

Übungsaufgaben zum Themenkomplex „Strukturen einfacher kovalenter Moleküle“

1) Zeichnen Sie die Lewis-Strukturformeln folgender Moleküle bzw. Ionen inklusive einsamer Elektronenpaare und Formalladungen. Welche der Teilchen sind isoelektronisch zueinander ? Welche sind Radikale ? Welche besitzen mehrere mesomere Grenzformulierungen ?

- | | | |
|-------------------|--------------------------|--------------------------|
| • NO_3^- | • N_2O | • NO |
| • O_3 | • C_3O_2 | • N_2O_4 |
| • NO_2^- | • MnO_4^- | • NO_2 |
| • CO | • SO_4^{2-} | • O_2 |
| • N_2 | • CO_3^{2-} | • OF_2 |

2) Zeichnen Sie für das Perchlorat-Ion ClO_4^- eine All-Oktettstruktur und eine Struktur mit möglichst wenig Ladungstrennung! Ordnen Sie in beiden Fällen allen Atomen die formale Ladungszahl zu!

3) Geben Sie für Trimethylaminoxid Me_3NO und Trimethylphosphanoxid Me_3PO die All-Oktettformeln unter Angabe der formalen Ladungszahlen aller Atome an, wenn diese von 0 verschieden sind! Sind bei diesen beiden Verbindungen mesomere Grenzstrukturen relevant, in denen die Ladungstrennung minimiert ist ? (Me = H_3C)

4) Zeichnen Sie die Überlappung folgender Atomorbitale und bestimmen Sie, ob daraus bindende, nichtbindende oder antibindende Molekülorbitale entstehen (wählen Sie dazu ein willkürliches Koordinatensystem, die Vorzeichen der Wellenfunktionen können Sie frei wählen).

- | | |
|------------------------------------|----------------------------------|
| • s- und p_x -Orbital | • s- und p_y -Orbital |
| • s- und p_z -Orbital | • p_x - und p_x -Orbital |
| • p_x - und p_y -Orbital | • p_y - und p_z -Orbital |
| • p_x und $d_{x^2-y^2}$ -Orbital | • p_x - und d_{xy} -Orbital |
| • p_x und d_{z^2} -Orbital | • p_z - und d_{z^2} -Orbital |

5) Schließen Sie anhand eines MO-Schemas auf die Existenz oder Nichtexistenz der folgenden Teilchen: H_2 , He_2 , Li_2 , CO , NO , F_2 , Ne_2 ! Wie groß ist jeweils die Bindungsordnung ? Welche dieser Teilchen erfüllt die Oktettregel ?

6) Die energetische Reihenfolge der aus den p-Atomorbitalen resultierenden σ - und π -Orbitale zweiatomiger Moleküle war lange Zeit umstritten. Der Befund, dass das B_2 -Teilchen paramagnetisch ist hat hier Klarheit verschafft. Warum ? (Informieren Sie sich in einem Lehrbuch, was der Begriff paramagnetisch in diesem Zusammenhang bedeutet).

7) Erwarten Sie aufgrund der Elektronegativitätsdifferenzen bei den folgenden Verbindungen eher einen kovalenten oder einen ionischen Aufbau ? Wenn die Verbindung kovalent ist: Besitzt Sie ein Dipolmoment oder nicht ?

- | | |
|------------------|-------------------|
| • OF_2 | • BrCl |
| • GaH_3 | • NaH |
| • SnO_2 | • AlF_3 |
| • ClF_3 | • SnBr_4 |
| • CCl_4 | • CHCl_3 |

8) Welche Geometrie gemäß VSEPR-Regeln erwarten Sie für die folgenden Moleküle ?

- | | |
|------------------|-------------------|
| • ClF_3 | • XeF_6 |
| • BF_3 | • SF_6 |
| • ClF_5 | • XeOF_4 |
| • IF_7 | • SF_4 |
| • CCl_4 | • BeCl_2 |

9) Betrachten Sie Elementwasserstoffverbindungen der 6. Hauptgruppe:

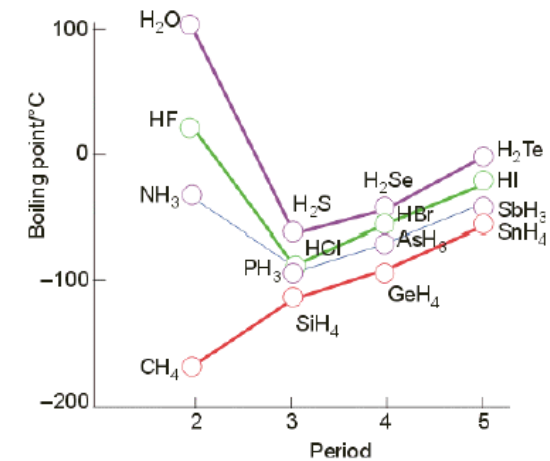
- Welchen Bindungswinkel H-O-H erwarten Sie aufgrund der Hybridisierung des zentralen O-Atoms ?

- Welche Geometrie gemäß VSEPR erwarten Sie für das Wassermolekül H_2O ?
- Wie lautet der ideale Winkel H-O-H ? Ist der Winkel tatsächlich kleiner oder größer als der ideale Winkel ? Warum ?
- Stellen Sie dieselben Überlegungen für das H_2S -Molekül an. Vergleichen Sie die Bindungswinkel H-O-H und H-S-H und erklären Sie den Unterschied !
- In den Molekülen H_2Se und H_2Te beträgt der Bindungswinkel 90° . Erklären Sie diesen Befund ! Welche Schlußfolgerungen kann man ziehen ?

10) Eine Möglichkeit von Bor-Verbindungen, ihren Elektronenmangel auszugleichen, ist die Bildung von 2-Elektronen-3-Zentren-Bindungen.

- Zeichnen Sie eine räumlich korrekte Struktur von Diboran. Welche Geometrie ist um das Bor-Zentrum gemäß VSEPR verwirklicht ?
- Betrachten Sie das Molekül BF_3 . Zeichnen Sie die Lewis-Formel inklusive freier Elektronenpaare. Welche Möglichkeiten besitzt BF_3 prinzipiell um seinen Elektronenmangel auszugleichen (2 Möglichkeiten). Sie werfen BF_3 in Ammoniak NH_3 . Welche zusätzliche Möglichkeit besteht nun ?
- Das Element Beryllium in der 2. Hauptgruppe ist in einer ähnlich mißlichen Lage. Wie könnte Beryllium in der kovalenten Verbindung BeCl_2 sein Elektronenoktett erreichen ? Welche Geometrie besitzt die Umgebung des Berylliums hier ?

- 11) Welche Geometrie gemäß VSEPR besitzt die Verbindung PCl_3F_2 ?
 Es gibt mehrere Möglichkeiten, wie die Halogenidsubstituenten zueinander stehen können (sog. Isomerie). Finden Sie alle Möglichkeiten und zeichnen Sie die räumlich korrekten Lewis-Formeln !
 Es zeigt sich, dass sich die Isomere schnell ineinander umwandeln können. Schlagen Sie einen Mechanismus hierfür vor (Bedenken Sie, dass Lewis-Formeln starre Moleküle suggerieren, kovalente Einfachbindungen jedoch für gewöhnlich hochflexibel bezüglich Winkeländerungen und Bindungslängenänderungen sind).
- 12) In folgender Abbildung sehen Sie die Siedepunkte einiger Elementwasserstoffverbindungen aufgetragen.



Diskutieren Sie den Verlauf der Siedepunkte, indem Sie den Einfluss von van-der-Waals-Wechselwirkungen und Wasserstoffbrückenbindungen berücksichtigen. Betrachten Sie dabei sowohl den Verlauf innerhalb einer Gruppe als auch innerhalb einer Periode !