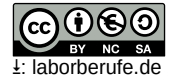


# Der Algorithmus zur Ermittlung der Strukturformel für Moleküle der Form $AB_y^{z+/-}$



**Problem:** A sei das **Zentralatom** eines Moleküls, an das alle anderen Atome (B) direkt gebunden sind (Bsp:  $CO_2$ ,  $NO_3^-$ ,  $H_3O^+$ ,  $OC(Cl)_2$ ). Stelle die gültige Strukturformel auf.

**Wikipedia:** „Ein **Algorithmus** ist eine eindeutige Handlungsvorschrift zur Lösung eines Problems oder einer Klasse von Problemen. Algorithmen bestehen aus endlich vielen, wohldefinierten Einzelschritten....“

**Schritt 1:** Berechne die Summe der Valenzelektronen der Atome. Berücksichtige dabei auch die Ladungen! Ermittle so die Anzahl der zu zeichnenden  $e^-$ -Paare ( $\cong$  „Striche“).

Beispiele:  $CO_2$ :  $4 + 2 * 6 = 16 e^- (\cong 8 \text{ „Striche“ } (e^- \text{-Paare}))$

$NO_3^-$ :  $5 + 3 * 6 + 1 = 24 e^- (12 e^- \text{-Paare})$

$H_3O^+$ :

Merke:

**Schritt 2:** Alle anhängenden Atome mit vorerst nur einer Elektronenpaarbindung an A zeichnen.

**Schritt 3:** Die verbleibenden Elektronen so als *freie* oder *bindende*  $e^-$ -Paare unterbringen, dass die Edelgasregel für alle Atome gerade erfüllt ist.

Edelgasregel:

**Schritt 4:** Ermittle die Ladungen jedes Einzelatoms. Zähle dafür ab, wie viel Elektronen dem Atom gehören und vergleiche mit der Hauptgruppennummer im PSE. Jedes überschüssige Elektron führt zu einer negativen Ladung „-1“, jedes fehlende Elektron zu einer positiven Ladung „+1“. Weicht die Ladung von 0 ab, so notiere sie am Atom.

**Anmerkung 1:** Wenn unter Beibehaltung der Edelgasregel möglich, so vermeide Varianten, bei denen der elektronegativere Bindungspartner eine positive Formalladung trägt!

**Anmerkung 2:** Treten große direkt benachbarte Ladungsunterschiede ( $\geq 2$ ) auf: Da ein Bindungspartner ab der dritten Periode die Edelgasregel überschreiten kann, ist es möglich Elektronenpaare von negativ geladenen Atom zum positiv geladenen Atom zurückzuklappen (**Rückbindung**). Das Ausmaß der Rückbindung ist umstritten. Bsp. für Rückbindungen: Phosphat-Ion ( $PO_4^{3-}$ ), Sulfat-Ion ( $SO_4^{2-}$ ) - siehe Bsp. unten-

**Aufgabe 1:** Ermitteln Sie die Strukturformeln:

- a) **Schwierigkeitsgrad I:**  $H_2S$ ,  $CH_4$ ,  $NH_3$ ,  $NH_4^+$  (Ammonium-Ion),  $BO_3^{3-}$  (Orthoborat-Ion),  $CH_2O$ ,  $Cl_2O$
- b) **Schwierigkeitsgrad II:**  $CO$ ,  $NO_3^-$  (Nitrat-Ion),  $SO_4^{2-}$  (Sulfat-Ion),  $PO_4^{3-}$  (Phosphat-Ion),  $O_3$  (Ozon)
- c) **Schwierigkeitsgrad III:**  $NO$ ,  $NO_2$ ,  $N_3^-$  (Azid-Ion),  $ClO_3^-$  (Chlorat-Ion),  $ClO_4^-$  (Perchlorat-Ion)