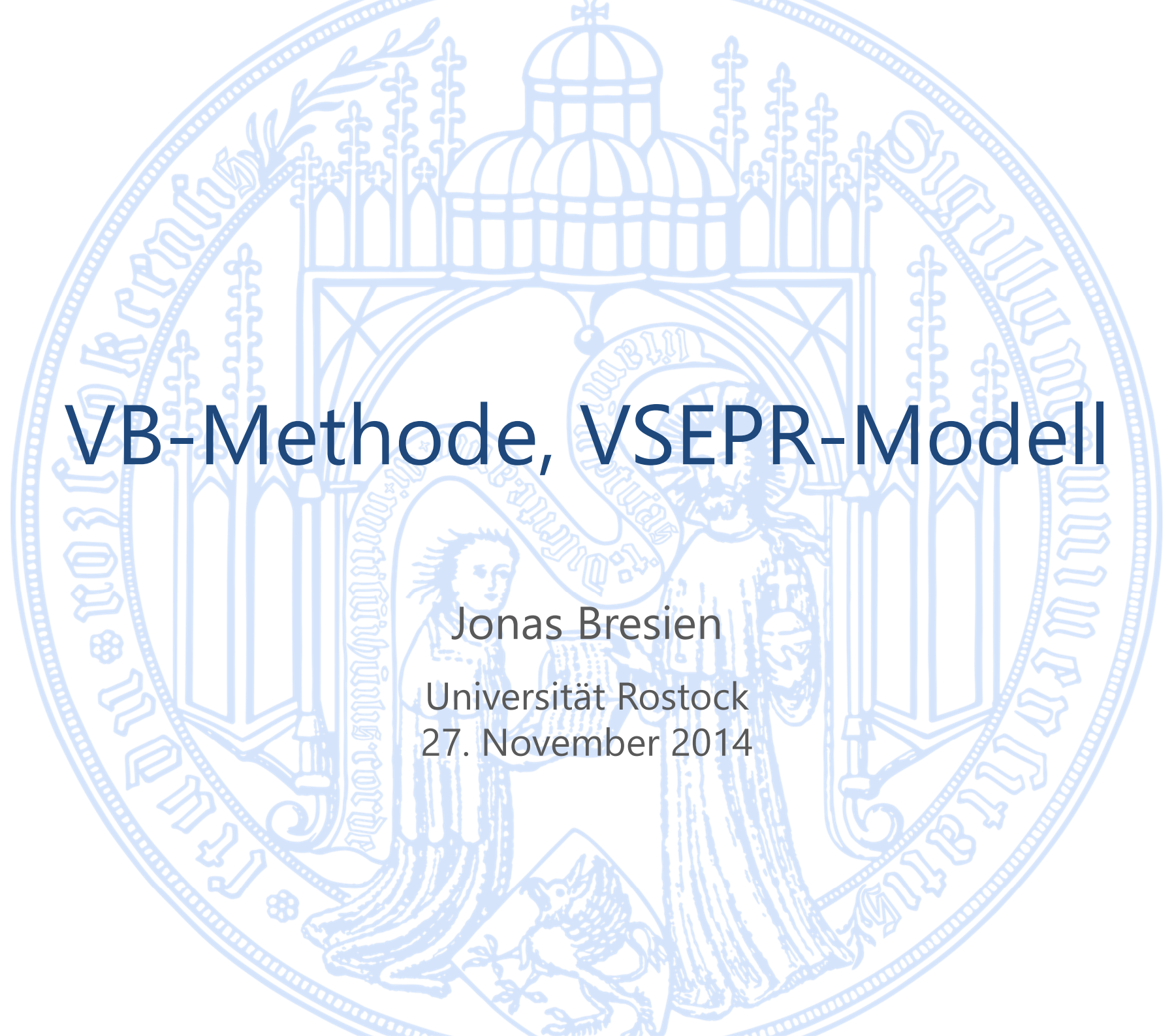


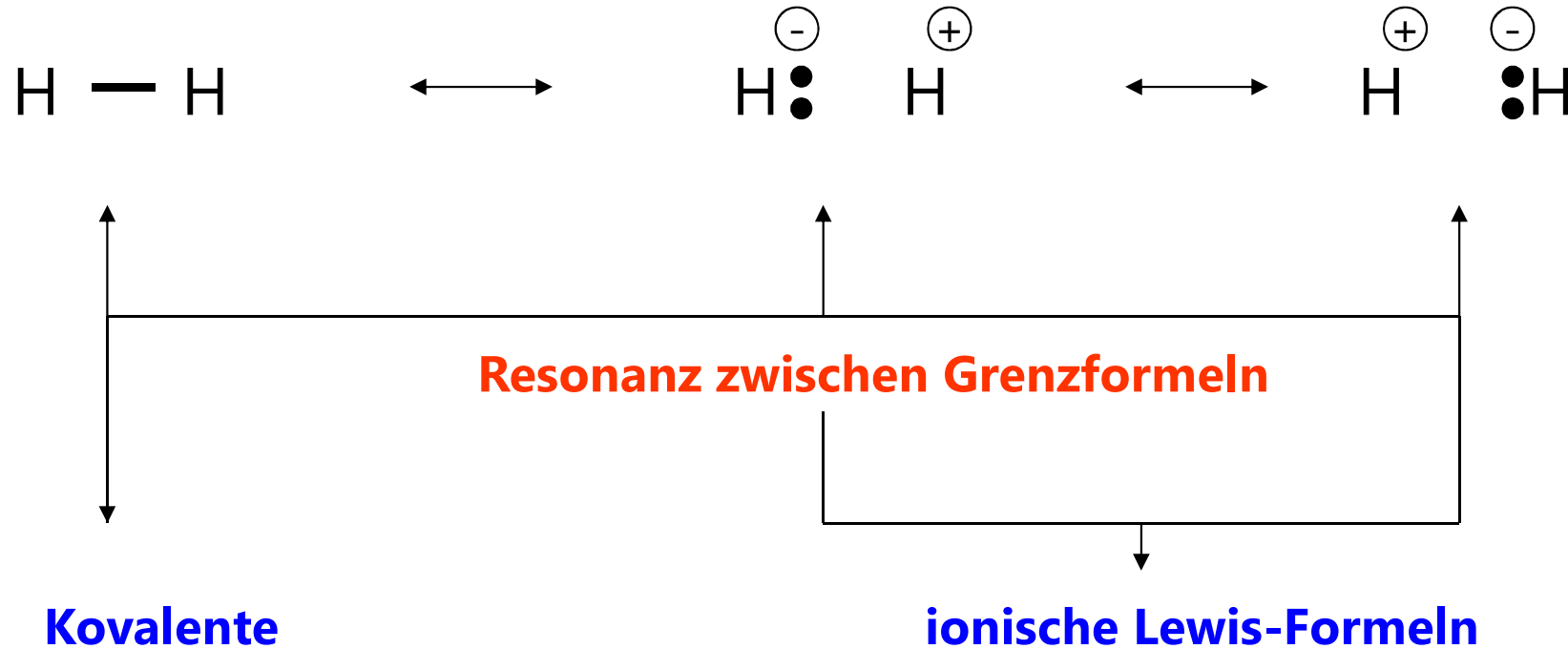
The background of the slide features a large, light blue watermark of the University of Rostock seal. The seal is circular and contains a central shield with a figure holding a book. Above the shield is a building with a dome. The entire seal is surrounded by a circular border with Latin text.

VB-Methode, VSEPR-Modell

Jonas Bresien

Universität Rostock
27. November 2014

Moderne VB-Methode



Lokalisierte Bindungen (durch Strich gekennzeichnet) und **freie Elektronenpaare**

Gewicht jeder Struktur und Energie kann über die Schrödinger-Gleichung berechnet werden



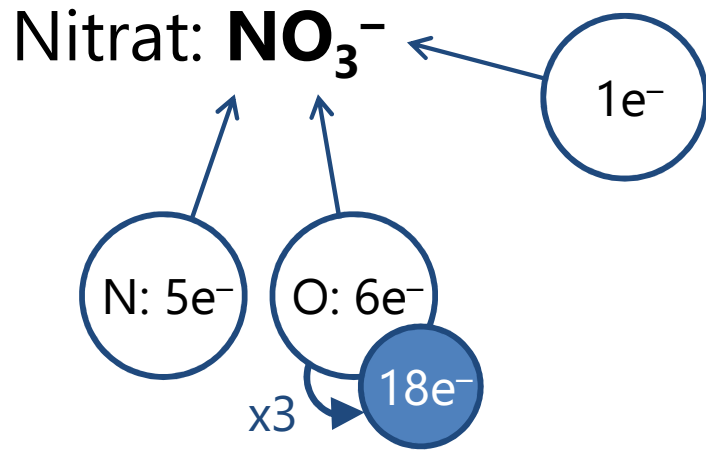
Lewis-Formeln

Regeln zum Aufstellen von Lewis-Formeln

1. **Oktettregel beachten!** (Hauptgruppenelemente, d-Orbitalbeteiligung ist meist nur sehr gering!)
2. **Multiplizität muss in einem Resonanzschema gleich sein!**
3. **Polarität der Bindung unter Verwendung der Elektronegativität untersuchen!**
(Entscheidung treffen ionische oder kovalente Bindung oder Resonanz, im Zweifelsfall immer Resonanz!)
4. **Anzahl der Bindungen sollte maximal sein!** (Resonanz bei Mehrfachbindungen beachten)
5. **Anzahl der Formalladungen sollte minimal sein!**
6. **Untersuchen, ob Formalladung im Einklang mit der Polarität einer Bindung steht!**
(Vorsicht: es gibt Ausnahmen z.B. Borverbindungen; Problem Formalladung *versus* Partialladung)



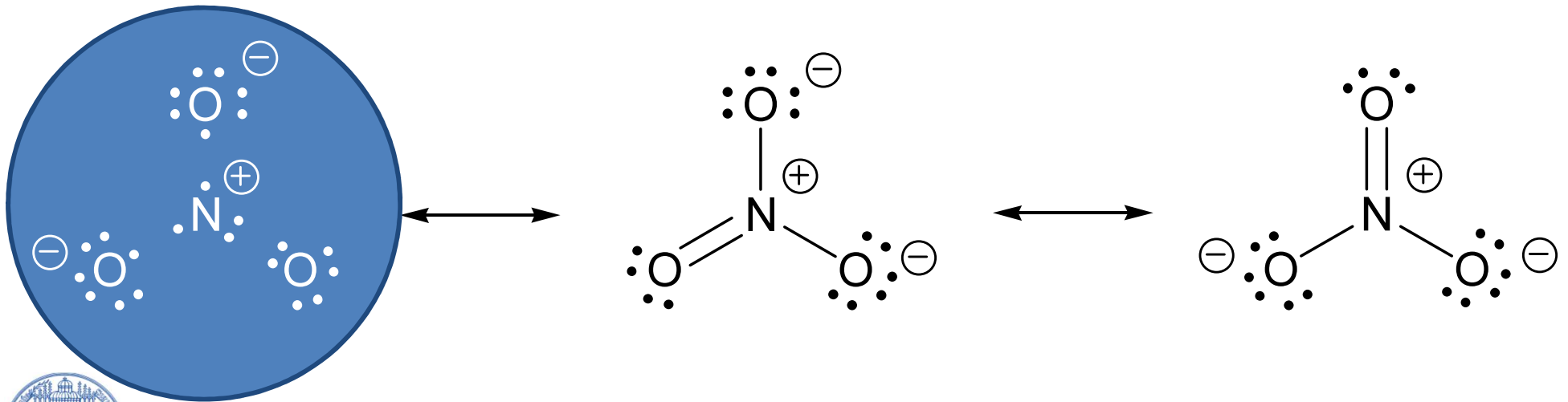
Beispiel



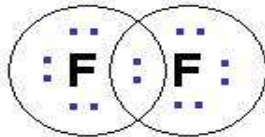
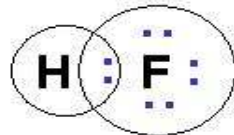
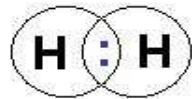
Valenzelektronen zählen:
 $5 e^- + 18 e^- + 1 e^- = 24 e^-$

12 e⁻
Paare

Oktettregel beachten!!



Elektronegativität



Bindungspolarität

Elektronegativität ist ein Maß für die Fähigkeit eines Atoms, die Elektronen in einem Molekül an sich zu ziehen

↓ für kJ/mol

$$E_{D(\text{H-F})} = \frac{1}{2} (E_{D(\text{H-H})} + E_{D(\text{F-F})}) + 96 (\chi_{\text{F}} - \chi_{\text{H}})^2$$

$$E_{D(\text{A-B})} = \frac{1}{2} (E_{D(\text{A-A})} + E_{D(\text{B-B})}) + 96 (\chi_{\text{B}} - \chi_{\text{A}})^2$$

Effektive
Kernladungen:

H 1.0

F 5.2

Elektro-

negativitäten (χ):

H 2.2

F 4.0

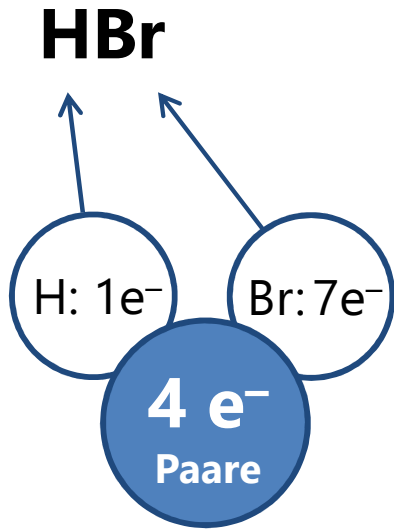
Abweichung
entspricht
ionischem Anteil



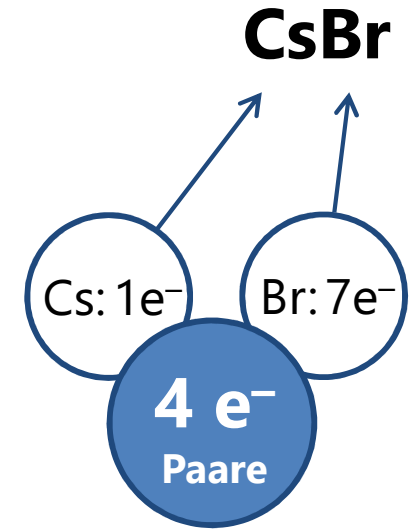
Linus Pauling



Elektronegativität



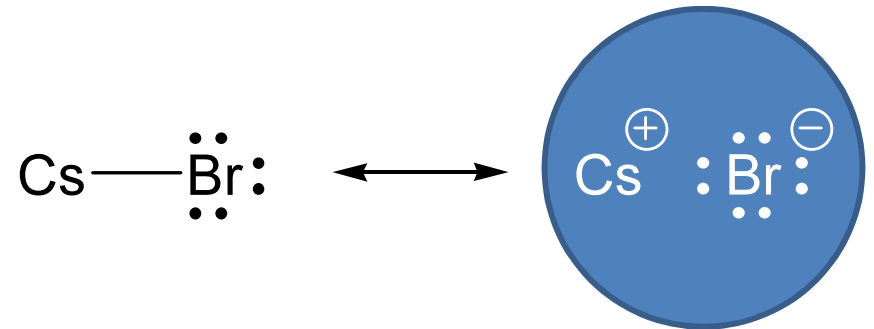
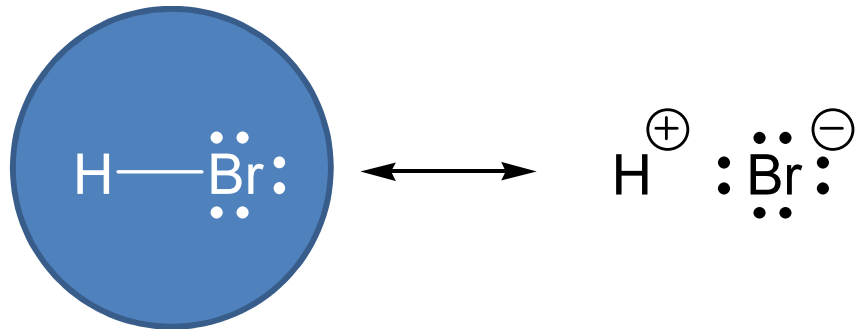
vs.



Bindungspolarität?

$$\chi_{\text{H}} = 2.1 \quad \chi_{\text{Br}} = 2.8$$

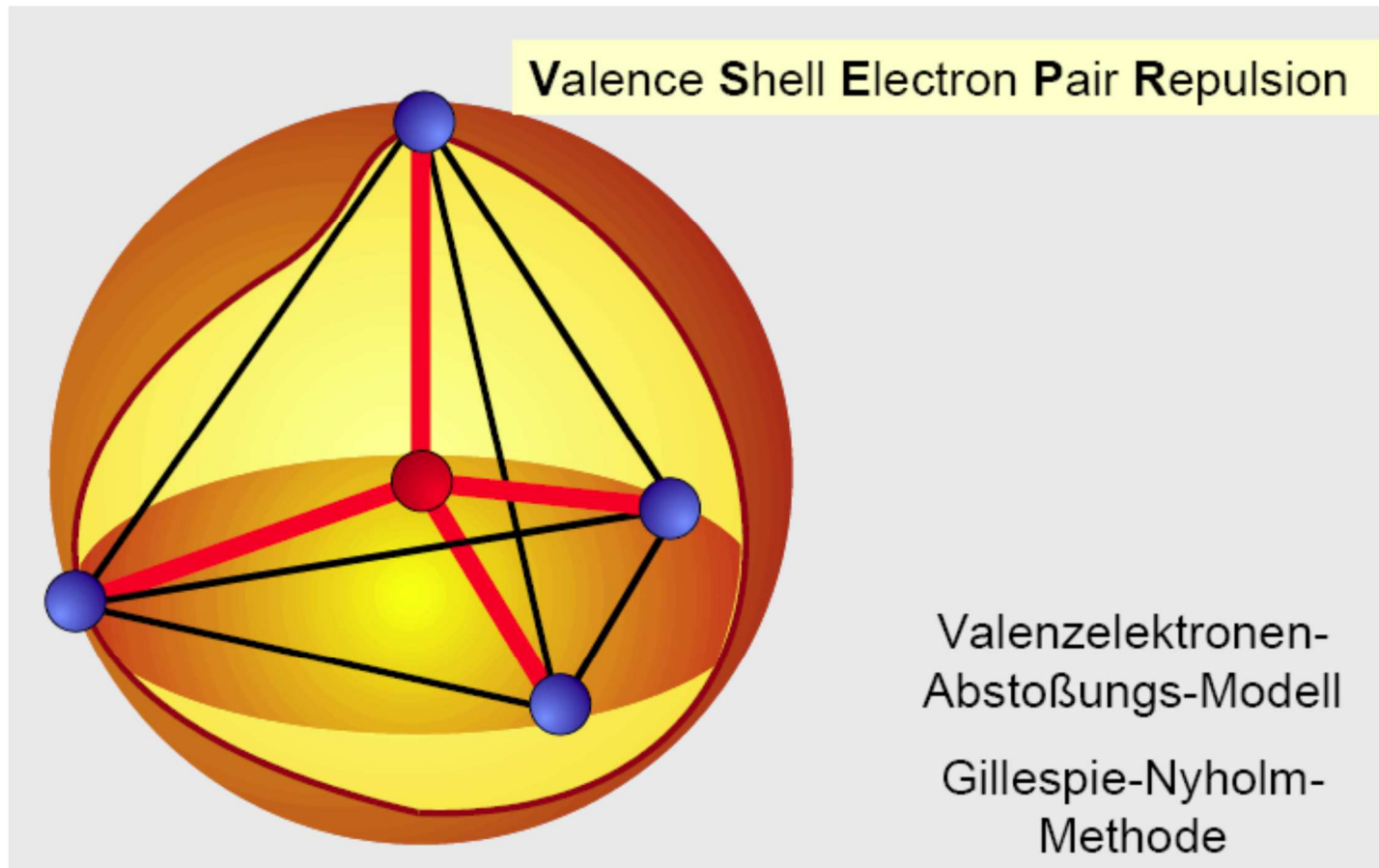
$$\chi_{\text{Cs}} = 0.7$$



Übung



Das VSEPR-Modell



Das VSEPR-Modell

Valence Shell Electron Pair Repulsion

1940 Sidgewick und Powell - 1950er Lennard-Jones - 1960er Gillespie und Nyholm

- (i) **Elektronen stoßen sich gegenseitig ab** (Coulomb Gesetz; freies Elektronenpaar benötigt mehr Platz als Ligand; Dreifachbindung benötigt mehr Platz als Doppelbindung, die wiederum benötigt mehr Platz als Einfachbindung; elektropositiver Ligand benötigt mehr Platz als elektronegativer Ligand)
- (ii) **Elektronen mit unterschiedlichem Spin können sich trotz elektrostatischer Abstoßung im gleichen Orbital aufhalten**
- (iii) **Elektronen mit gleichem Spin können sich nicht im gleichen Orbital aufhalten** (Pauli-Prinzip)

Energetisch günstigste Anordnung der Bindungselektronen und freien Elektronenpaare (unter Berücksichtigung von i-iii) bestimmt die räumliche Struktur des Systems AB_xE_y (A = Zentralatom, B = Ligand (bindendes Elektronenpaar), E = freies Elektronenpaar („Pseudoatom“)).



Das Wesentliche

- 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



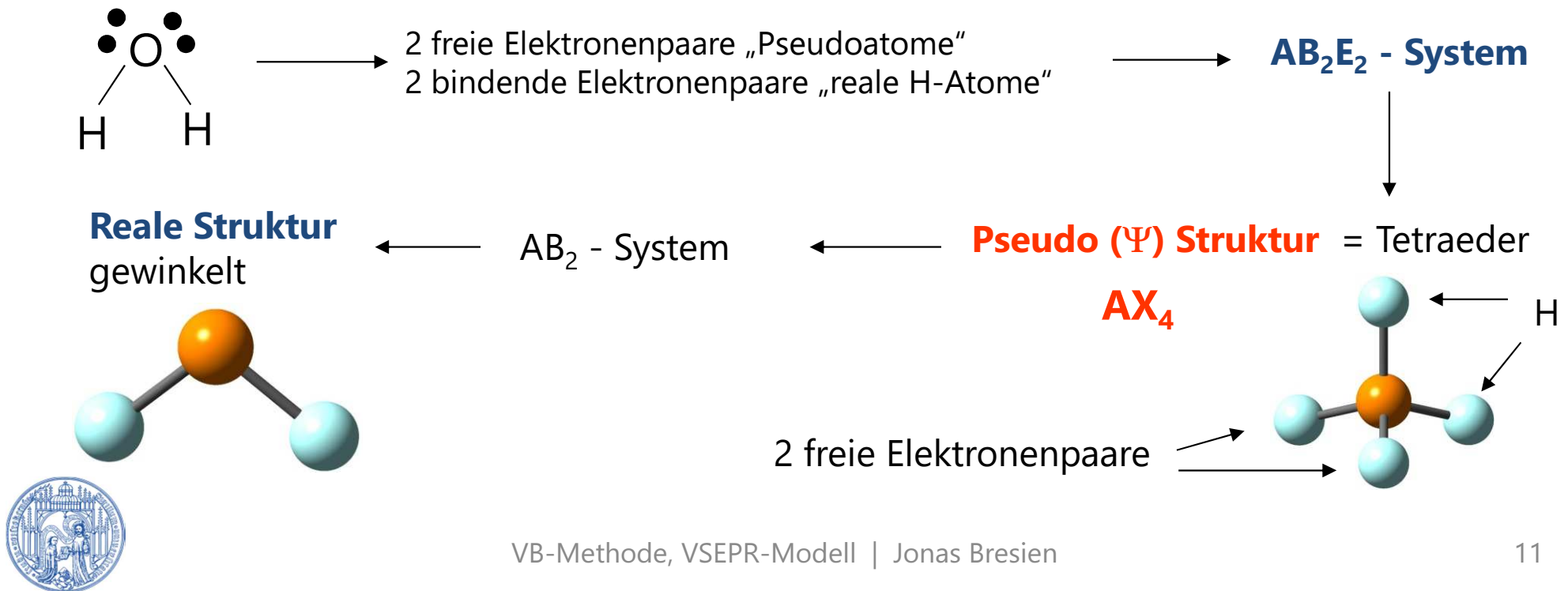
Herangehensweise

1. Valenzstrichformel aufstellen

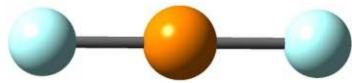
2. **Valenzelektronenzahl** in der unmittelbaren Umgebung des mehrbindigen zentralen Atoms bestimmen, AB_nE_m System festlegen,

3. **n B und m E** auf einer gedachten Kugeloberfläche entsprechend minimaler Abstoßung (i-iii berücksichtigen s.o.) aufteilen, Pseudo (Ψ) Struktur von AX_{n+m} ($X = B, E$) bestimmen

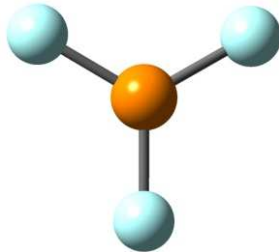
4. **Betrachtung** des verbleibenden AB_n Systems ergibt die reale Molekülstruktur



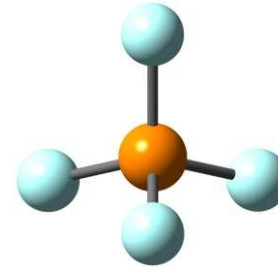
Molekülstrukturen



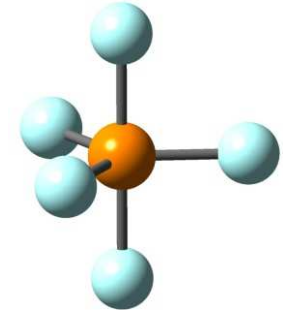
linear
 AB_2, AB_2E_3, AB_2E_4



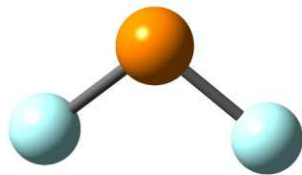
trigonal planar
 AB_3



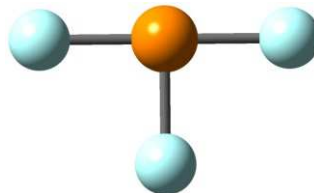
tetraedrisch
 AB_4



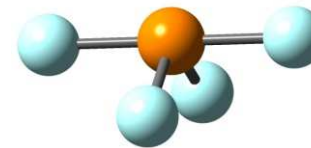
trigonal bipyramidal
 AB_5



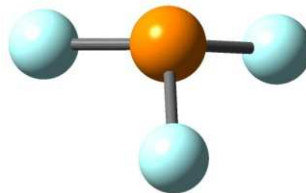
gewinkelt
 $AB_2E, AB_2E_2,$



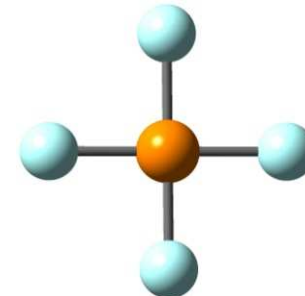
T-förmig
 AB_3E_2



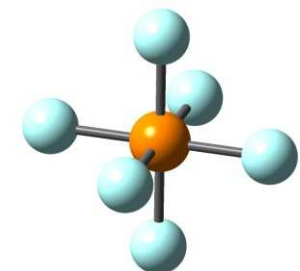
bisphenoidal
 AB_4E_1



trigonal pyramidal
 AB_3E_1



Quadratisch planar
 AB_4E_2



oktaedrisch
 AB_6, AB_6E_1



VSEPR-Beispiele

Aufenthalts- räume	Einsame Elektronen-paare	Molekültyp	Räumliche Anordnung der Liganden	Beispiele
2	0	AB_2	linear	BeH_2 , CO_2
3	0	AB_3	trigonal eben	BF_3 , NO_3^-
3	1	AB_2E	V-förmig	NO_2 , SO_2
4	0	AB_4	tetraedrisch	CH_4 , SO_4^{2-}
4	1	AB_3E	trigonal pyramidal	NH_3 , SO_3^{2-}
4	2	AB_2E_2	V-förmig	H_2O , H_2S
5	0	AB_5	trigonal bipyramidal	PF_5 , PCl_5
5	1	AB_4E_1	wippenförmig	SF_4 , SeF_4
5	2	AB_3E_2	T-förmig	ClF_3 , BrF_3
5	3	AB_2E_3	linear	ICl_2^- , I_3^-
6	0	AB_6	oktaedrisch	SF_6 , PCl_6^-
6	1	AB_5E_1	quadratisch pyramidal	BrF_5 , IF_5
6	2	AB_4E_2	quadratisch eben	XeF_4 , ICl_4^-



Zusatz: CO₂ im VB-Bild

