# Molekülgeometrie und VSEPR-Theorie

## Motivation

Das Darstellen von Molekülstrukturen ist eine der zentralen Kompetenzen in der Chemie. Anhand der folgenden Übungen sollen die Schülerinnen und Schüler an eher einfachen Molekülen die Regeln für die Valenzstrichformeln, Skelettformeln und Keil-Strich-Formeln selbstständig trainieren und überprüfen.

## Voraussetzungen

* Coulomb-Gesetz
* Regeln zur Darstellung von Valenzstrichformeln
* Gegebenenfalls Regeln zu Keil-Strich-Formeln
* Unterschied zwischen bindenden und nichtbindenen Elektronenpaaren

## Ablauf

Die Unterrichtssequenz kann den Einsatz von Molekülbaukästen ergänzen oder ersetzen und basiert auf einer Phet-Simulation und einer optionalen Selbstkontrolle der Ergebnisse mit Molview.

1. Einführung geometrischer Grundmuster und der zugehörigen Begriffe an Atomen mit acht Valenzelektronen bei hypothetischen Molekülen
2. Anwendung der Konzepte auf reale Moleküle mit Effekt nichtbindender Elektronenpaare
3. Optional Vertiefung mit etwas grösseren Molekülen

#### Vorteile:

* Nicht an bestimmte Materialien gebunden und problemlos auch von zu Hause aus einsetzbar
* Angaben zu Geometrie und Bindungswinkeln
* Visualisierung nichtbindender Elektronenpaare
* Einfluss nichtbindender Elektronenpaare auf Bindungswinkel
* Mehrfachbindungen nicht als «Bananenbindungen» dargestellt (im Gegensatz zu Molymod)

#### Nachteile:

* 3D-Eigenschaften weniger unmittelbar als im Modell

### Hinweise und Einschränkungen

Im Folgenden wird der Begriff von «Elektronendomänen» verwendet, welcher vermutlich nicht sehr geläufig/gebräuchlich ist und möglicherweise ist es sinnvoll, diesen durch einen anderen Begriff zu ersetzen. Idee hinter diesem Begriff ist, den Schülerinnen und Schülern zu verdeutlichen, dass eine Mehrfachbindung als ein Raumbereich im Sinne der VSEPR-Theorie verstanden wird und sich aus der Anzahl der Domänen das geometrische Grundmuster eines Moleküls ergibt.

Aufgabe 2b kann auf die Schnelleren in der Klasse beschränkt bleiben. Es ist aber auch eine gute Gelegenheit, diese Website vorzustellen, da diese auch in anderen Bereichen sinnvoll und ergänzend eingesetzt werden kann.

Die Selbstkontrolle in Aufgabe 2b könnte auch mit z.B. AVOGADRO durchgeführt werden, ist dann aber etwas aufwändiger.

Es wäre auch möglich, im Rahmen dieser Thematik die Visualisierungen von Chemie-Interaktiv zu verwenden: <https://chemie-interaktiv.net/jsmol_viewer_4a.html>

# 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 |

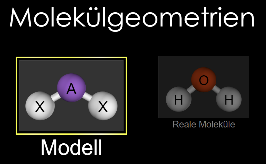
In grober Näherung kann die Geometrie um ein Atom herum bestimmt werden, indem man die Anzahl der bindenden und nichtbindenden Elektronenpaare an dem betreffenden Atom betrachtet. Vorhersagen über die Molekülform beruhen auf der Valenzschalen-Elektronenpaar-Abstossungstheorie (VSEPR). Wie der Name schon 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 AXn: 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) |

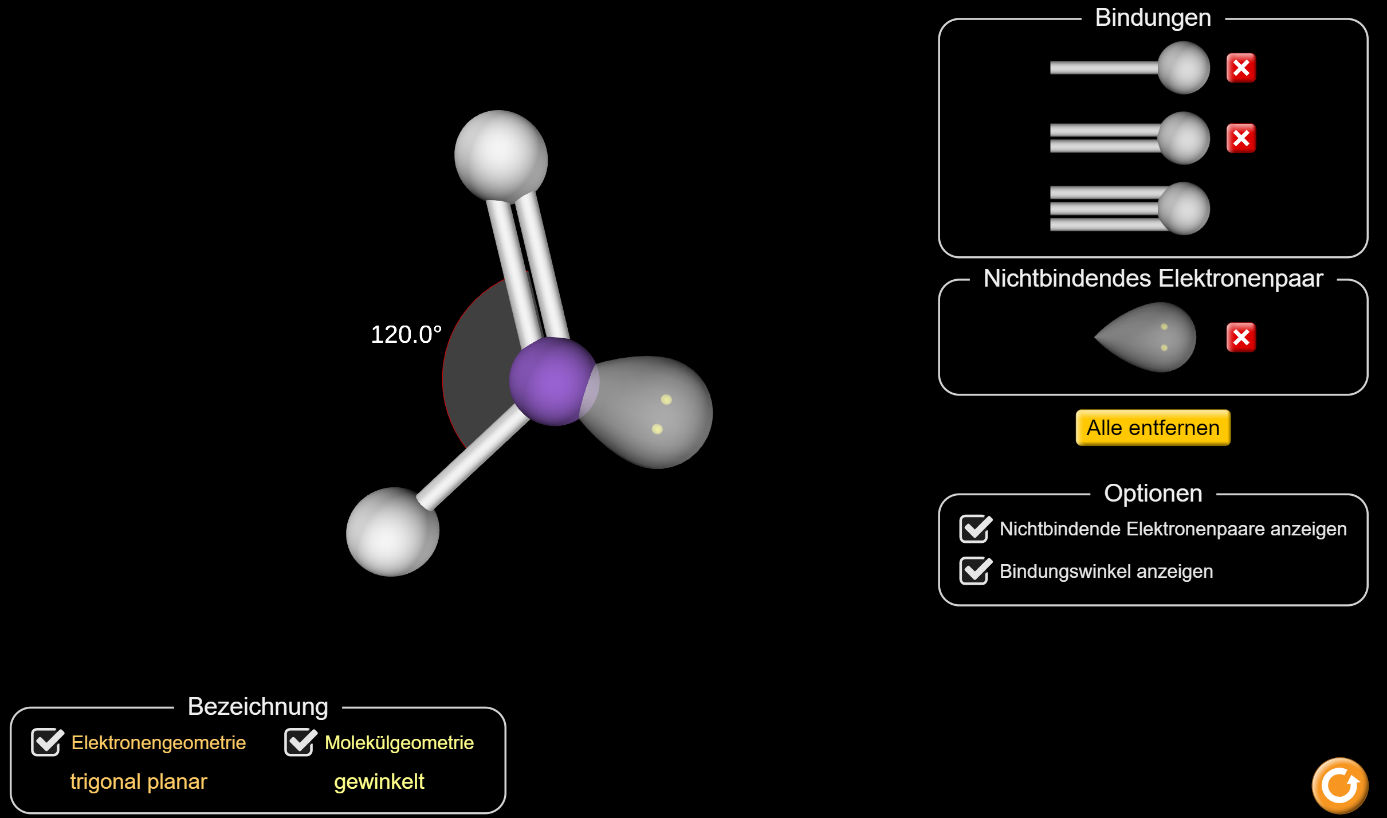
|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

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 AE2D 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 AX2 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.



In diesem Molekül gibt es 3 Raumbereiche (Elektronendomänen), 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 | Lewis Formel |
| AEDN | 3 | 120° | gewinkelt | trigonal planar |  |

**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- Domänen | Winkel | Molekül-Geometrie | Elektronen-Geometrie | Valenzstrichformel |
| AEDN | 3 | 120° | gewinkelt | trigonal planar |  |
| AE2D | 3 | 120° | trigonal planar | trigonal planar |  |
| AE3N | 4 | 109.5° | trigonal pyramidal | tetraedrisch |  |
| AE2N2 | 4 | 109.5 | gewinkelt | tetraedrisch |  |
| AE4 | 4 | 109.5° | tetraedrisch | tetraedrisch |  |
| AD2 | 2 | 180° | linear | linear |  |
| AET | 2 | 180° | linear | linear |  |

**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 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

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  |  |  |  |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Molekül | Valenzstrichformel | Anzahl e- Domänen | erwarteter Bindungswinkel | Bezeichnung Molekül-Geometrie | realer Bindungswinkel |
| CH4 |  | 4 | 109.5° | tetraedrisch | 109.5° |
| NH3 |  | 4 | 109.5° | trigonal pyramidal | 107.9° |
| H2O |  | 4 | 109.5° | gewinkelt | 104.5° |
| CO2 |  | 2 | 180° | linear | 180° |

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?

Abweichungen ergeben sich, wenn am Zentralatom eines oder mehrere nichtbindende Elektronenpaare vorhanden sind.

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

Nichtbindende Elektronenpaare benötigen mehr Platz, weshalb die übrigen Atome enger zusammenrücken.

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.

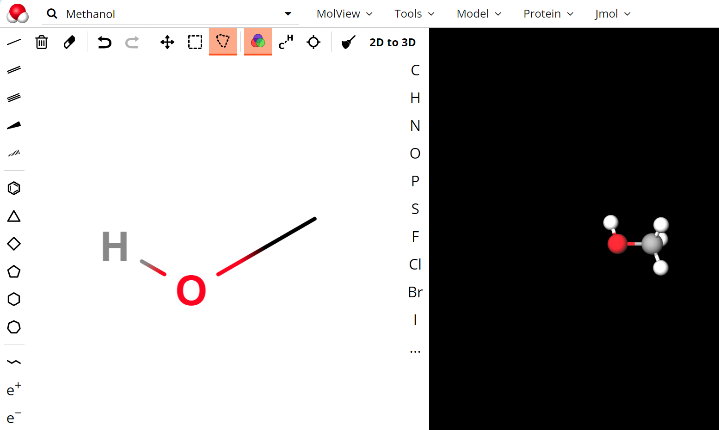
**Aufgabe 2b**

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°.

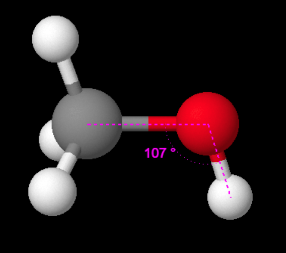
|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Molekül | Valenzstrichformel | Bezeichnung Molekül-Geometrie | erwarteter Winkel | gemessener Winkel |
| HCN  hydrogen cyanide |  | linear | 180° | 180° |
| HNO  Nitroxyl |  | gewinkelt | <120° | 119.9° |
| CH2O  Methanal |  | trigonal planar | 120° | 122.3°  115.4° |
| C2H2  Ethyne |  | linear | 180° | 180° |
| C2H4  Ethene |  | trigonal planar | 120° | 121°  118.1° |

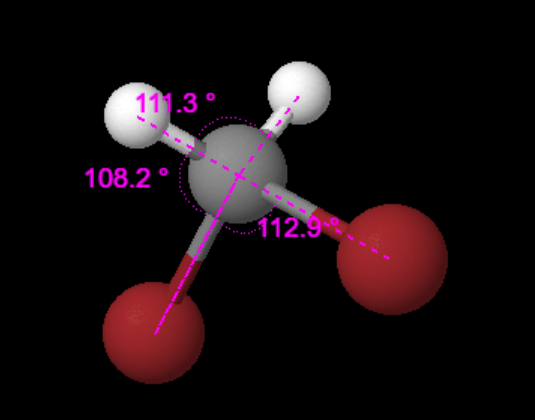
Kontrollieren Sie nun Ihre Lösungen, indem Sie die Website https://molview.org öffnen

Geben Sie im Fenster oben links den Englischen Substanznamen (brauner 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).



Bevor Sie den Winkel messen, sollten Sie eine Energieminimierung durchführen, um möglichst genaue Resultate zu erhalten: Wählen Sie im Menü den Eintrag Jmol aus und dann das Feld das Feld Energy minimization. Es erscheint nun eine Warnung, dass das Ergebnis falsch sein könnte … wählen Sie Don’t show again.

Um den Winkel am unterstrichenen Atom bestimmen zu können, wählen Sie erneut aus dem Menü den Eintrag Jmol aus. Nun können Sie durch Auswahl des Feldes Angle die Winkel um das gewünschte Atom ermitteln, indem Sie nacheinander auf die drei Atome klicken, zwischen welchen der Winkel aufgespannt ist. Beachten Sie hierbei: Das in der Summenformel unterstrichene Atom muss in der Mitte sein, muss also als zweites angeklickt werden. Der Winkel erscheint nun im Fenster der 3D-Struktur.

Es erscheint wieder eine Warnung, dass das Ergebnis ungenau sein könnte … wählen Sie auch in diesem Fall Don’t show again. Der so ermittelte Winkel ist folglich nur ein Näherungswert und weicht geringförmig vom realen Winkel ab, ist aber für unsere Zwecke völlig ausreichend.

Je nach Molekül (zum Beispiel bei C2H4) 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 C2H2Br2: Die grossen Bromatome benötigen mehr Platz, was zu einer deutlichen Aufweitung des Tetraederwinkels führt.

**Kontrollfrage:**

Von welchen drei Faktoren hängt der Bindungswinkel ab?

* Anzahl Elektronendomänen
* Anzahl nichtbindende Elektronenpaare
* Atomgrösse