

1

Die kovalente Bindung und die Struktur von Molekülen

Exkurse

1.A Ein Kohlenstoffatom, das von drei Bereichen erhöhter Elektronendichte umgeben ist, weist normalerweise eine trigonal planare Geometrie mit Bindungswinkel von 120° auf. Obwohl alle Kohlenstoffatome in C_{60} von jeweils drei Bereichen erhöhter Elektronendichte umgeben sind, müssen die Bindungswinkel in diesem Fall etwas gespannt vorliegen und etwas kleiner als 120° sein, um die Bildung einer kugelförmigen Struktur zu ermöglichen. Wenn alle Winkel 120° wären, hätte C_{60} nicht die bekannte Fußball-Struktur.

Quiz

1. Diese Bindungen sind nach steigender Polarität geordnet: C–H < N–H < O–H.

Richtig. In diesen drei Bindungen ist der Elektronegativitätsunterschied zwischen C und H der kleinste, der Unterschied der Elektronegativitäten von O und H dagegen der größte.

2. Alle Atome in einer Grenzformel müssen eine vollständige Valenzschale aufweisen.

Falsch. Verbindungen sind zwar am stabilsten, wenn sie vollständige Valenzschalen aufweisen, es ist aber nicht zwingend erforderlich.

3. Ein Elektron in einem 1s-Orbital ist dem Kern näher als ein Elektron in einem 2s-Orbital.

Richtig. Ein 1s-Orbital ist dem Kern im Mittel näher als ein 2s-Orbital. Vergleicht man Orbitale des gleichen Typs, dann nimmt der Abstand vom Kern mit steigender Hauptquantenzahl n zu.

4. σ - und π -Bindungen haben gemeinsam, dass sie durch Überlappung von Atomorbitalen Zustände kommen.

Richtig. Vor der Entstehung der Bindung können die Atomorbitale aber auch erst hybridisieren.

5. Die Summenformel des kleinsten Aldehyds ist C_3H_6O , die des kleinsten Ketons ist ebenfalls C_3H_6O .

Falsch. Das kleinste Keton ist $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ (Propanon), der kleinste Aldehyd ist jedoch Formaldehyd (CH_2O).

6. Um zu entscheiden, ob eine Verbindung polar oder unpolar ist, muss man die Polaritäten jeder kovalenten Bindung und die Geometrie (die Gestalt) des Moleküls kennen.

Richtig. Ob eine Verbindung polar oder unpolar ist, hängt von der Vektorsumme der Bindungsdipole ab. Nur weil eine Verbindung polare Bindungen enthält, muss sie nicht notwendigerweise polar sein.

7. In der Grundzustands-Elektronenkonfiguration eines Atoms sind nur die energetisch niedrigsten Orbitale besetzt.

Richtig. Definitionsgemäß ist die Grundzustandskonfiguration die Elektronenkonfiguration mit der niedrigsten Energie. Die Elektronen müssen sich in den Orbitalen mit den niedrigsten Energien befinden.

8. Wenn Elektronen mit gepaarten Spins vorliegen, dann sind die Elektronen mit ihren Spins so ausgerichtet, dass Nordpol an Nordpol und Südpol an Südpol liegt.

Falsch. Spingepaarte Elektronen haben gegensätzliche Spins.

9. Nach dem Lewis-Bindungsmodell gehen Atome Bindungen in der Weise ein, dass jedes an einer Bindung beteiligte Atom in der Valenzschale eine Elektronenkonfiguration erwirbt, die der des Edelgases mit der nächstliegenden Ordnungszahl entspricht.

Richtig. Die meisten Atome haben in stabilen Molekülen eine Elektronenkonfiguration, die aus einem vollständigen Oktett besteht.

10. Ein primäres Amin enthält eine N–H-Bindung, ein sekundäres Amin enthält zwei N–H-Bindungen und ein tertiäres Amin enthält drei N–H-Bindungen.

Falsch. Amine werden nach der Zahl der an das Stickstoffatom gebunden Alkylgruppen und nicht nach der Zahl der Wasserstoffatome klassifiziert.

11. Alle Bindungswinkel in den Grenzformeln eines Resonanzhybrids müssen identisch sein.

Richtig. Grenzformeln beschreiben ein und dieselbe Verbindung; sie müssen in allen strukturellen Aspekten übereinstimmen.

12. Die Elektronegativität gibt an, wie stark ein Atom die Elektronen einer Bindung zu einem anderen Atom zu sich zieht.

Richtig. Ein Atom mit größerer Elektronegativität zieht das Bindungselektronenpaar stärker zu sich heran.

13. Ein Orbital kann höchstens zwei Elektronen mit gepaarten Spins enthalten.

Richtig. Man beachte darüber hinaus, dass spingepaarte Elektronen gegensätzliche Spins aufweisen.

14. Das im Periodensystem rechts oben stehende Fluor ist das elektronegativste Element; Wasserstoff, in der linken oberen Ecke, ist das am wenigsten elektronegative Element.

Falsch. Die Aussage trifft für Fluor zu, ist aber für Wasserstoff falsch. Die Elemente mit der kleinsten Elektronegativität stehen in der linken unteren Ecke des Periodensystems.

15. Ein primärer Alkohol enthält eine OH-Gruppe, ein sekundärer Alkohol enthält zwei OH-Gruppen und ein tertiärer Alkohol enthält drei OH-Gruppen.

Falsch. Alkohole werden nicht nach der Anzahl ihrer OH-Gruppen klassifiziert, sondern danach, wie viele weitere Kohlenstoffatome an das C-Atom gebunden sind, das die OH-Gruppe trägt.

16. H_2O und NH_3 sind polare Verbindungen; CH_4 ist unpolär.

Richtig. Wasser und Ammoniak enthalten polare Bindungen und in ihrer Struktur (gewinkelt bzw. trigonal pyramidal) gleichen sich deren Dipolmomente nicht aus. Methan enthält (weitgehend) unpolare Bindungen und hat außerdem eine tetraedrische Struktur, in der die Bindungsdipole einander ausgleichen.

17. Alle Grenzformeln eines Resonanzhybrids müssen die gleiche Anzahl an Valenzelektronen aufweisen.

Richtig. Grenzformeln unterscheiden sich nur in der Position der Valenzelektronen, nicht in ihrer Zahl.

18. Eine Kohlenstoff-Kohlenstoff-Doppelbindung entsteht durch Überlappung von sp^2 -Hybridorbitalen und eine Dreifachbindung entsteht durch Überlappung von sp^3 -Hybridorbitalen.

Falsch. An Dreifachbindungen sind sp -Hybridorbitale beteiligt. Doppel- und Dreifachbindungen werden außerdem durch zusätzliche Überlappung von p -Atomorbitalen gebildet.

19. Die funktionellen Gruppen eines Alkohols, eines Aldehyds und eines Ketons haben gemeinsam, dass sie jeweils ein einziges Sauerstoffatom enthalten.

Richtig. Man beachte aber, dass das Sauerstoffatom eines Alkohols auch mit einem Wasserstoffatom verbunden ist.

20. In einer Einfachbindung teilen sich zwei Atome ein Elektronenpaar; in einer Doppelbindung teilen sie sich zwei Elektronenpaare und in einer Dreifachbindung teilen sie sich drei Elektronenpaare.

Richtig. Jede Bindung entsteht durch die gemeinsame Nutzung eines Elektronenpaares.

21. Die Lewis-Formel des Ethens (C_2H_4) muss acht Valenzelektronen enthalten.

Falsch. Jedes Kohlenstoffatom trägt vier und jedes Wasserstoffatom ein Valenzelektron bei; insgesamt sind also zwölf Valenzelektronen enthalten.

22. VSEPR steht für Valenzschalen-Elektronenpaarabstoßung (engl.: *valence shell electron pair repulsion*).

Richtig. Im VSEPR-Modell werden nur die Elektronen der Valenzschale berücksichtigt.

23. Zur Vorhersage von Bindungswinkeln der kovalenten Bindungen um ein Zentralatom werden nach dem VSEPR-Modell nur die Bindungselektronenpaare (die Elektronenpaare, die zur Bildung kovalenter Bindungen genutzt werden) berücksichtigt.

Falsch. Im VSEPR-Modell werden die bindenden und die freien Elektronenpaare berücksichtigt.

24. Ein sp -Hybridorbital kann maximal vier Elektronen enthalten, ein sp^2 -Hybridorbital kann maximal sechs Elektronen und ein sp^3 -Hybridorbital kann maximal acht Elektronen enthalten.

Falsch. Jedes Hybridorbital ist ein einzelnes Orbital, das nicht mehr als zwei Elektronen enthalten kann. Es liegen aber immer zwei sp -, drei sp^2 - bzw. vier sp^3 -Hybridor-

bitale vor, die zusammengenommen die angegebene Zahl von Elektronen aufnehmen können.

25. Die drei $2p$ -Orbitale sind parallel zueinander ausgerichtet.

Falsch. Sie stehen senkrecht (orthogonal) aufeinander.

26. Bei einer Verbindung mit der Summenformel C_3H_6O kann es sich um einen Aldehyd, ein Keton oder um eine Carbonsäure handeln.

Falsch. Eine Carbonsäure enthält eine Carboxygruppe mit zwei Sauerstoffatomen und kann daher nicht die angegebene Summenformel haben. Die Summenformel C_3H_6O könnte aber auch für eine Verbindung stehen, die entweder eine Ethergruppe und eine $C=C$ -Doppelbindung oder eine Hydroxygruppe und eine $C=C$ -Doppelbindung enthält.

27. Dichlormethan (CH_2Cl_2) ist polar, aber Tetrachlormethan (CCl_4) ist unpolar.

Richtig. Obwohl beide Verbindungen eine tetraedrische Struktur haben, können sich die Bindungsdipolmomente in Dichlormethan nicht ausgleichen.

28. Eine kovalente Bindung wird zwischen Atomen gebildet, deren Elektronegativitätsunterschied kleiner als 1.9 ist.

Richtig. Wenn die Elektronegativitätsdifferenz größer als 1.9 ist, liegt eine ionische Bindung vor.

29. Jedes Hauptenergieniveau kann zwei Elektronen enthalten.

Falsch. Jedes *Orbital* kann zwei Elektronen enthalten. Ein Hauptenergieniveau mit der Hauptquantenzahl n kann bis zu $2n^2$ Elektronen enthalten.

30. Atome, die Elektronen gemeinsam nutzen, um dadurch zu gefüllten Valenzschalen zu gelangen, bilden kovalente Bindungen.

Richtig. Kovalente Bindungen entstehen durch gemeinsame Nutzung von Elektronen. Wenn die Elektronen nicht gemeinsam genutzt werden, liegt keine kovalente, sondern eine ionische Bindung vor.

31. Bei der Konstruktion von Hybridorbitalen entspricht die Anzahl der gebildeten Hybridorbitale der Anzahl der zur Hybridisierung genutzten Atomorbitale.

Richtig. Beispielsweise führt die Verwendung von drei Orbitalen (einem s - und zwei p -Orbitalen) bei der sp^2 -Hybridisierung zur Bildung von drei sp^2 -Hybridorbitalen.

32. Wenn der Elektronegativitätsunterschied zwischen zwei Atomen null ist (wenn sie identische Elektronegativitäten haben), können die Atome keine kovalente Bindung ausbilden.

Falsch. Die gebildete Bindung ist trotzdem eine kovalente Bindung – eine unpolare kovalente Bindung.

33. Eine Kohlenstoff-Kohlenstoff-Dreifachbindung ist die Kombination einer σ -Bindung und zweier π -Bindungen.

Richtig. Die σ -Bindung entsteht durch Überlappung von sp -Hybridorbitalen, während die zwei π -Bindungen durch die seitliche Überlappung von p -Orbitalen zustande kommen.

34. Ein s -Orbital hat eine kugelförmige Gestalt, wobei der Atomkern den Mittelpunkt der Kugel bildet.

Richtig. Ein s -Orbital ist in jedem Hauptenergieniveau kugelförmig.

35. Eine funktionelle Gruppe ist eine Gruppe von Atomen in einer organischen Verbindung, die vorhersagbar bestimmte Reaktionstypen eingehen.

Richtig. Die Reaktivität einer beliebigen organischen Verbindung wird von den in ihr vorhandenen funktionellen Gruppen bestimmt.

36. In einer polaren kovalenten Bindung trägt das elektronegativere Atom eine negative Partialladung ($\delta-$) und das weniger elektronegative Atome eine positive ($\delta+$).

Richtig. Das Bindungselektronenpaar befindet sich näher am elektronegativeren Atom und führt an diesem zu einer negativen Partialladung.

37. Die Elektronegativität hängt sowohl von der Kernladung als auch von der Entfernung der Valenzelektronen vom Kern ab.

Falsch. Die Elektronegativität hängt von der Lage des Elements im Periodensystem und vom Oxidationszustand des Elements ab.

38. Es gibt zwei Alkohole mit der Summenformel C_3H_8O .

Richtig. Es handelt sich um 1-Propanol und 2-Propanol.

39. Jedes $2p$ -Orbital ist hantelförmig mit dem Kern im Zentrum der Hantel.

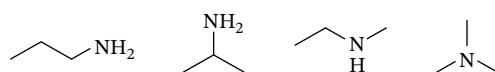
Richtig. Man beachte, dass beide Orbitallappen des hantelförmigen Orbitals gemeinsam das $2p$ -Orbital bilden.

40. Atome, die Elektronen abgeben, damit sie eine gefüllte Valenzschale erlangen, werden zu Kationen; sie können ionische Bindungen mit Anionen eingehen.

Richtig. Atome, die Elektronen abgeben, um eine gefüllte Valenzschale zu erreichen, sind typischerweise Alkali- und Erdalkalimetalle; sie bilden ionische Bindungen.

41. Es gibt drei Amine mit der Summenformel C_3H_9N .

Falsch. Es gibt vier Amine mit dieser Summenformel:



Aufgaben

Die elektronische Struktur von Atomen

1.1 Die beiden Elemente jeder Teilaufgabe haben die gleiche Anzahl an Elektronen in der äußersten Schale (der Valenzschale); diese sind jeweils fett hervorgehoben.

- (a) Kohlenstoff: $1s^2 \mathbf{2s^2} \mathbf{2p^2}$ Silicium: $1s^2 2s^2 2p^6 \mathbf{3s^2} \mathbf{3p^2}$ 4 Valenzelektronen
- (b) Sauerstoff: $1s^2 \mathbf{2s^2} \mathbf{2p^4}$ Schwefel: $1s^2 2s^2 2p^6 \mathbf{3s^2} \mathbf{3p^4}$ 6 Valenzelektronen
- (c) Stickstoff: $1s^2 \mathbf{2s^2} \mathbf{2p^3}$ Phosphor: $1s^2 2s^2 2p^6 \mathbf{3s^2} \mathbf{3p^3}$ 5 Valenzelektronen

1.2

- (a) Na^+ : $1s^2 2s^2 2p^6$
- (b) Cl^- : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
- (c) Mg^{2+} : $1s^2 2s^2 2p^6$
- (d) H^+ : keine Elektronen
- (e) H^- : $1s^2$
- (f) K^+ : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
- (g) Br^+ : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^4$
- (h) Li^+ : $1s^2$

1.3

- (a) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$: 16 Elektronen – Schwefel (S)
- (b) $1s^2 2s^2 2p^4$: 8 Elektronen – Sauerstoff (O)
- (c) $[He]2s^2 2p^2$: 6 Elektronen – Kohlenstoff (C)
- (d) $[Ne]3s^2 3p^5$: 17 Elektronen – Chlor (Cl)

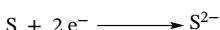
1.4 Die *Valenzschale* eines Atoms ist die äußerste Schale, die im Grundzustand von Elektronen besetzt sein kann. Ein *Valenzelektron* ist ein Elektron, das sich in einer Valenzschale befindet. Die Valenzelektronen sind von besonderer Bedeutung, da sie an der Bildung von Bindungen beteiligt sind.

1.5

- (a) C: $1s^2 \mathbf{2s^2 2p^2}$ (4 Valenzelektronen)
- (b) N: $1s^2 \mathbf{2s^2 2p^3}$ (5 Valenzelektronen)
- (c) Cl: $1s^2 2s^2 2p^6 \mathbf{3s^2 3p^5}$ (7 Valenzelektronen)
- (d) Al: $1s^2 2s^2 2p^6 \mathbf{3s^2 3p^1}$ (3 Valenzelektronen)
- (e) O: $1s^2 \mathbf{2s^2 2p^4}$ (6 Valenzelektronen)
- (f) Si: $1s^2 2s^2 2p^6 \mathbf{3s^2 3p^2}$ (4 Valenzelektronen)

1.6

- (a) H^+ : $\mathbf{1s^0}$ (keine Valenzelektronen)
- (b) H^- : $\mathbf{1s^2}$ (2 Valenzelektronen)
- (c) F^- : $1s^2 \mathbf{2s^2 2p^6}$ (8 Valenzelektronen)
- (d) Cl^+ : $1s^2 2s^2 2p^6 \mathbf{3s^2 3p^4}$ (6 Valenzelektronen)
- (e) S^{2-} : $1s^2 2s^2 2p^6 \mathbf{3s^2 3p^6}$ (8 Valenzelektronen)

Das Lewis-Bindungskonzept**1.7**

Die Elektronenkonfiguration von Schwefel ist $1s^2 2s^2 2p^6 \mathbf{3s^2 3p^4}$. Wenn das Schwefelatom zwei Elektronen aufnimmt und zu S^{2-} wird, wird die Elektronenkonfiguration $1s^2 2s^2 2p^6 \mathbf{3s^2 3p^6}$ erreicht. Die Valenzschale enthält nun ein vollständiges Oktett und die Konfiguration entspricht der des Edelgases Argon.

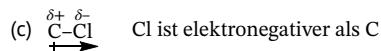
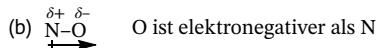
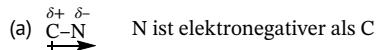
1.8 Prinzipiell nimmt die Elektronegativität innerhalb einer Periode von links nach rechts und innerhalb einer Gruppe von unten nach oben zu.

- (a) Lithium oder Kalium: Lithium, weil es in der gleichen Gruppe weiter oben steht.
- (b) Stickstoff oder Phosphor: Stickstoff, weil er in der gleichen Gruppe weiter oben steht.
- (c) Kohlenstoff oder Silicium: Kohlenstoff, weil er in der gleichen Gruppe weiter oben steht.
- (d) Sauerstoff oder Phosphor: Sauerstoff, weil er weiter oben und weiter rechts steht.
- (e) Sauerstoff oder Silicium: Sauerstoff, weil er weiter oben und weiter rechts steht.

1.9 Die Polaritätsklassifizierung einer Bindung kann anhand des Elektronegativitätsunterschieds zwischen den verbundenen Atomen vorgenommen werden. Dies erlaubt allerdings nur eine sehr grobe Klassifizierung – selbst wenn zwei Bindungen zu derselben Kategorie gehören, kann doch die eine polarer als die andere sein.

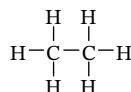
Bindung	Elektronegativitätsunterschied	Bindungstyp
S-H	$2.5 - 2.1 = 0.4$	unpolar kovalent
P-H	$2.1 - 2.1 = 0.0$	unpolar kovalent
C-F	$4.0 - 2.5 = 1.5$	polar kovalent
C-Cl	$3.0 - 2.5 = 0.5$	polar kovalent

1.10 In einer polaren kovalenten Bindung trägt das elektronegativere Atom eine negative Partialladung ($\delta-$) und das weniger elektronegative Atom eine positive ($\delta+$).



1.11 Für ungeladene Verbindungen ist die in der Lewis-Formel angegebene Gesamtzahl an Elektronen gleich der Zahl der Valenzelektronen, die insgesamt von allen Atomen beigesteuert werden.

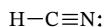
(a) C_2H_6 enthält insgesamt 14 Valenzelektronen (vier von jedem C und eines von jedem H). Weil H nur eine Bindung eingehen kann, ist die gezeigte Atomverknüpfung die einzige mögliche.



(b) CS_2 enthält insgesamt 16 Valenzelektronen (vier vom C und sechs von jedem S). In ungeladenen Verbindungen geht C stets vier Bindungen ein und S, das in der gleichen Gruppe wie O steht, in der Regel zwei.



(c) HCN enthält 10 Valenzelektronen (eines vom H, vier vom C und fünf vom N). H kann nur eine Bindung eingehen, C in ungeladenen Verbindungen vier und N drei.

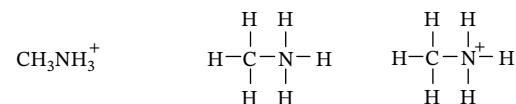


(d) HCHO enthält 12 Valenzelektronen (eines von jedem H, vier vom C und sechs vom O). Die CHO-Gruppe ist eine Aldehydgruppe, in der das O-Atom eine Doppelbindung zum C-Atom ausbildet.



1.12 In positiv geladenen Teilchen ist die in der Lewis-Formel angegebene Gesamtzahl von Elektronen gleich der Zahl an Valenzelektronen, die insgesamt von allen Atomen beigesteuert werden, abzüglich der Zahl von Elektronen, die der positiven Ladung entspricht.

- (a) CH_3NH_3^+ enthält insgesamt 14 Valenzelektronen (eines von jedem H, vier vom C und fünf vom N, abzüglich eines Elektrons, um die positive Ladung zu berücksichtigen). Die Atomverknüpfung ergibt sich aus der Halbstrukturformel.



Halbstrukturformel Atomverknüpfung Lewis-Formel

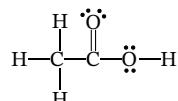
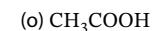
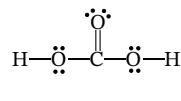
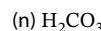
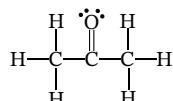
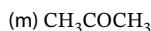
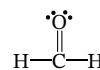
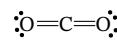
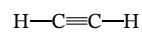
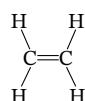
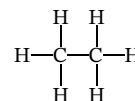
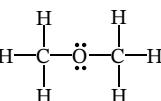
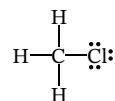
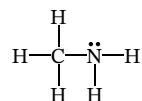
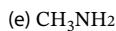
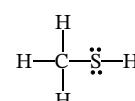
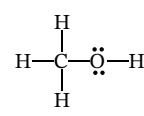
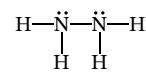
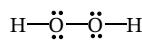
Die Formalladung eines Atoms ergibt sich, indem man von der Anzahl der Valenzelektronen im neutralen, ungebundenen Atom die Anzahl der Elektronen in freien Elektronenpaaren und die Hälfte der Elektronen in Bindungselektronenpaaren abzieht.

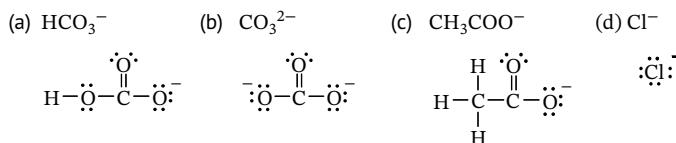
Keines der Atome enthält freie Elektronenpaare. Für das C-Atom ergibt sich die Formalladung aus 4 Valenzelektronen $- 1/2$ (8 Bindungselektronen; 2 aus jeder Bindung) = 0. Analog ergibt sich für die Formalladung des N-Atoms 5 Valenzelektronen $- 1/2$ (8 Bindungselektronen; 2 aus jeder Bindung) = +1.

- (b) CH_3^+ enthält sechs Valenzelektronen (eines von jedem H und 4 vom C, abzüglich eines Elektrons, um die positive Ladung zu berücksichtigen). Die Formalladung des C-Atoms (nur drei Bindungen und kein freies Elektronenpaar) ist demzufolge $4 - 1/2$ (6 Bindungselektronen; 2 aus jeder Bindung) = +1. Allgemein gilt, dass Kohlenstoffatome mit drei Bindungen ohne freies Elektronenpaar eine Formalladung von +1 haben.

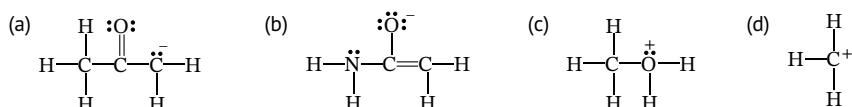
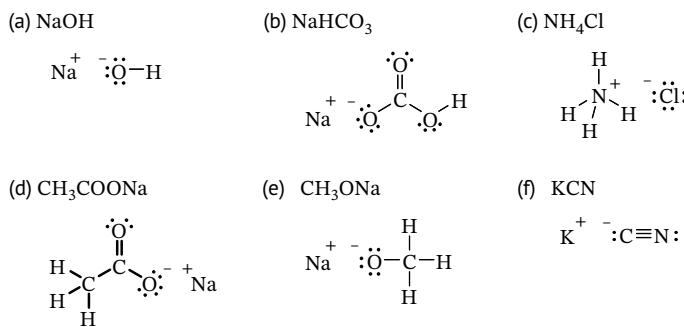


1.13



1.14

1.15 Einige Dinge wiederholen sich beim Zeichnen von Strukturformeln immer wieder: So trägt ein einfach gebundenes Sauerstoffatom mit drei freien Elektronenpaaren eine negative Formalladung und ein dreifach gebundenes Sauerstoffatom mit einem freien Elektronenpaar eine positive Formalladung. Ein vierfach gebundenes Stickstoffatom ist positiv geladen, ein Kohlenstoffatom mit drei Bindungen ohne freies Elektronenpaar trägt eine positive Formalladung, während ein dreibindiges C-Atom mit einem freien Elektronenpaar negativ geladen ist.

**1.16****Polarität kovalenter Bindungen**

1.17 Die Elektronegativität eines Elements wird durch zwei Parameter bestimmt: die zunehmende (positive) Kernladung von links nach rechts in einer Periode und die Abnahme des Atomradius (durch die der Abstand zwischen Kern und Valenzelektronen reduziert wird) von unten nach oben in einer Gruppe des Periodensystems. Beide Trends führen zu einem Maximum der Elektronegativität rechts oben im Periodensystem – bei Fluor.

1.18 Die Polarität kovalenter Bindungen nimmt mit zunehmendem Elektronegativitätsunterschied zwischen den gebundenen Atomen zu.

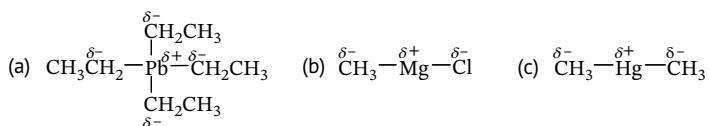
- $\text{C}-\text{H}$ (0.4) < $\text{N}-\text{H}$ (0.9) < $\text{O}-\text{H}$ (1.4)
- $\text{C}-\text{I}$ (0) < $\text{C}-\text{H}$ (0.4) < $\text{C}-\text{Cl}$ (0.5)
- $\text{C}-\text{C}$ (0) < $\text{C}-\text{N}$ (0.5) < $\text{C}-\text{O}$ (1.0)
- $\text{C}-\text{Hg}$ (0.6) < $\text{C}-\text{Mg}$ (1.3) < $\text{C}-\text{Li}$ (1.5)

1.19 Die polarste Bindung ist die, in der der Elektronegativitätsunterschied zwischen den gebundenen Atomen am größten ist.

- $\text{HSCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$: Die polarste Bindung ist die O-H-Bindung.
- CHCl_2F : Die polarste Bindung ist die C-F-Bindung.

- (c) HOCH₂CH₂NH₂: Die polarste Bindung ist die O–H-Bindung.
 (d) CH₃OCH₂OH: Die polarste Bindung ist die O–H-Bindung.
 (e) HOCl: Die polarste Bindung ist die O–H-Bindung.
 (f) CH₃NHCHO: Die polarste Bindung ist die C=O-Bindung.

1.20 Aus den Elektronegativitätsunterschieden ergibt sich, dass alle Kohlenstoff-Metall- sowie Metall-Halogen-Bindungen polar kovalente Bindungen sind. Die drei angegebenen metallorganischen Verbindungen sind von besonderer Bedeutung: Tetraethylblei wurde bis in die 1990er Jahre als Antiklopfmittel verwendet; in Flugbenzin wird es heute noch eingesetzt. Methylmagnesiumchlorid ist ein wichtiges Reagenz in der organischen Synthese und Dimethylquecksilber ist ein extrem toxisches Nervengift.

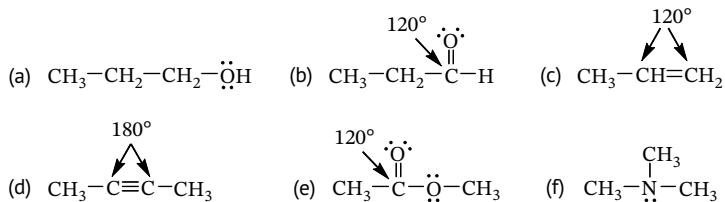


Bindungswinkel und Molekülstruktur

1.21

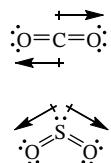
Halbstrukturformel	Lewis-Formel	Bindungswinkel
CH ₃ OH		Um Bindungswinkel vorhersagen zu können, zeichne man zunächst die Lewis-Formel. Bestimmen Sie anschließend die Bereiche erhöhter Elektronendichte um das Atom. Hier liegen sowohl um das C- als auch um das O-Atom vier solcher Bereiche vor, sodass sich überall Bindungswinkel von 109.5° ergeben.
CH ₂ Cl ₂		Um das C-Atom liegen vier Bereiche erhöhter Elektronendichte vor; die Bindungswinkel betragen 109.5°.
H ₂ CO ₃		Um das C-Atom liegen drei Bereiche erhöhter Elektronendichte vor; die Bindungswinkel sind daher 120°. Um die O-Atome der OH-Gruppen sind es vier Bereiche erhöhter Elektronendichte; hier betragen die Bindungswinkel 109.5°.

1.22 Wenn nicht anders angegeben, liegen an allen Kohlenstoff-, Stickstoff- und Sauerstoffatomen Bindungswinkel von 109.5° vor.



Polare und unpolare Verbindungen

1.23 Damit eine Verbindung polar ist, müssen die Atome so angeordnet sein, dass die Bindungsdipolmomente einander nicht ausgleichen. Im linearen CO_2 gleichen die Dipolmomente sich gegenseitig aus, während dies im gewinkelten SO_2 nicht der Fall ist.

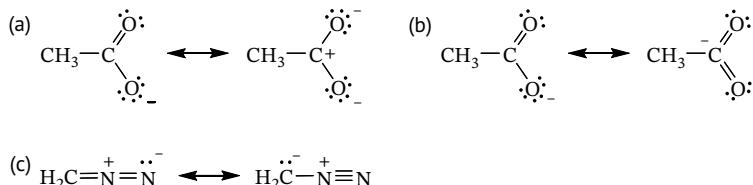


1.24 Damit Tetrafluorethylen unpolar sein kann, muss es eine räumliche Gestalt aufweisen, in der sich alle Bindungsdipolmomente gegenseitig kompensieren. Die Struktur entspricht der von Ethylen, nur dass alle vier C–H-Bindungen durch C–F-Bindungen ersetzt sind. Obwohl die C–F-Bindungen sehr polar sind, ist das Gesamtdipolmoment der Verbindung null.



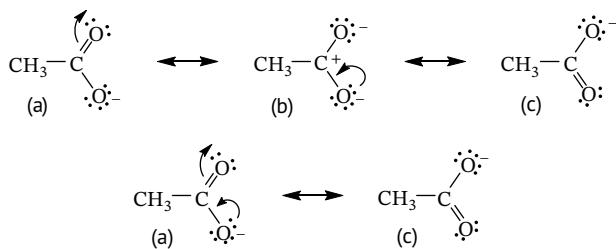
Grenzformeln

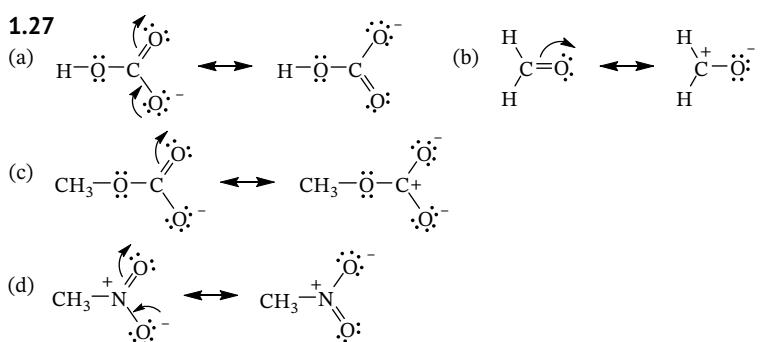
1.25



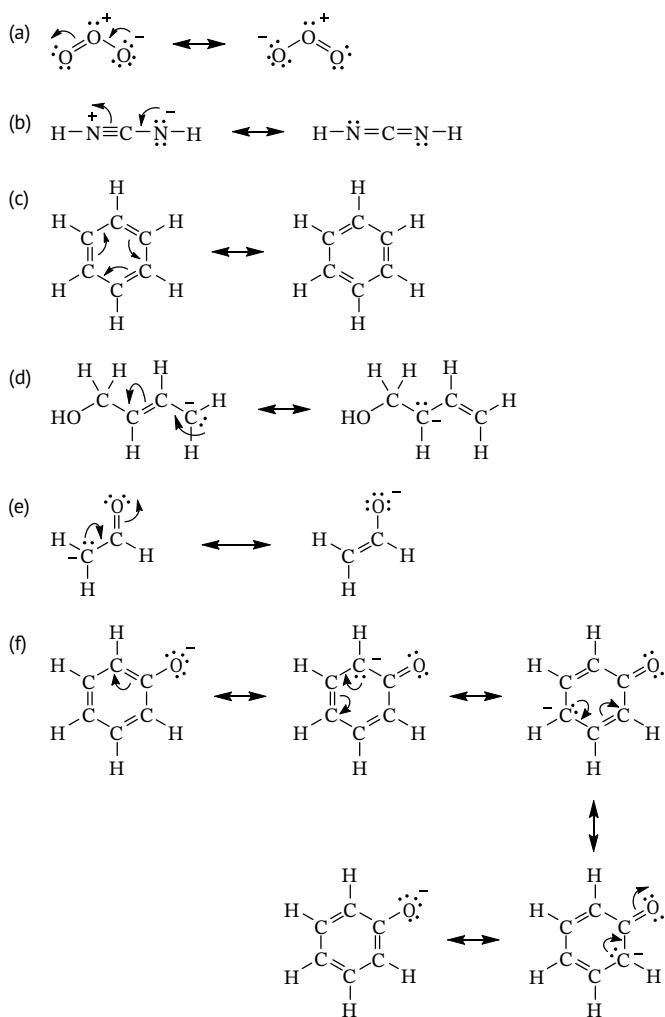
Grenzformeln unterscheiden sich nur in der Verteilung der Elektronen und jede Grenzformel muss eine korrekte Lewis-Formel sein. Die Paare in (a) und (c) sind jeweils Grenzformeln eines Resonanzhybrids. Die Strukturen in (b) sind keine Grenzformeln desselben Resonanzhybrids. Obwohl sie sich nur in der Elektronenverteilung unterscheiden, verletzt die rechte Struktur die Oktettregel und ist daher keine korrekte Lewis-Formel.

1.26



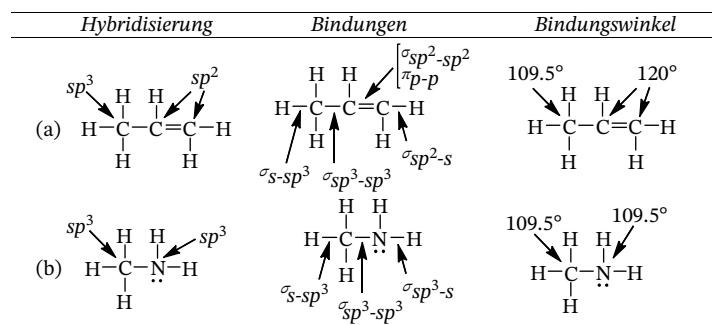


1.28 In allen Grenzformeln eines Resonanzhybrids, so auch in denen der Aufgabe 1.27, sind die Bindungswinkel und auch alle anderen strukturellen Details identisch, da es sich jeweils nur um verschiedene Darstellungen ein und derselben Verbindung handelt. Da die an der Mesomerie beteiligten Kohlenstoffatome jeweils von drei Bereichen erhöhter Elektronendichte umgeben sind, liegen überall Winkel von 120° vor. Die C-Atome der Methylgruppen in den Verbindungen (c) und (d) sind jeweils von vier Bereichen erhöhter Elektronendichte umgeben; hier liegen Bindungswinkel von 109.5° vor.

1.29

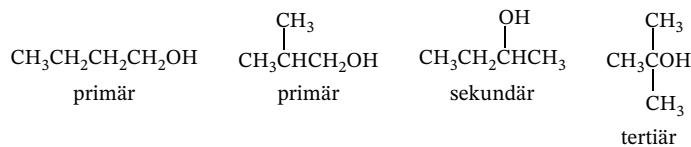
Hybridisierung von Atomorbitalen

1.30 Alle Atome außer dem Wasserstoff ($1s$ -Konfiguration) liegen hybridisiert vor. Die Orbitale, die die jeweiligen σ - und π -Bindungen bilden, sind jeweils bezeichnet.

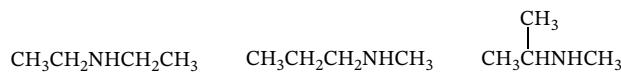


Funktionelle Gruppen

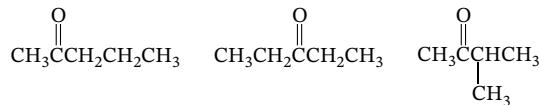
1.31



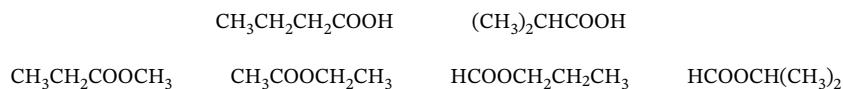
1.32



1.33



1.34

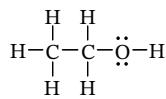


1.35

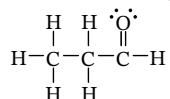
- | | | | |
|--|---|--------------------------------------|---|
| (a) Carbonylgruppe | (b) Carboxygruppe | (c) Hydroxygruppe | (d) primäre Aminogruppe |
| $\begin{matrix} \text{O}^{\cdot} \\ \\ \text{C} \end{matrix}$ | $\begin{matrix} \text{O}^{\cdot} \\ \parallel \\ \text{C} \\ \text{---} \\ \ddot{\text{O}}-\text{H} \end{matrix}$ | $\text{---}\ddot{\text{O}}-\text{H}$ | $\text{---}\ddot{\text{N}}\text{---}\text{H}$ |

1.36 Es ist empfehlenswert, hier zunächst die funktionelle Gruppe zu zeichnen und diese dann durch die verbleibenden Atome zur vollständigen Strukturformel mit der angegebenen Summenformel zu ergänzen.

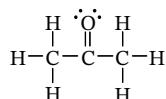
- (a) ein Alkohol mit der Summenformel C₂H₆O



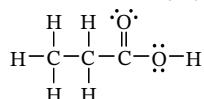
- (b) ein Aldehyd mit der Summenformel C₃H₆O



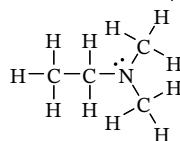
- (c) ein Keton mit der Summenformel C₃H₆O



- (d) eine Carbonsäure mit der Summenformel C₃H₆O₂

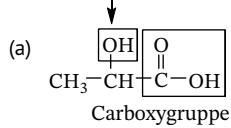


- (e) ein tertiäres Amin mit der Summenformel C₄H₁₁N

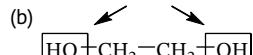


1.37

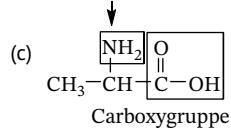
sekundäre Hydroxygruppe



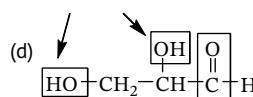
primäre Hydroxygruppe



primäre Aminogruppe

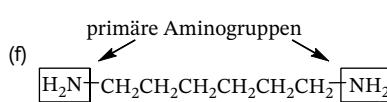
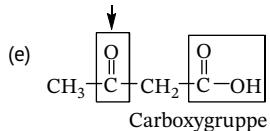


Hydroxygruppen (primär und sekundär)



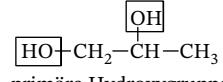
Carbonylgruppe (Aldehyd)

Carbonylgruppe (Keton)



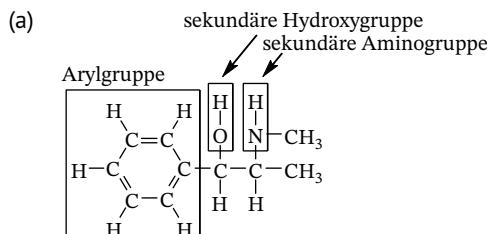
1.38

sekundäre Hydroxygruppe



primäre Hydroxygruppe

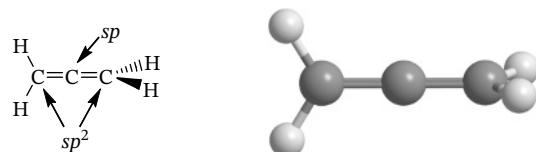
1.39



- (b) Ephedrin ist eine polare Verbindung. Es enthält polare Bindungen (C–O, C–N, N–H und O–H) und weil das Molekül keine Symmetrieelemente enthält, können die einzelnen Bindungsdipole einander auch nicht kompensieren.

Ausblick

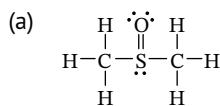
1.40



Die beiden äußeren Kohlenstoffatome sind sp^2 -hybridisiert. Weil das mittlere Kohlenstoffatom sp -hybridisiert ist, ist die Kohlenstoffkette linear. Eines der beiden p -Orbitale am mittleren Kohlenstoffatom bildet eine π -Bindung mit dem linken C-Atom, während das andere p -Orbital eine π -Bindung zum rechten C-Atom eingeht.

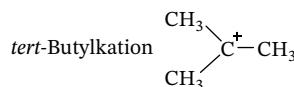
Auch wenn die Kohlenstoffatome linear angeordnet sind und die beiden äußeren C-Atome jeweils eine trigonal planare Umgebung aufweisen, ist die Verbindung dennoch nicht flach. Die beiden p -Orbitale am zentralen Kohlenstoffatom stehen senkrecht aufeinander und daher liegen auch die beiden π -Bindungen in senkrecht zueinander stehenden Ebenen. Die durch die linke CH₂-Gruppe aufgespannte Ebene steht aus diesem Grund senkrecht auf der Ebene der rechten CH₂-Gruppe.

1.41



- (b) Weil das Schwefelatom von vier Bereichen erhöhter Elektronendichte umgeben ist (drei Bindungen und ein freies Elektronenpaar), liegt eine tetraedrische Geometrie vor.
 (c) Dimethylsulfoxid enthält eine polare S=O-Bindung und ist daher eine polare Verbindung.

1.42



- (a) Das C-Atom hat eine Formalladung von +1; es befinden sich also sechs Elektronen in seiner Valenzschale. Alle sechs Elektronen sind an Bindungen beteiligt; es liegen keine freien Elektronenpaare an dem Kohlenstoffatom vor.
 (b) Weil nur drei Bereiche erhöhter Elektronendichte vorhanden sind, betragen die Bindungswinkel 120°.

- (c) Atome, die von drei Bereichen erhöhter Elektronendichte umgeben sind und daher Bindungswinkel von 120° besitzen, sind sp^2 -hybridisiert. Sie weisen eine trigonal planare Geometrie auf und das verbleibende, nicht hybridisierte p -Orbital steht senkrecht auf der durch die Atome aufgespannten Ebene.

1.43

- (a) Jedes Kohlenstoffatom ist von drei Bereichen erhöhter Elektronendichte umgeben; die Bindungswinkel werden also 120° betragen und die Kohlenstoffatome sind jeweils trigonal planar koordiniert.
- (b) Die C-Atome sind sp^2 -hybridisiert.
- (c) Weil alle sechs Kohlenstoffatome sp^2 -hybridisiert sind, liegen alle Kohlenstoff- und Wasserstoffatome in derselben Ebene; das Molekül ist flach.