



UNIVERSITÄT ROSTOCK



Vorlesung *Allgemeine Chemie* (CH01)

Für Studierende im B.Sc.-Studiengang Chemie

Prof. Dr. Martin Köckerling

Arbeitsgruppe Anorganische Festkörperchemie

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, Institut für Chemie



Wiederholung der letzten Vorlesungsstunde:

Thema: Chemische Bindungen

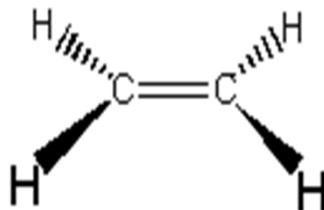
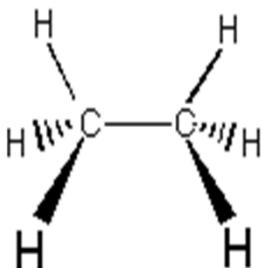
Chemische Bindungen, Lewis-Formeln, Einfach-, Doppel-, Dreifachbindungen, Mesomerie, Resonanz

Thema heute: Chemische Bindungen – Doppelbindungsregel, VSEPR

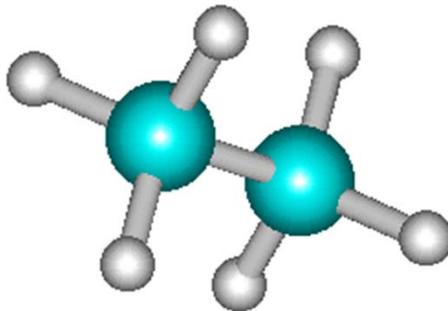


Mehrfachbindungen

C₂-Kohlenwasserstoffe Ethan, Ethen (Ethylen) und Ethin (Acetylen):

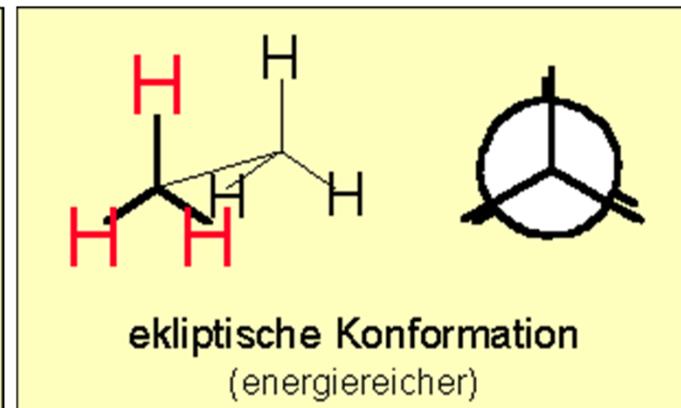
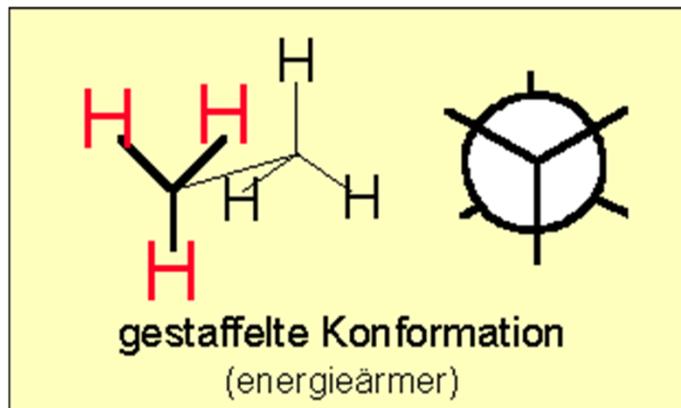
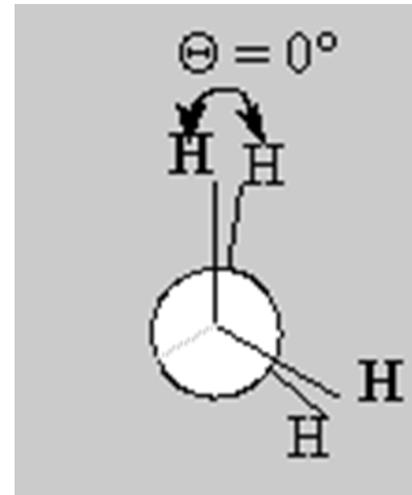
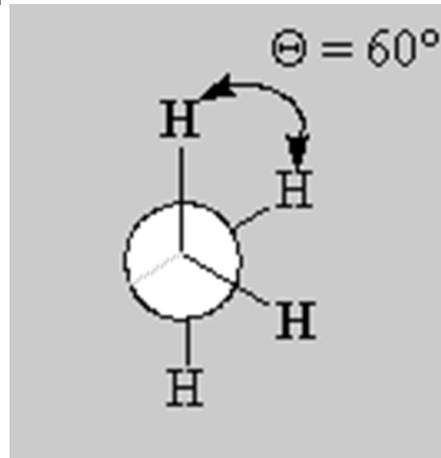


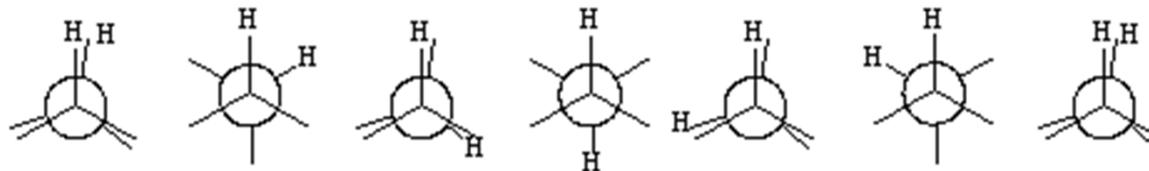
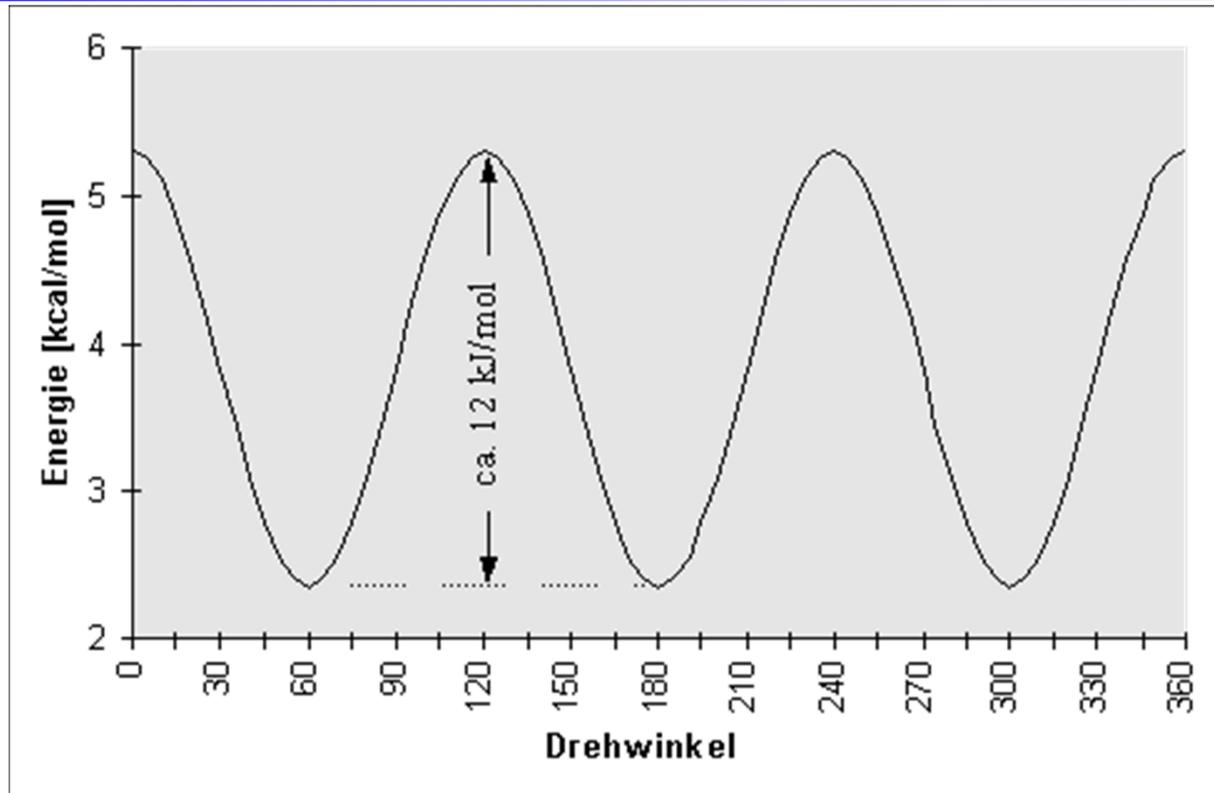
Ethanmolekül: jedes C-Atom nutzt sp³-Hybride zur Ausbildung von σ -Bindungen mit dem anderen C-Atom und mit je drei H-Atomen. Da die C-C- σ Bindung bezüglich der Kernverbindungsachse rotationssymmetrisch ist, ist eine Drehung der beiden Molekülhälften gegeneinander um diese Bindung möglich:





Die Orientierung der beiden Molekülteile: Konformation, Newman-Projektion, Diederwinkel

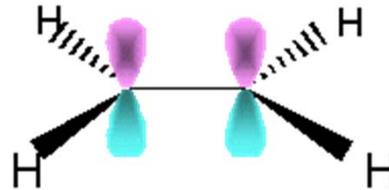




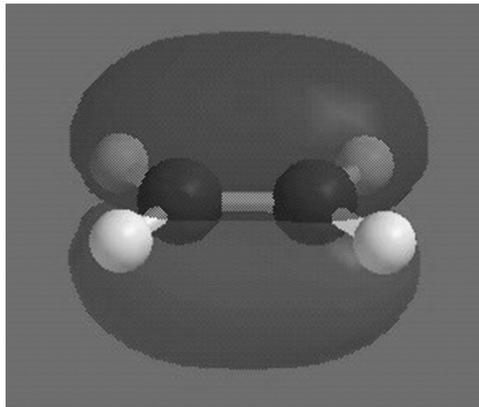
Drehung möglich bei Einfachbindungen



Das Ethylen-Molekül: planare Struktur, H-C-H-Bindungswinkel 118° . Das σ -Bindungsgerüst des Moleküls lässt sich mit Hilfe von sp^2 -Hybriden der beiden C-Atome beschreiben:



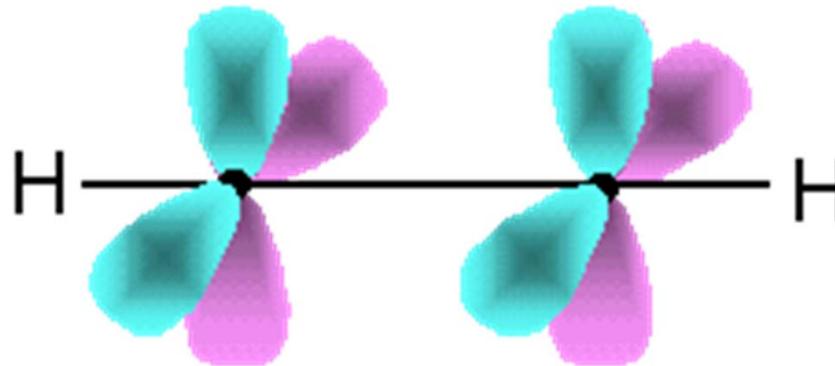
π -Bindung, mit Ladungsdichte oberhalb und unterhalb der Kernverbindungsachse:
Keine freie Drehbarkeit um die C-C-Achse





Acetylen-Molekül:

lineare Struktur, $2p_y$ - und $2p_z$ -Orbital stehen senkrecht zueinander und senkrecht zur Kernverbindungsachse, zwei π -Bindungen mit Elektronendichte über und unter sowie vor und hinter der C-C-Achse. Die Dreifachbindung besteht also aus einer σ - und zwei π -Bindungen

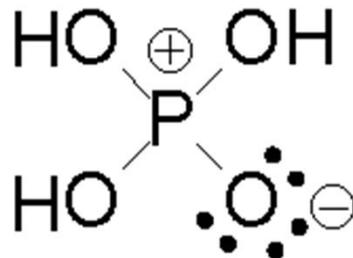




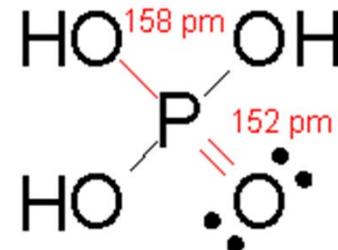
Mit dem Bindungsgrad nimmt die Bindungsenergie zu und der Kernabstand (Bindungslänge) ab:

	C-C-Abstand [pm]	Bindungsenergie [kJ/mol]	C-C-Bindungsordnung
Ethan	154	347	1
Ethen	133	598	2
Ethin	120	812	3

Phosphorsäure:



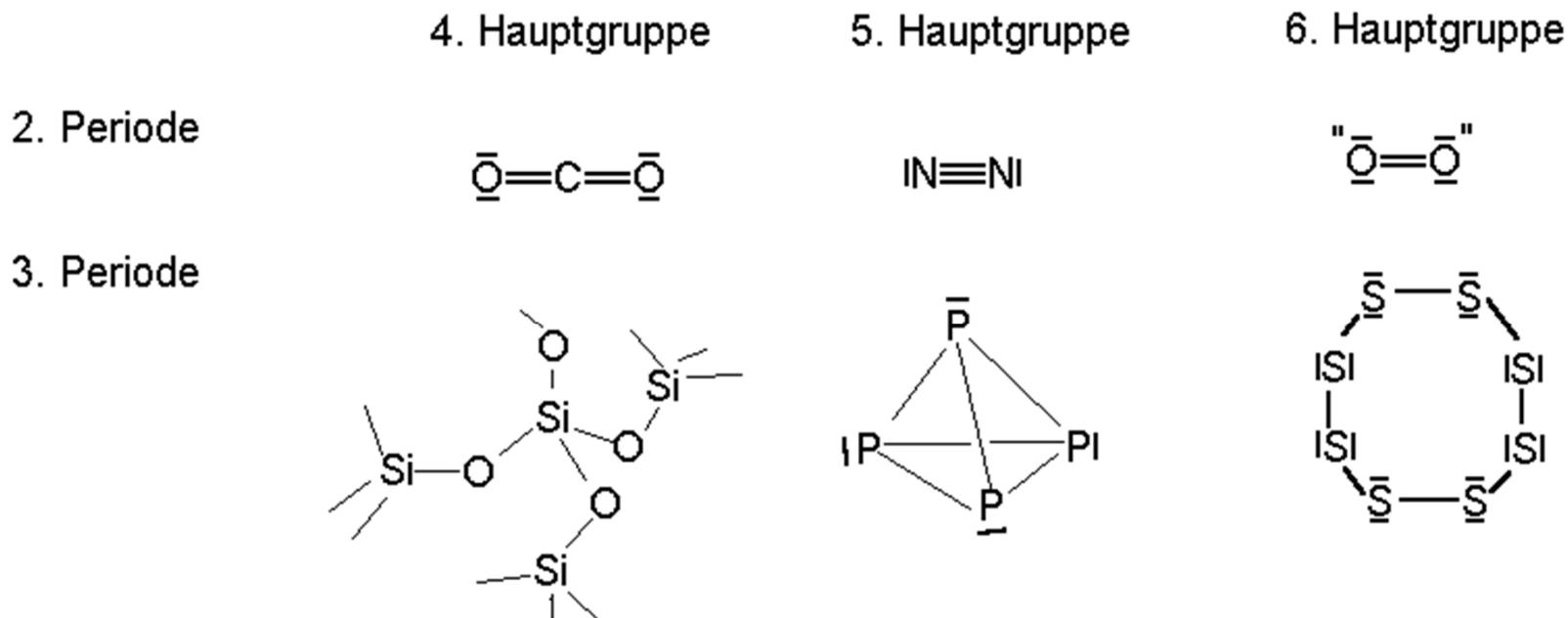
oder:



Die gleichen Regeln, die für die Ableitung von Molekülstrukturen mit Einfachbindungen gelten, können auch für Moleküle mit Mehrfachbindungen verwendet werden. Dabei ist stets zu beachten, dass π -Bindungen nur von nicht hybridisierten Orbitalen gebildet werden.



Doppelbindungsregel: $\pi(p,p)$ -Bindungen werden bevorzugt von den Elementen der 2. Periode gebildet. Die Elemente der 3. Periode bilden in formal analogen Verbindungen bevorzugt Einfachbindungen:





VSEPR-Theorie

Ziel: Einfache Ermittlung von Elektronen-/Molekülstrukturen

VSEPR-Methode (Valence Shell Electron Pair Repulsion)

Von GILLESPIE und NYHOLM (1957)

Rein elektrostatisches Modell, Molekülstruktur ergibt sich aus dem Prinzip der Abstoßung von Elektronenwolken bzw. spinparalleler Elektronen

Die VSEPR-Methode gestattet, unter Anwendung einfachster Voraussetzungen, die Molekülstrukturen bis zur Koordinationszahl 6 verhältnismäßig genau vorherzusagen. Sie verzichtet auf den mathematischen Apparat der Quantenchemie und betont die innerelektronische Abstoßung.

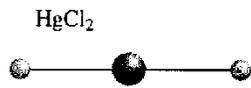


Valenzschalen – Elektronenpaar – Abstoßungs-Modell

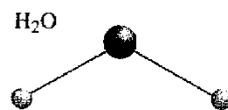
VSEPR Valence – Shell – Electron – Pair – Repulsion

Regeln:

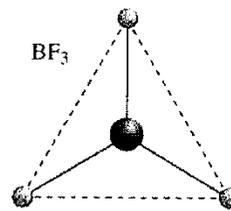
1. In Molekülen des Typs AB_n ordnen sich die Elektronenpaare in der Valenzschale des Zentralatoms in maximalem Abstand, d. h. im maximalen Abstand auf einer Kugeloberfläche an.
2. Die freien Elektronenpaare (nicht bindenden EP) beanspruchen mehr Raum als die bindenden EP und verringern dadurch die Bindungswinkel. In nicht äquivalenten Strukturen besetzen freie EP die Plätze mit dem größten Raumangebot.
3. Elektronegative Substituenten ziehen bindende EP stärker an sich heran und vermindern damit deren Raumbedarf.
4. Mehrfachbindungen beanspruchen mehr Raum als Einfachbindungen und verringern die Bindungswinkel der Einfachbindungen.



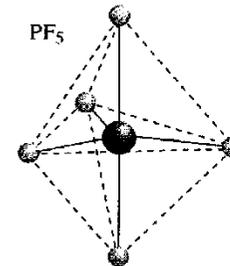
linear



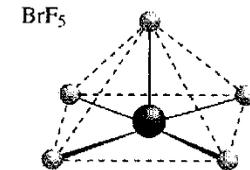
gewinkelt



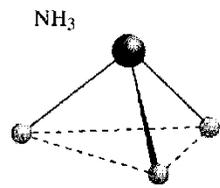
trigonal-planar



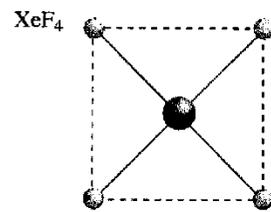
trigonal-bipyramidal



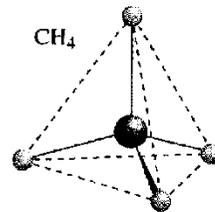
quadratisch-pyramidal



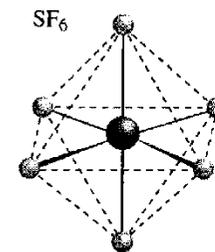
trigonal-pyramidal



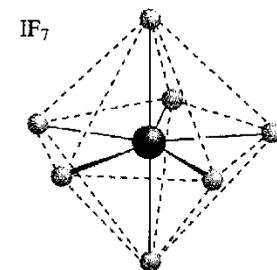
quadratisch-planar



tetraedrisch



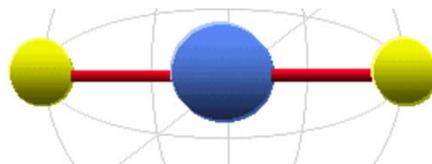
oktaedrisch



pentagonal-bipyramidal



AE₂ (und AX₂): Elektronenordnung und Molekülgestalt: lineare Anordnung,
Winkel: 180°



Beispiele:

Einfachbindungen:

BeH₂, BeCl₂

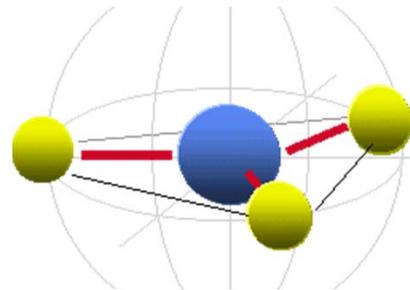
Mehrfachbindungen:

CO₂, CH₃-C≡C-H, H-C≡N



AE₃: dreieckige Elektronenpaaranordnung

Type AX₃: Elektronenpaaranordnung und Molekülgestalt: gleichseitiges, planares Dreieck, Winkel: 120°



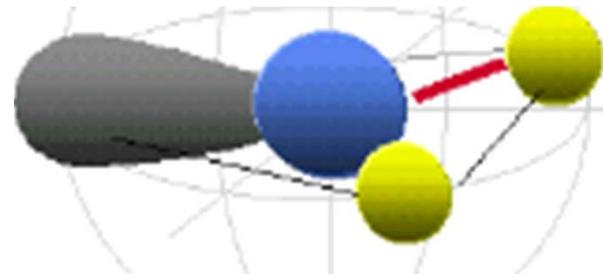
Beispiele:

Einfachbindungen: BF₃

Mehrfachbindungen: SO₃, H₂C=O, H₂C=CH₂, Cl₂C=O



Type AX₂E: Elektronenpaaranordnung: gleichseitiges planares Dreieck, Winkel: <math><120^\circ</math>, Atomanordnung: gewinkelt



Beispiele:

Einfachbindungen: SnCl_2

Mehrfachbindungen: SO_2 , O_3 (Ozon), NO_2^-



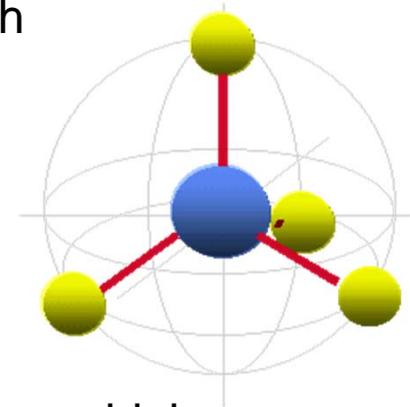
AE₄: tetraedrische Elektronenpaaranordnung, Winkel 109,5°

AX₄: Elektronenpaaranordnung und Molekülgestalt: tetraedrisch

Beispiele:

Einfachbindungen: CH₄, CF₄, [NH₄]⁺

Mehrfachbindungen: [SO₄]²⁻, [PO₄]³⁻, OPCI₃, SO₂Cl₂

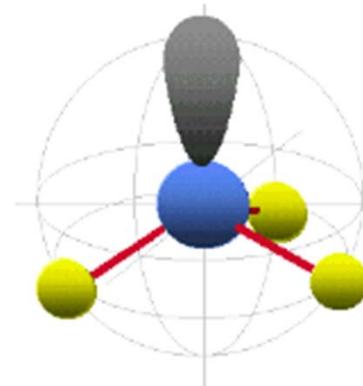


Typ: AX₃E: tetraedrische Elektronenpaaranordnung, trigonal-pyramidale Molekülgestalt

Beispiele:

Einfachbindungen: NH₃, PF₃, AsCl₃

Mehrfachbindungen: [SO₃]²⁻, SOCl₂



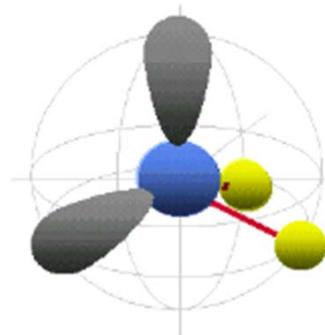


Typ: AX_2E_2 : tetraedrische Elektronenpaaranordnung, gewinkelte Molekülgestalt

Beispiele:

Einfachbindungen: H_2O , H_2S , SF_2

Mehrfachbindungen: $[ClO_2]^-$, XeO_2



AE_5 :

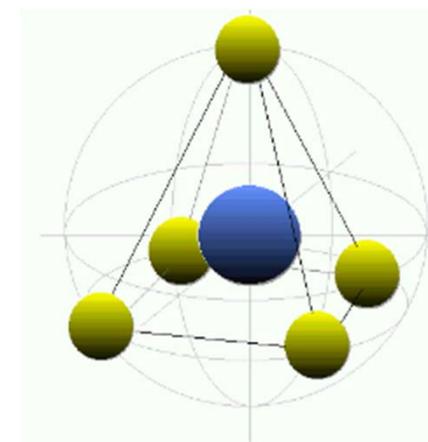
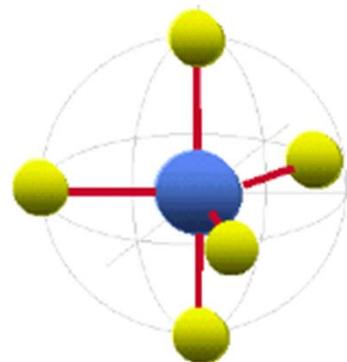
Typ: AX_5 : Molekülgestalt: trigonal-bipyramidal oder quadratisch pyramidal

Beispiele:

Einfachbindungen: PCl_5 , $SbCl_5$, AsF_5 ,

CH_3-PF_4

Mehrfachbindungen: $O=SF_4$



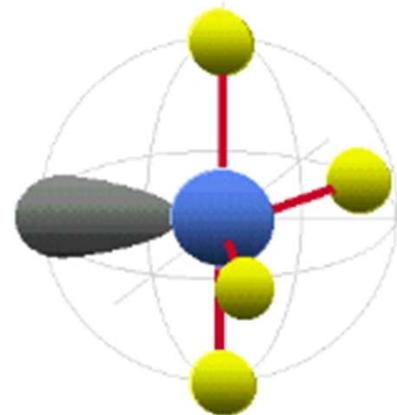


Typ: AX₄E: Elektronenordnung: trigonal-bipyramidal; Molekülgestalt: verzerrt (<120°, 90°)

Beispiele:

Einfachbindungen: SF₄, TeF₄, R₂SeCl₂

Mehrfachbindungen: O₂XeF₂

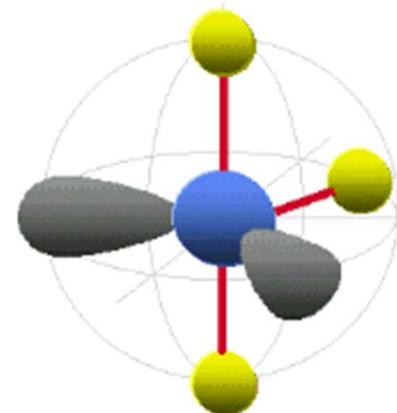


Typ: AX₃E₂: Molekülgestalt: T-förmig (90°)

Beispiele:

Einfachbindungen: ClF₃, BrF₃

Mehrfachbindungen: -



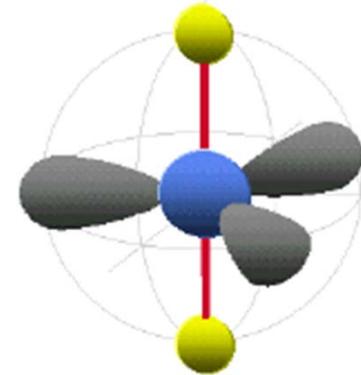


Typ: AX_2E_3 : Molekülgestalt: linear (180°)

Beispiele:

Einfachbindungen: $[ICl_2]^-$, $[I_3]^-$, XeF_2 , $[IF_2]^-$

Mehrfachbindungen: -



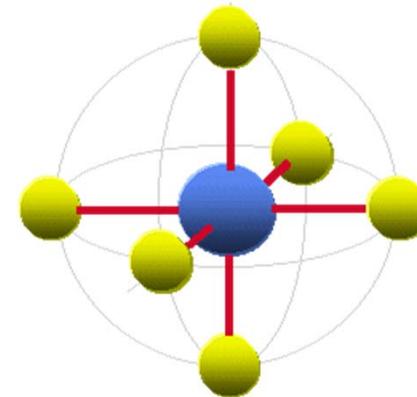
AE_6 : Oktaedrische Elektronenpaaranordnung

Typ: AX_6 : Molekülgestalt: oktaedrisch (90°)

Beispiele:

Einfachbindungen: $[SiF_6]^{2-}$, $[PbCl_6]^{2-}$, SF_6 , $[PF_6]^-$

Mehrfachbindungen: $O=IF_5$





Typ: AX₅E

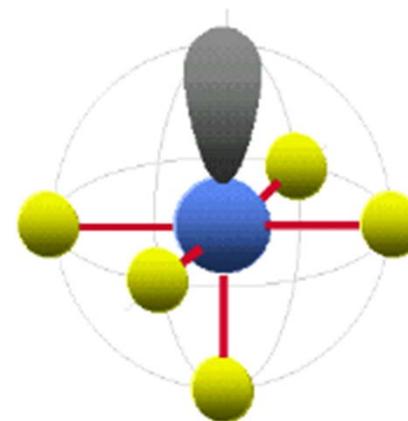
Elektronenanzordnung: oktaedrisch

Molekülgestalt: quadratisch-pyramidal (90°)

Beispiele:

Einfachbindungen: BrF₅, IF₅

Mehrfachbindungen: -



Typ: AX₄E₂

Elektronenanzordnung: oktaedrisch

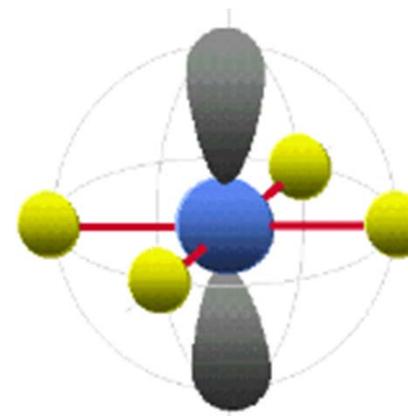
Molekülgestalt: quadratisch-planar (90°)

Trans-Stellung der freien Elektronenpaare

Beispiele:

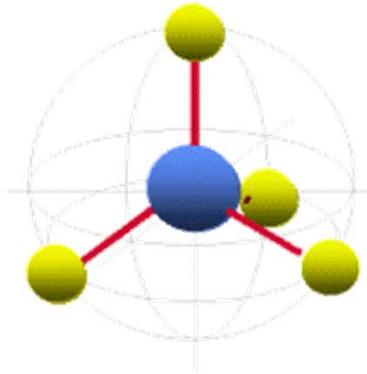
Einfachbindungen: [ICl₄]⁻, XeF₄, [IF₄]⁻

Mehrfachbindungen: -

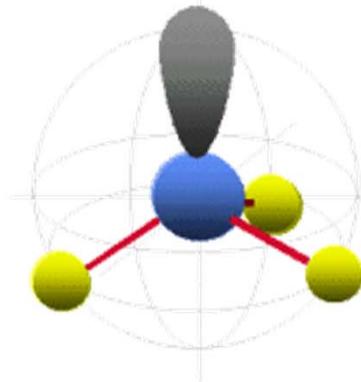




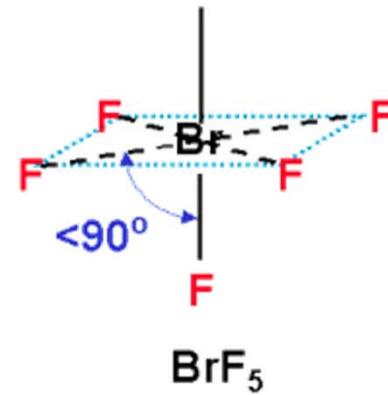
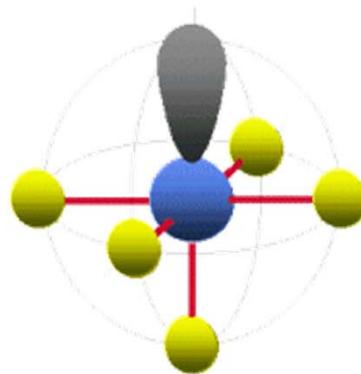
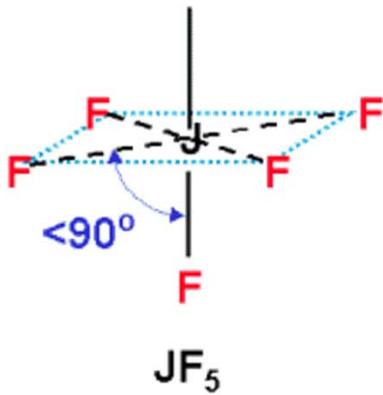
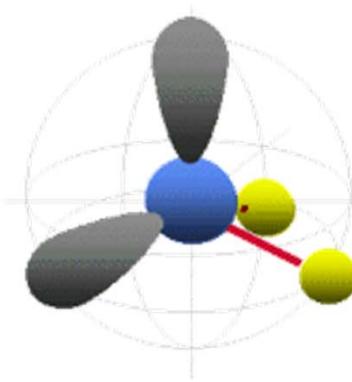
zB.:
Winkel: CH_4
 $109,5^\circ$



NH_3
 $107,3^\circ$



H_2O
 $104,5^\circ$





UNIVERSITÄT ROSTOCK

