H_2). Die Abbildung zeigt, dass es einen optimalen Abstand der beiden H-Atomen gibt, welcher zur niedrigsten Energie führt. An diesem Punkt überlappen sich die s-Orbitale der beiden Wasserstoffatome. Dadurch teilen sich die beiden H-Atome nun ihre beiden Elektronen - wir sprechen von einer kovalenten Bindung.

Hybridisierung

Wir haben bis jetzt Lösungen von Wellenfunktionen behandelt, welche zu unseren s , p , d , f -Orbitalen geführt haben. Diese mathematischen Funktionen können kombiniert und erneut gelöst werden, wodurch weitere Orbitale erhalten werden.

^cAus dem Textbuch *Chemie* von Mortimer, C. E.; Müller, U., Verlag: Thieme, 12. Auflage, Seite 133

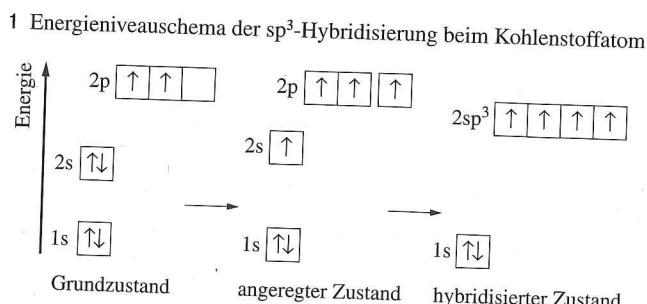
Sehr abstrakt - ich weiss, ein Beispiel: Durch die Kombination eines s -Orbitals mit drei p -Orbitalen, werden vier neue, völlig gleichartige Orbitale erhalten (also auch gleicher Energie → vier entartete Orbitale) - man spricht von sp^3 -Hybridorbitalen^d.



Wieso benötigen wir Hybridorbitale?

Anhand eines Beispiels lässt sich dies wieder am besten zeigen - schauen wir uns Methan an.

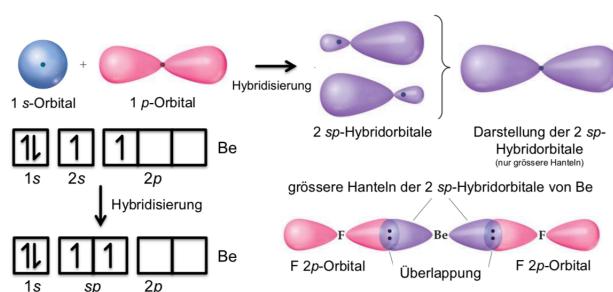
Der räumliche Aufbau von Methan ist der eines regulären Tetraeders, wobei alle vier Bindungen gleichwertig sind. Jedoch wissen wir, dass die Elektronenkonfiguration eines Kohlenstoffes $1s^2 2s^2 2p^2$ lautet. Das heisst, die Energieniveaus variieren, wodurch die vier Bindungen nicht gleichwertig sein sollten. Nehmen wir nun jedoch an das Hybdridisierung vorliegt, können wir die Gleichwertigkeit mittels der erhaltenen sp^3 -Orbitalen erklären^e.



Das Energieniveauschema zeigt die Veränderung der Energien der Orbitale eines Kohlenstoffatoms, welche durch eine Hybridisierung stattfindet.

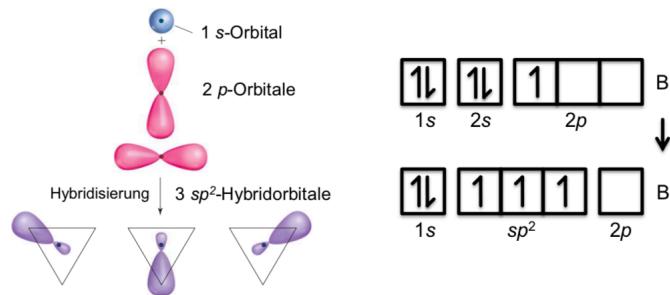
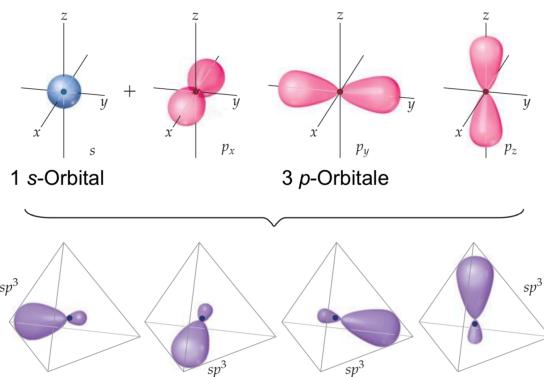
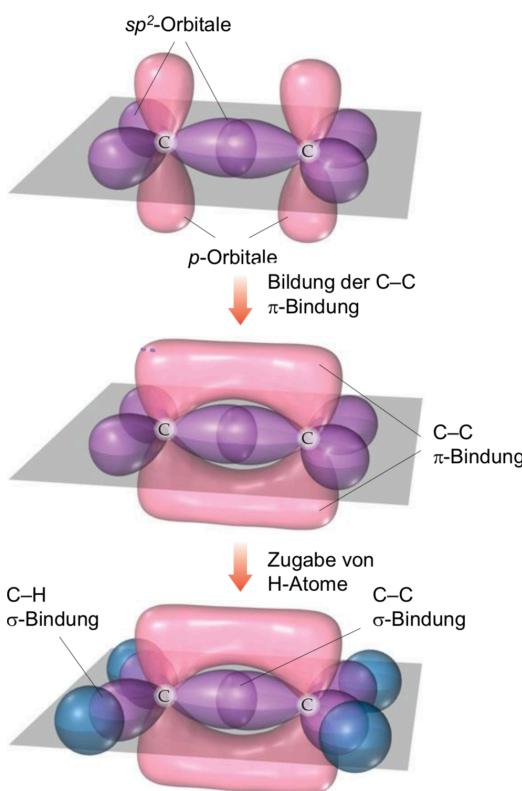
Wichtige Hybridisierungen für diese Vorlesung

(1) sp -Orbitale

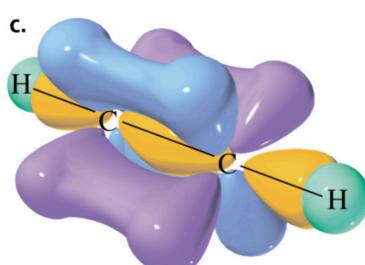


^dDie Graphik wurde aus *Organic Chemistry* von Bruice, P. Y., Verlag: Prentice Hall, 2005 entnommen

^eDas Energieniveauschema wurde aus *Chemie - Oberstufe*, Anrnold et. al., Verlag: Cornelsen, 1. Auflage entnommen

(2) sp^2 -Orbitale(3) sp^3 -Orbitale**Mehrfachbindung**

- (a) Mehrfachbindungen entstehen, wenn p -Orbitale sich überlappen. Die dabei entstehende Bindung wird π -Bindung genannt.
- (b) Wenn sp -Orbitale Bindungen ausbilden, werden diese σ -Bindungen genannt.
- (c) Bei sp^2 -hybridisierten Atomen kann eine π -Bindung ausgebildet werden → eine Doppelbindung.
- (d) Bei sp -hybridisierten Atomen können zwei π -Bindungen ausgebildet werden → eine Dreifachbindung^a.



^aDie Graphik wurde aus *Organic Chemistry* von Bruice, P. Y., Verlag: Prentice Hall, 2005 entnommen

Zurck zu unserem Beispiel aus der 3. ZF - Benzol

Wie wir schon in der 3. Übung gelernt haben, besitzt Benzol zwei Resonanzstrukturen, welche die Struktur gleichwertig gut beschreiben. Dargestellt mittels der Orbitale erhalten wir folgendes:

