

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^+ , $OC\bar{C}l_2$). 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 (≥ 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)