

Vorlesung 3

Bindungen in Organischen Molekülen

Ionenbindung-Kovalente Bindung

Vollhardt, 3. Aufl., S. 6/7, 4. Aufl., S. 7-9; Hart, S. 4-10; Buddrus, S. 2-4

Regeln zur Erstellung von Lewis-Formeln

Vollhardt, 3. Aufl., S. 8-11, 4. Aufl., S. 9-13

- 1) Zählen der verfügbaren Valenzelektronen (eventuelle Ladung berücksichtigen).
- 2) Verteilen der Elektronen, so dass Edelgas-Konfiguration erreicht wird.
- 3) Ermittlung der Formalladungen.

Übung A3-1. Zeichnen Sie die Strukturen von Molekülen der Zusammensetzung C_2H_3N mit All-Oktett-Lewis-Formeln (7 Möglichkeiten!). Bei einigen davon treten Formel-Ladungen auf. Diese werden wir später genauer betrachten.

Molekül-Geometrie nach der VSEPR-Theorie (Buddrus S. 12-15)

Die im ersten Semester kennengelernte Valence Shell Electron Pair Repulsion Theorie können Sie auch zur Ermittlung der Bindungswinkel in Organischen Molekülen verwenden.

- 1) Bestimmen Sie die Summe aus der Zahl der an das Zentralatom gebundenen Atome und der Zahl der freien Elektronenpaare am Zentralatom.
- 2) Ordnen Sie die an das Zentralatom gebundene Atome sowie die freien Elektronenpaare auf einer Kugelfläche um das Zentralatom so an, dass sie maximalen Abstand voneinander haben.

$n = 2$:

$n = 3$:

$n = 4$:

$n = 5$:

$n = 6$:

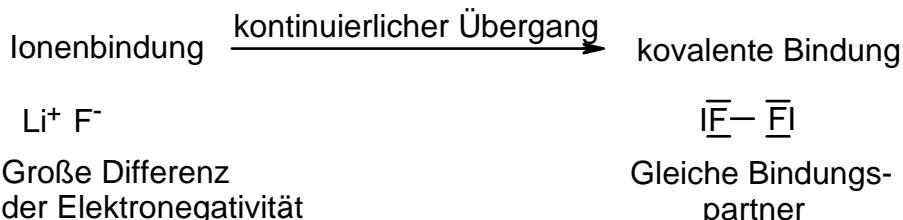
Ohne Orbitalmodell können Sie damit die Struktur zahlreicher organischer Moleküle ableiten.

Übung A3-2. Leiten Sie mit Hilfe des VSEPR-Modells die ungefähren Bindungswinkel in folgenden Substanzen ab:



Polare kovalente Bindung (Video, Solomons).

Vollhardt, 3. Aufl., S. 26/27, 4. Aufl., S. 14-16; Hart, S. 11-15; Buddrus, S. 6-9

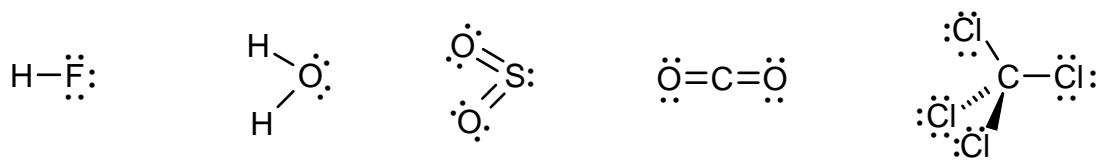


Die Elektronegativität ist ein Maß dafür, wie stark ein Element in einer kovalenten Bindung Elektronen anzieht. Anders als Ionisierungspotential und Elektronenaffinität ist sie nicht eindeutig definiert.

Merkregel für Elektronegativitäten in der ersten Langperiode (addiere jeweils 0.5 Einheiten).

Li	Be	B	C	N	O	F
1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0

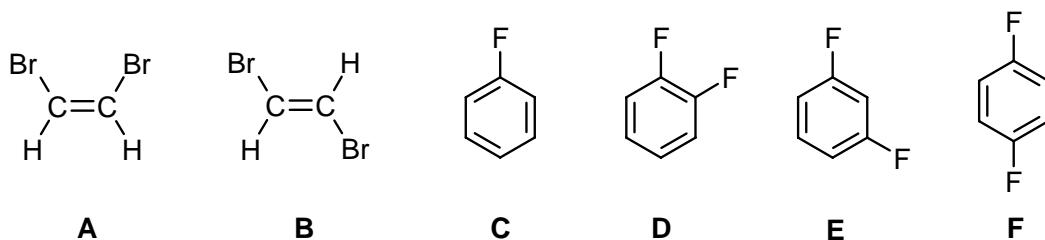
In einer kovalenten Bindung zwischen Atomen ungleicher Elektronegativität zieht das elektronegativere der beiden Atome die Elektronen stärker an sich.



Übung A3-3. Zeigen Sie die Bindungspolarisation in folgenden Molekülen, indem Sie Lewis-Formeln zeichnen und Partialladungen sowie evtl. Dipolmomente eintragen!



Übung A3-4. Welche der folgenden Moleküle besitzen kein Dipolmoment?



Resonanzformeln. (Vollhardt, 3. Aufl., S. 28-31, 4. Aufl., S. 16-19; Buddrus, S. 4-6)

Manche Moleküle lassen sich durch eine einzige Lewis-Formel nicht richtig beschreiben.

Formiat-Ion (Anion der Ameisensäure): HCO_2^-

Allylkation (2-Propen-1-ylium): C_3H_5^+

Die beiden Resonanzformeln des Formiat-Ions und des Allylkations drücken nicht eine oszillierende Ladung zwischen den beiden Ladungszentren aus, sondern, dass sich die Molekülstruktur durch Überlagerung der beiden Resonanzformeln (= mesomere Grenzstrukturen) beschreiben lässt. Um dies zu unterstreichen, schreibt man statt mehrerer mesomerer Grenzstrukturen manchmal eine einzige Formel mit Partialbindungen und delokalisierte Ladung. Verschiedene Resonanzformeln lassen sich durch formales *Verschieben von Elektronen* ineinander überführen, während die *Position der Atomkerne* gleich bleibt. Der Resonanzpfeil (\longleftrightarrow) ist also grundsätzlich vom Gleichgewichts-Doppelpfeil (\rightleftharpoons) zu unterscheiden. Vorsicht: Falsche Einführung dieser Symbole im Lehrbuch von Hart. Symbole werden später aber korrekt verwendet.

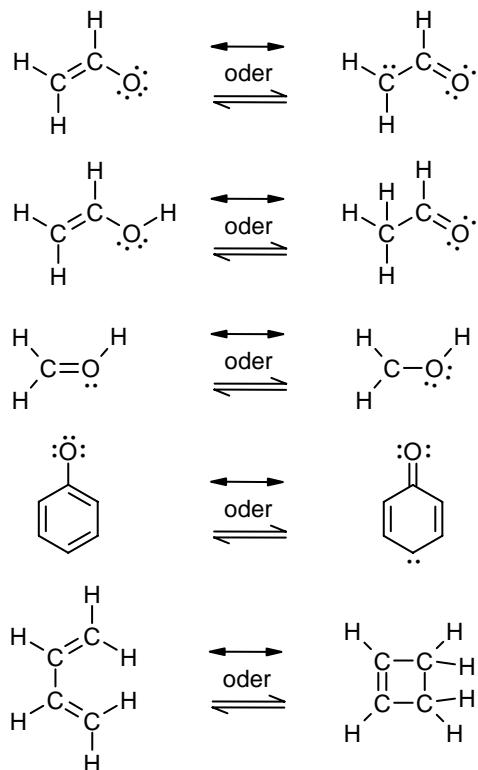
Nichtäquivalente mesomere Grenzstrukturen tragen mit unterschiedlichem Gewicht zur Beschreibung einer Molekülstruktur bei. Der unterschiedliche Beitrag lässt sich nach folgenden Regeln ermitteln

1. Resonanzformeln mit der größtmöglichen Zahl von Elektronen-Oktetts sind bevorzugt.
2. Negative Ladungen sollten bevorzugt am Atom mit der größten Elektronegativität lokalisiert sein.
Positive Ladungen sollten bevorzugt am Atom mit der geringsten Elektronegativität lokalisiert sein.
3. Resonanzformeln mit möglichst geringer Ladungstrennung sind bevorzugt.

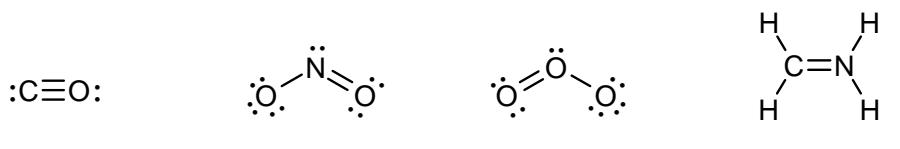
Wenn sich zwei dieser Regeln widersprechen, hat i. a. die weiter oben stehende Priorität.

Besprechung von HCO_2H und $\text{HC}\equiv\text{NH}^+$

Übung A3-5. Ergänzen Sie in den folgenden Formeln eventuelle Formalladungen und wählen Sie die richtigen Pfeile!

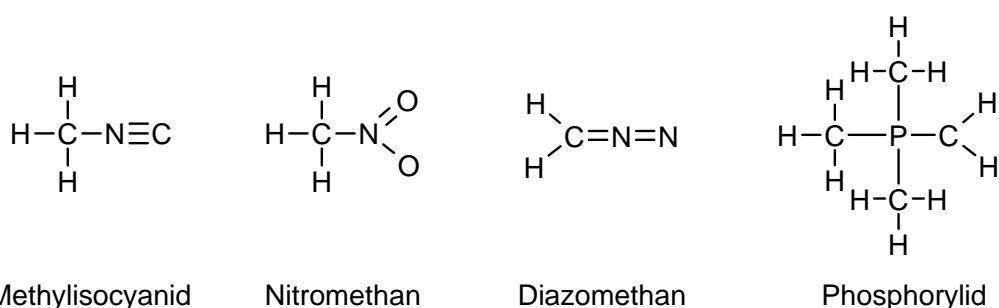


Übung B3-1. Bestimmen Sie die Formalladungen in den folgenden Molekülen bzw. Ionen und geben Sie wichtige alternative Resonanzstrukturen an.



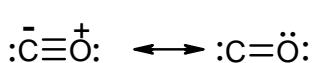
Begründen Sie mit dem VSEPR-Modell die oben angegebenen Molekülstrukturen!

Übung B3-2. Die folgenden Moleküle sind ungeladen. Ergänzen Sie die freien Elektronenpaare und bestimmen Sie Formalladungen!



Für alle angegebenen Moleküle lassen sich auch weitere günstige Resonanzstrukturen angeben. Formulieren Sie bitte diese! Welche ist wichtiger?

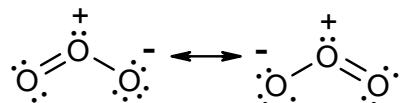
Lösung zu Übung B3-1:



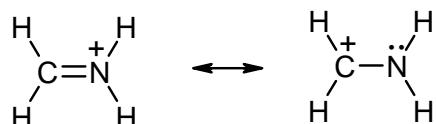
Wichtiger, da
All-Oktett



Gewinkelt, da zwei Bindungspartner
und ein freies Elektronenpaar am N

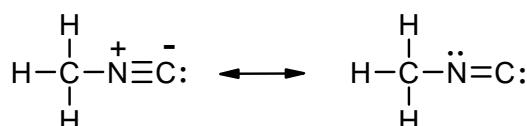


Gewinkelt, da zwei Bindungspartner
und ein freies Elektronenpaar am
mittleren O

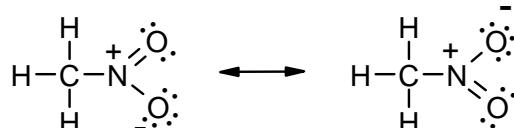


Wichtiger, da
All-Oktett

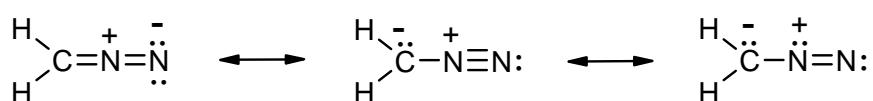
Lösung zu Übung B3-2:



All-Oktett



Äquivalente Resonanzformeln



All-Oktett

All-Oktett

Sextett

