

# 11072a Der räumliche Bau von Kohlenwasserstoffen - das Elektronenpaarabstoßungsmodell

## Bestimmung von Bindungswinkeln mit Hilfe des Programmes „ChemSketch“

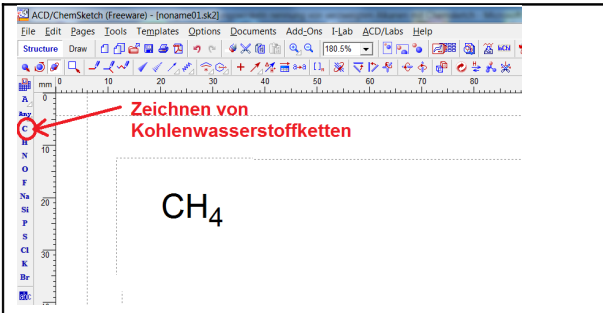
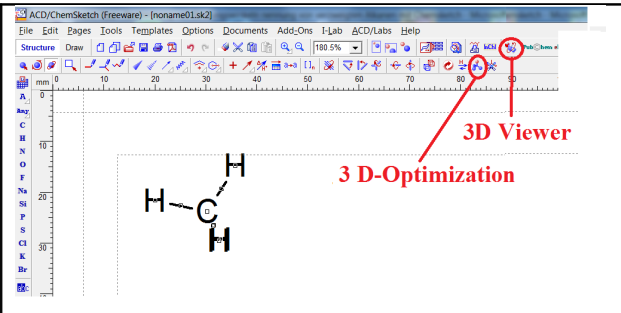
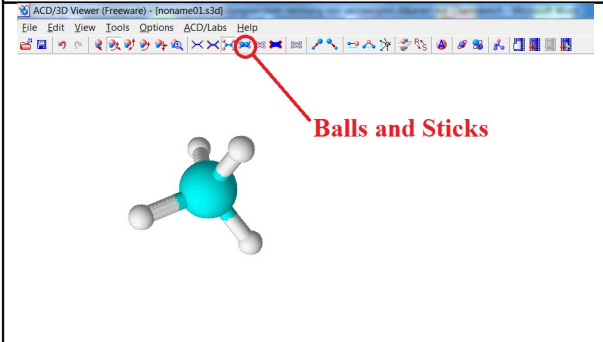
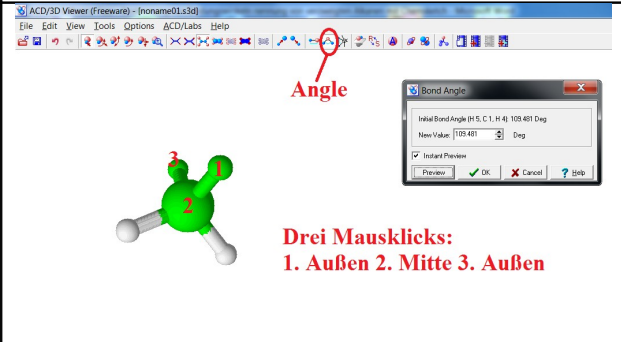
Mit Hilfe des Programmes „ChemSketch“ lässt sich der Bindungswinkel von Molekülen bestimmen.

**Vorbereitung:** Zur Lösung der Aufgabe ist der Download des Programms „ChemSketch“ notwendig. Die Download-Seite des Herstellers ist:

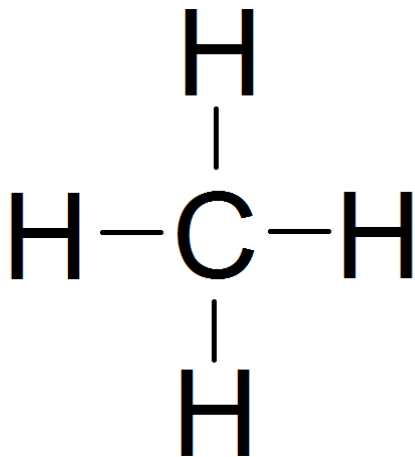
<http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html>

Das Programm lässt sich nach kurzer Registrierung recht einfach installieren. Mit dem chemischen Editor ChemSketch genügt je ein Mausklick, um zum Beispiel  $\text{CH}_4$ -Moleküle zu zeichnen. Verbindet man zwei davon, erkennt das Programm von selbst, dass sich die Zusammensetzung von Methan ( $2 \text{CH}_4$ ) in Ethan ( $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$ ) ändern muss ....

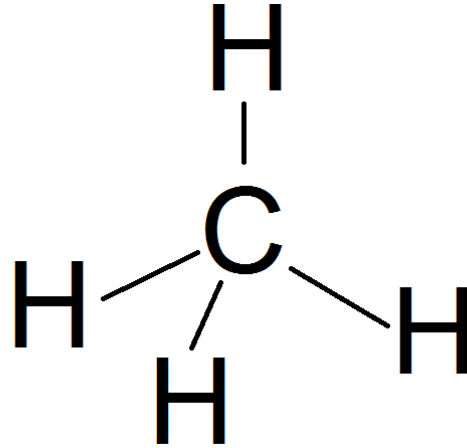
### Bsp: Bestimmung des Bindungswinkels im Methan!

 <p>Zeichnen von Kohlenwasserstoffketten</p>	 <p>3D Viewer</p> <p>3 D-Optimization</p>
1. Methanmolekül zeichnen	2. a) Button für „3 D-Optimization“ drücken und dann b) „3D Viewer“ starten
 <p>Balls and Sticks</p>	 <p>Angle</p> <p>Drei Mausklicks: 1. Außen 2. Mitte 3. Außen</p>
3. a) „Balls and Sticks“-Button drücken um die Ansicht zu optimieren	4. a) „Angle“-Button drücken um b) den zu bestimmenden Bindungswinkel mit drei Mausklicks markieren, wobei das zentrale Atom mit dem zweiten Klick zu treffen ist. Der Winkel wird grün markiert und nach dem dritten Mausklick angezeigt

## Beispiel 1: Das Methanmolekül



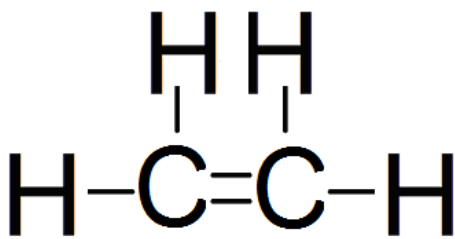
ein einfache  
Lewis-Formel für das  
Methan CH<sub>4</sub>



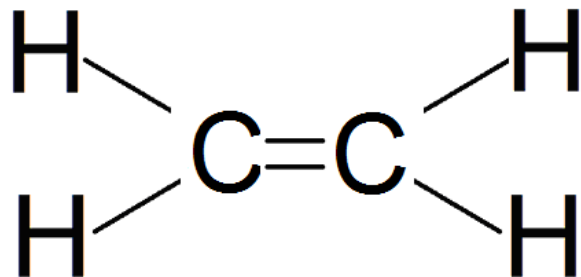
eine realistischere Version,  
die die tatsächliche  
Molekülgeometrie  
berücksichtigt

Die 4 Elektronenpaare des Methans, die sich **maximal abstoßen**, ordnen sich im Tetraederwinkel von ca. 109.5° an, der größer ist als ist größer als der 90° Winkel!

## Beispiel 2: Das Ethen-Molekül



ein einfache  
Lewis-Formel für das  
Ethen C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>



eine realistischere Version,  
die die tatsächliche  
Molekülgeometrie  
berücksichtigt

Mehrfachbindungen wirken sich auf die Molekülgeometrie wie Einfachbindungen aus, woraus sich für das C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-Molekül Bindungswinkel von 120° ergeben.




## 11072a Der räumliche Bau von Kohlenwasserstoffen - das Elektronenpaarabstoßungsmodell

Das **EPA-Modell** (Elektronenpaarabstoßungsmodell) oder **VSEPR-Modell** (VSEPR ist die Abkürzung für *Valence shell electron pair repulsion*, deutsch *Valenzschalen-Elektronenpaar-Abstoßung*) führt die räumliche Gestalt eines [Moleküls](#) auf die abstoßenden Kräfte zwischen den [Elektronenpaaren](#) der [Valenzschale](#) zurück.

Das Modell wurde von [Ronald Gillespie](#) und [Ronald Nyholm](#) entwickelt und wird deshalb auch **Gillespie-Nyholm-Theorie** genannt

### Regeln des Elektronenpaarabstoßungsmodells

**1. Grundaussage:** In Molekülen des Typs  $AX_n$  ordnen sich die Außen-Elektronenpaare des [Zentralatoms](#) (A) so an, dass der Abstand zwischen ihnen möglichst groß wird.

Zahl der Außenelektronenpaare um das Zentralatom	Bindungswinkel	Geometrie
2	$180^\circ$	 linear
3	$120^\circ$	 trigonal planar
4	$109,5^\circ$	 tetraedrisch

### 2. Bestimmung der Gesamtzahl der Außen-Elektronenpaare um das Zentralatom:

2.1. Man zeichnet die Lewis-Formel des Moleküls und zählt die bindenden Elektronenpaare und die freien Elektronenpaare, welche das Zentralatom umgeben

2.2 Mehrfachbindungen (beanspruchen etwas soviel Raum wie eine Einfachbindung) werden bei der Bestimmung der Zahl der umgebenden Elektronenpaare als solche gezählt.