Vs. 2024-03-10

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

CC BY NC SA
↓: laborberufe.de

Problem: A sei das **Zentralatom** eines Moleküls, an das alle anderen Atome (B) direkt gebunden sind (Bsp: CO_2, NO_3^-, H_3O^+,$OCCl_2$). 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 (≙ „Striche“).

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

NO_3^-: $5 + 3*6 + 1 = 24\ e^-$ (12 e^--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. *[Gibt es hierbei mehreren Möglichkeiten: vgl. Anmerkung. 1 unten]*

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 (z.B. ⊖ oder ⊕)

Anmerkung 1: Ziehe Varianten vor, bei denen O oder N-Atome (elektronegative Bindungspartner) viele Elektronen besitzen.

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: N_2, 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)

MUSTERLÖSUNGEN