

# Chemie II PVK Skript

Teil Anorganische Chemie, Atombau und Bindung

Alexander Schoch, schochal@student.ethz.ch

Asbjoern Rasmussen, rasmussa@student.ethz.ch

Version: May 28, 2020

## Contents

<b>1 Trends im Periodensystem</b>	<b>1</b>
1.1 Aufgaben . . . . .	2
<b>2 Atombau</b>	<b>3</b>
2.1 Quantenzahlen . . . . .	3
2.2 Pauli Prinzip und Hund'sche Regel . . . . .	3
2.3 Elektronenkonfiguration . . . . .	4
2.4 Aufgaben . . . . .	4
<b>3 Bindungen</b>	<b>6</b>
3.1 Bindungsarten . . . . .	6
<b>4 Darstellung von Molekülen</b>	<b>6</b>
4.1 Lewis-Strukturmodell . . . . .	6
4.2 Oxidationszahlen . . . . .	7
4.3 Formalladungen . . . . .	8
4.4 Resonanz . . . . .	8
4.5 Molekülorbitale . . . . .	8
<b>5 VSEPR/VSEPD</b>	<b>9</b>
5.1 Aufgaben . . . . .	10
<b>6 Komplexe</b>	<b>10</b>
6.1 Licht . . . . .	10
6.2 Atome . . . . .	11
6.3 Komplexe . . . . .	11
6.4 Übungen . . . . .	12
<b>7 Lösungen</b>	<b>15</b>

**Disclaimer:** Dieses Skript und alle weiteren Unterlagen von diesem Prüfungs Vorbereitungs Kurs sind keine offiziellen Unterlagen und haben keinen Anspruch auf Richtigkeit oder Vollständigkeit.

Zürich, 8 April 2020

## 1 Trends im Periodensystem

In vielen alten Prüfungen und in den Übungen 3,4,5 kommen Fragen zu verschiedenen Verhalten von Atomen oder spezifischen Molekülen. Hier ist es besonders nützlich die Trends im Periodensystem auswendig zu lernen oder herleiten zu können.

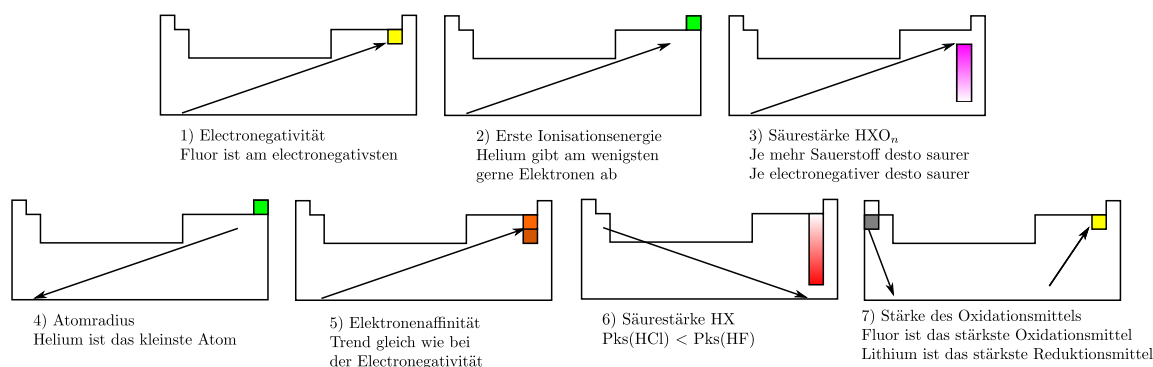
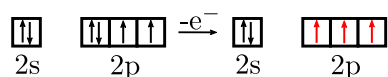


Figure 1: Trends in Periodensystem mit Merkhilfen

**Electronegativität** Beschreibt wie sehr ein Atom Elektronen zu sich zieht. Sauerstoff und Fluor sind sehr electronegativ, wobei Fluor das stärkste ist. Der **Metallcharakter** und die **Basizität des Oxids** verhalten sich entgegen der Electronegativität.

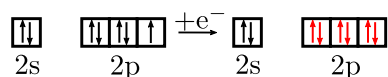
**Erste Ionisationsenergie** Beschreibt die Energie, welche nötig ist um dem Atom im ungeladenen Grundzustand ein Elektron zu entreissen.  $A \xrightarrow{I_v} A^+ + e^-$ .



**Säurestärke  $\text{HXO}_n$**  Zwei Faktoren beeinflussen die Säurestärken der Oxosäuren. Der erste Faktor ist die Anzahl Sauerstoffe, welche an das Zentralatom gebunden sind (Grund: Resonanz und zusätzlicher Elektronenzug). Der zweite Faktor ist wie electronegativ das Zentralatom ist (Grund: zusätzlicher Elektronenzug).

**Atomradius** Helium ist das kleinste Atom, da es am wenigsten belegte Orbitale hat und die Orbitale sind möglichst voll belegt.

**Elektronenaffinität** Beschreibt die Energie, welche freigesetzt wird, wenn das Atom im neutralen Grundzustand ein Elektron aufnimmt  $A + e^- \longrightarrow A^-$ .



**Säurestärke HX** Die Säurestärke in der gleichen Gruppe nimmt zu mit steigender Zentralatomgröße, da die H-X Bindung durch den steigenden Abstand zwischen den beiden Atomen schwächer wird. HF ist eine schwache Säure ( $\text{Pks} = 3.1$ ), HCl ist eine starke Säure ( $\text{Pks} = -6.0$ ). Die Säurestärke nimmt in der gleichen Perioden zu mit steigender Electronegativität:  $\text{Pks}(\text{H}_2\text{O}) = 14$ ,  $\text{Pks}(\text{HF}) = 3.1$ .

**Stärke des Oxidationsmittels** Lithium ist das stärkste Reduktionsmittel/das schwächste Oxidationsmittel. Fluor ist das stärkste Oxidationsmittel/das schwächste Reduktionsmittel. Der Trend ist weniger robust als z.B. die Elektronegativität. Wichtig ist dass man versteht, dass durch Aufnahme (zum Beispiel bei Fluor) oder Abgabe (zum Beispiel bei Lithium) von Elektronen eine Edelgaskonfiguration erreicht werden kann und dies sehr Vorteilhaft ist.

**Ionenradien** Ionenradien nehmen stark zu bei steigender negativer Ladung, während die Atomradien auch einen kleinen(!) Einfluss haben. Zum Beispiel ist  $\text{Ca}^{2+}$  gleich gross wie  $\text{Na}^+$  ( $100 \times 10^{-12} \text{ m}$  vs.  $102 \times 10^{-12} \text{ m}$ ) obwohl Calcium eine Periode tiefer liegt und im Grundzustand fast doppelt so viele Elektronen hat.

## 1.1 Aufgaben

überprüfen Sie mit Hilfe des Periodensystems die folgenden Aussagen. Klassifizieren Sie diese Aussagen als richtig oder falsch.

Nr.	Aussage	Richtig / Falsch
1	Natrium ist ein starkes Oxidationsmittel.	
2	Die Atomradien nehmen in der Reihenfolge $\text{I} > \text{Br} > \text{Cl} > \text{He}$ ab.	
3	Die Pks Werte nehmen in der Reihenfolge $\text{CH}_4 < \text{NH}_3 < \text{H}_2\text{O}$ zu	
4	Die Ionenradien nehmen in der Reihenfolge: $\text{Li}^+ < \text{B}^- < \text{O}^{2-}$ zu	
5	Die erste Ionisationsenergie nimmt wie folgt ab: $\text{Rn} > \text{Kr} > \text{Ne}$	
6	Die Stärke der Säuren nehmen in der Reihenfolge $\text{H}_2\text{SO}_4 > \text{H}_3\text{PO}_4 > \text{H}_4\text{SiO}_4$ zu	
7	Die Elektronenaffinitäten nehmen folgendermassen ab: $\text{Cl} > \text{Te} > \text{Y}$	
8	In $\text{OF}_2$ hat Sauerstoff die Oxidationszahl -II	
9	$\text{He}^+$ kann von jedem anderen neutralen Atom ein Elektron aufnehmen	
10	$\text{F}_2$ reagiert mit Chlorid zu Fluorid und Chlorgas ( $\text{F}_2 + 2 \text{Cl}^- \longrightarrow 2 \text{F}^- + \text{Cl}_2$ )	
11	Die Stärke der Säure nimmt in folgender Reihe zu: $\text{HF} < \text{HBr} < \text{HI}$	
12	Die Elektronegativität nimmt in folgender Reihe ab: $\text{P} > \text{Ge} > \text{Rb}$	
13	Der Atomradius sinkt in der Reihenfolge: $\text{P} > \text{Zn} > \text{Rb}$	
14	Die Säurestärken nehmen in der Reihenfolge $\text{HClO}_4 > \text{HClO}_3 > \text{HClO}$ ab	
15	Die erste Ionisierungsenergie sinkt in der Reihe $\text{Li} > \text{Na} > \text{Ca}$	
16	Der saure Charakter steigt in der Reihenfolge: $\text{P}_4\text{O}_6 > \text{As}_4\text{O}_6 > \text{Sb}_4\text{O}_6$	
17	Sie haben sich eine Pause verdient	

Lösungen: 1n,2y,3y,4n,5n,6y,7y,8n,9y,10y,11y,12y,13n,14n, 15n, 16y

## 2 Atombau

### 2.1 Quantenzahlen

Es gibt 4 wichtige Quantenzahlen, welche die Orbitale beschreiben:

- Die Hauptquantenzahl  $n$  entspricht der Periode
- Die Nebenquantenzahl  $l$  beschreibt die Form/Art der Orbitale  
 $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ , wobei  $0 = s, 1 = p, 2 = d, 3 = f, \dots$
- Magnetische Drehimpulszahl  $m$  beschreibt die Orientierung der Orbitale  
 $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ . Es gibt also eine s-Orbital Orientierung, drei p-Orbital Orientierungen ( $p_x, p_y, p_z$ ), fünf d-Orbital Orientierungen, sieben f-Orbital Orientierungen, etc.
- Spinquantenzahl  $s$ . Für das Elektron ist  $s = \pm 0.5$

Die energetische Reihenfolge der Orbitale ist wie folgt:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, etc.

Aber man muss das nicht auswendig lernen, wenn man sein eigenes Periodensystem mitbringen darf [1]. Falls man doch die Orbital Reihenfolge selber können muss, ist die Schachbrett Merkhilfe (Figure 2) sehr nützlich.

	5 f		6d		7p		8s
4 f		5d		6p		7s	
	4d		5p		6s		
3d		4p		5s			
	3p		4s				
2p		3s					
	2s						
1s							

Figure 2: Aufbau on a Chessboard [2], die Elektronen werden von unter nach oben in die Orbitale eingefüllt.

### 2.2 Pauli Prinzip und Hund'sche Regel

Elektronen werden immer zuerst in die energetisch tieferen Orbitale eingefüllt.

Gibt es mehrere Orbitale mit gleicher Energie, werden die Elektronen zuerst **einzeln** in die Orbitale eingesetzt, falls Elektronen übrig sind, füllt man die Elektronen mit entgegengesetztem Spin in die halbvollen Orbitale.

Dies wird wiederholt, bis keine Elektronen übrig sind. Falls ungepaarte Elektronen vorkommen, so ist diese Elektronenkonfiguration **paramagnetisch**. Falls nur gepaarte Elektronen vorkommen, so ist die Elektronenkonfiguration **diamagnetisch**.

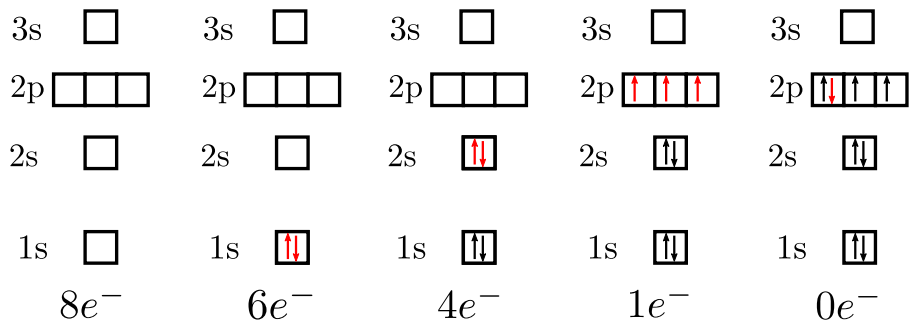


Figure 3: Das Pauli Prinzip und die Hund'sche Regel auf neutralen Sauerstoff angewendet. Die Anzahl Elektronen unter den Orbitalen ist die Anzahl Elektronen welche noch übrig sind, nachdem die roten Elektronen eingefügt wurden.

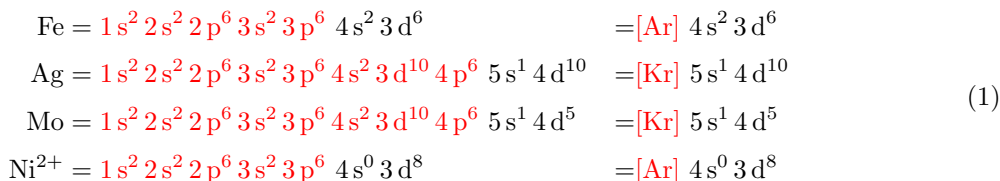
### 2.3 Elektronenkonfiguration

Das bestimmen der Elektronenkonfiguration verläuft immer nach gleichem Schema:

1. Element im Periodensystem finden
2. Horizontal so viele Felder laufen wie die Ladungszahl, für negative Ladungen nach rechts, für positive Ladungen nach links, ohne Ladung keine Felder laufen.
3. Ist das Atom ungeladen und kann eine  $d^5$  oder  $d^{10}$  Konfiguration erreicht werden?
  - (a) Ja: Ein Elektron aus dem Valenz s-Orbital in das d-Orbital einfügen. Grund dafür ist im Paragraph "Erste Ionisationsenergie" erklärt.
  - (b) Nein: weiter
4. Ist das Atom positiv geladen und hat ein ungefülltes d-Orbital als höchstes Orbital?
  - (a) Ja: Alle Elektronen der s-Schale in die d-Orbitale setzten.
  - (b) Nein: Die Konfiguration hinschreiben nach dem Chessboard/aus dem PSE ablesen.

Man kann sich sehr viel Zeit sparen, wenn man die Rumpfelektronen/ nicht Valenzelektronen als die Elektronenkonfiguration des Edelgases, welches eine Periode höher ist, in eckige Klammern schreibt.

Beispiele:



### 2.4 Aufgaben

Geben Sie die Elektronenkonfiguration der Folgenden Atomen und Ionen an: (Zusatz: welche sind paramagnetisch?)

Nr.	Atom/Ion	Nr.	Atom/Ion
1	Be	9	$\text{Fe}^{3+}$
2	Ti	10	Mo
3	Sb	11	$\text{Ru}^+$

Nr.	Atom/Ion	Nr.	Atom/Ion
4	Br	12	Ti <sup>4+</sup>
5	Zn <sup>2+</sup>	13	Si
6	In <sup>+</sup>	14	Eu
7	Sr <sup>2+</sup>	15	O <sup>2-</sup>
8	Os	16	Cr

Welches Element hat die folgende Elektronenkonfiguration?

Nr.	Element	Nr.	Element
1	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	5	[Ar] 4s <sup>2</sup>
2	[Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>3</sup>	6	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>
3	[Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup>	7	[Kr] 5s <sup>2</sup> 4d <sup>2</sup>
4	[Kr] 5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup>	8	1s <sup>2</sup>

Geben Sie die Quantenzahlen der Valenzelektronen von Calcium im Grundzustand an.

Wie viele Elektronen können sich maximal in den: 5f, 6s, 2p und 5d Orbitalen aufhalten?

Wie viele Elektronen können maximal die Hauptquantenzahl  $n = 3$  haben? (Zusatz  $n = 4$ )

Lösungen: 1) [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>1</sup>, 2) [Ar] 4s<sup>2</sup> 3d<sup>2</sup>, 3) [Kr] 5s<sup>2</sup> 4d<sup>10</sup> 5p<sup>3</sup>, 4) [Ar] 4s<sup>2</sup> 3d<sup>10</sup> 4p<sup>5</sup>, 5) [Ar] 3d<sup>10</sup>, 6) [Kr] 5s<sup>2</sup> 4d<sup>10</sup>, 7) [Kr], 8) [Xe] 6s<sup>2</sup> 4f<sup>14</sup> 5d<sup>6</sup>, 9) [Ar] 3d<sup>5</sup>, 10) [Kr] 5s<sup>1</sup> 4d<sup>5</sup>, 11) [Kr] 4d<sup>7</sup>, 12) [Ar], 13) [Ne] 3s<sup>2</sup> 3p<sup>2</sup>, 14) [Xe] 6s<sup>2</sup> 4f<sup>7</sup>, 15) [Ne], 16) [Ar] 4s<sup>1</sup> 3d<sup>5</sup>

1) Ar, 2) As, 3) Zn, 4) Cd, 5) Ca. 6) Al, 7) Zr, 8) He

VE:  $n = 4, l = 0, m = 0, s = \pm 1/2$

5f= 14e<sup>-</sup>, 6s= 2e<sup>-</sup>, 2p= 6e<sup>-</sup>, 5d= 10e<sup>-</sup>

n= 3: 3s = 2e<sup>-</sup> + 3p = 6e<sup>-</sup> + 3d = 10e<sup>-</sup> = 18e<sup>-</sup>, n= 4: 32e<sup>-</sup>

## 3 Bindungen

### 3.1 Bindungsarten

Es gibt drei Arten von Bindungen: Ionische, Kovalente, Koordinierte.

**Ionische Bindungen** entstehen wenn die zwei Bindungspartner eine **Elektronegativitätsdifferenz von mindestens 1.7** aufweisen. Dies ist genug um Elektronen des einen Atoms/Moleküls auf das andere zu übertragen. Verbindungen, welche ionische Bindung enthalten, sind Salze. Das klassische Beispiel ist NaCl, wobei Natrium das Kation ( $\text{Na}^+$ ) ist und Chlorid das Anion ( $\text{Cl}^-$ ) ist. Beide Ionen ordnen sich zusammen in einem Salzgitter an. Ionische Bindungen sind dem Kapitalismus am nächsten, da ein Atom/Molekül viele Elektronen besitzt und sie nicht mit dem elektronenarmen Bindungspartner teilt.

**Kovalente Bindungen** entstehen wenn zwei Bindungspartner mit weniger als 1.7 Elektronegativitätsunterschied binden. Dabei teilen sich die Bindungspartner ein Teil ihrer Elektronen in gemeinsamen Orbitalen. Verbindungen, welche kovalente Bindung enthalten, sind Moleküle. Diese Art von Bindung ist dem Kommunismus am nächsten.

**Koordinierte Bindungen** entstehen, wenn ein Nichtmetall/Molekül mit einem freien Elektronenpaar dieses freie Elektronenpaar einem Übergangsmetall "spendet". Die Elektronegativitätsdifferenz sollte auch unter 1.7 sein. Dabei entsteht ein Komplex, welcher in vielen Fällen deutlich andere Eigenschaften hat als das Metall selbst. Diese Form der Bindung ist dem Sozialismus am nächsten.

## 4 Darstellung von Molekülen

Wichtige Begriffe:

- **Valenz:** Gibt an wie viele Bindungen ein Atom eingehen kann  
 Valenz = Anzahl Valenzelektronen im Atom - Anzahl nicht-bindende Elektronen  
 Atome der zweiten Periode folgen immer der Oktett-/Edelgasregel.
- **Hypervalenz:** Gilt für Atome ab der dritten Periode (möglich weil sie sehr gross sind und d-Orbitale verwenden können).  
 Hypervalente Atome haben mehr als acht Valenzelektronen.  
 Nicht-bindende Elektronenpaare zählen auch zur Valenz.
- **Isoelektronisch:** Zwei oder mehr Moleküle sind isoelektronisch, wenn sie:  
 1) die gleiche Struktur haben, 2) die gleiche Anzahl Valenzelektronen haben.  
 $\text{O}=\text{C}=\text{O}$  und  $\text{O}=\text{N}^+=\text{O}$  sind isoelektronisch.  
 $\text{H}_3\text{C}-\text{CO}-\text{CH}_3$  und  $\text{H}_3\text{C}-\text{N}=\text{N}-\text{CH}_3$  sind nicht isoelektronisch (gleiche Anzahl  $\text{Ve}^-$ , aber andere Struktur).  
 Moleküle mit ungleicher Zahl  $\text{Ve}^-$  sind oftmals leicht zu erkennen, da auch ihre Struktur oft unterschiedlich ist.

### 4.1 Lewis-Strukturmodell

Das Lewis-Strukturmodell erlaubt uns, chemische Verbindung graphisch darzustellen. Dabei müssen folgende Regeln beachtet werden:

1. Ein Atom werden mit seinem Elementsymbol dargestellt.



- Ein Strich zwischen zwei Atomen entspricht einer *Einfachbindung* (also *zwei* Elektronen).
- Zwei Striche entsprechen einer *Doppelbindung* (also *vier* Elektronen).
- Ein Strich bei einem Atom entspricht einem *Nicht-Bindenden Elektronenpaar*.
- Generell erfüllen Atome aus der zweiten Periode ( $n = 2$ ) die Oktettregel: Bei den Atomen C, N, O und F müssen immer *vier* anliegende Striche gezeichnet sein, sonst ist etwas falsch.

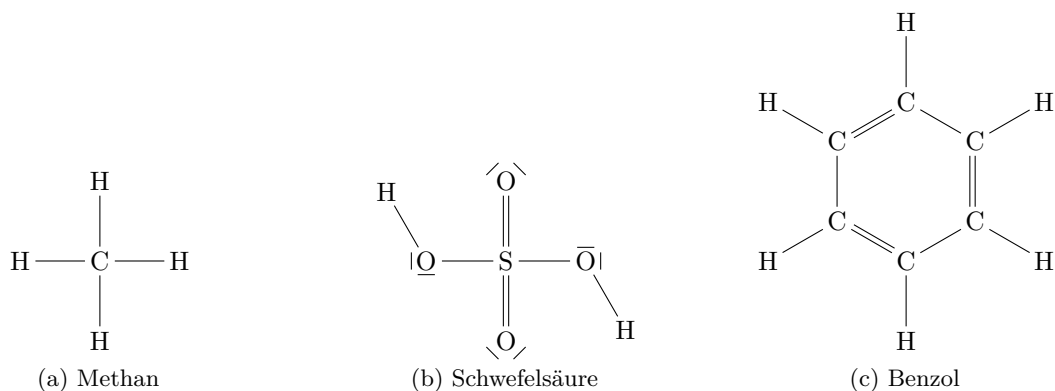


Figure 4: Lewis-Formeln für einige Verbindungen

## 4.2 Oxidationszahlen

Um die Oxidationszahl (Beispiel: S in Schwefelsäure  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , Fig. 4b) zu ermitteln, wird nach folgendem Schema vorgegangen:

- Valenzelektronenzahl im Grundzustand bestimmen.  $3s^2 + 3p^4 = 6e^-$
- Für jede Bindung:
  - Heteronukleare Bindung (unterschiedliche Atome): Alle Bindungselektronen demjenigen Atom mit der höheren Elektronegativität zuschreiben.
  - Homonukleare Bindung (gleiche Atome): Gleichmässig aufteilen

Alle Bindungs- $e^-$  werden den Sauerstoffatomen zugeschrieben
- Valenzelektronen nach der Zuteilung bestimmen.  $0e^-$
- Differenz = Oxidationszahl, wird mit römischen Zahlen notiert.  $6e^- - 0e^- = +VI$
- Kontrolle: Die Summe der Oxidationszahl aller Atome in einer Verbindung muss der Gesamtladung entsprechen:  $2 \cdot +I + 4 \cdot -II + 1 \cdot +VI = 0$

Tipps:

- F ist immer -I (ausser in  $\text{F}_2$ )
- O ist meistens -II (ausser wenn mit O oder F gebunden)
- H ist meistens +I (ausser wenn mit H gebunden oder als Hydrid)

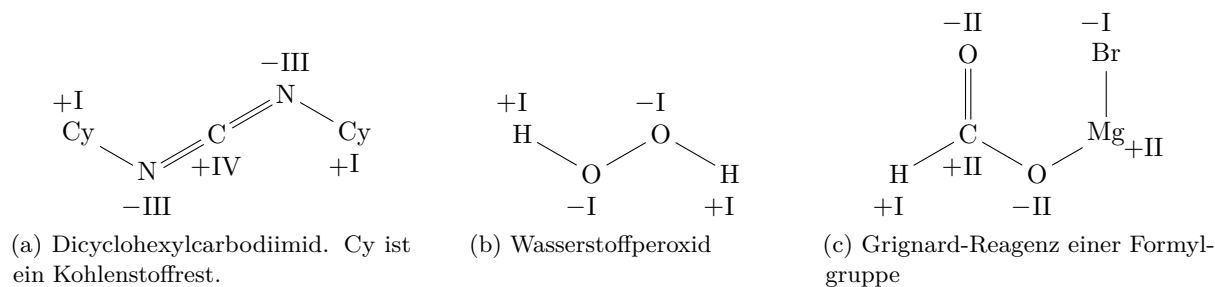
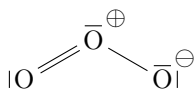


Figure 5: Oxidationszahlen aller Atome für einige ausgewählte Moleküle

### 4.3 Formalladungen

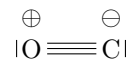
Während für die Bestimmung der Oxidationszahlen beide Bindungselektronen dem *elektronegativeren Atom* zugeordnet werden, werden für Formalladungen alle Bindungen *homolytisch* (“in der Mitte”) gespalten. Falls sich die Valenzelektronenzahl im Grundzustand und nach der homolytischen Spaltung unterscheiden, tritt eine Formalladung auf.

- Die Summe aller Formalladungen muss der tatsächlichen Ladung des Teilchens entsprechen.
- Oftmals können Formalladungen durch Resonanz auf andere Atome verschoben oder eliminiert werden.



Lewis-Formel von Ozon. Wenn alle Bindungen homolytisch gespalten werden, besitzt das linke Sauerstoffatom  $6 e^-$  und ist somit formal neutral, das Mittlere erhält  $5 e^-$  und ist somit formal positiv geladen und das Rechte erhält  $7 e^-$  und besitzt somit eine negative Formalladung.

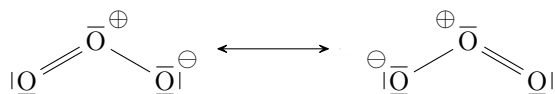
Lewis-Formel von Kohlenmonoxid. Nach der homolytischen Spaltung der Dreifachbindung besitzen beide Atome  $5 e^-$ , was zu den eingezeichneten Formalladungen führt.



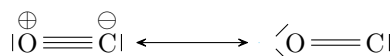
### 4.4 Resonanz

Resonanz beschreibt das Konzept, dass sich  $\pi$ -Bindungen nicht dort befinden *müssen*, wo sie in der Lewis-Formel eingezeichnet werden. Benachbarte, parallel zueinander stehende p-Orbitale bilden nämlich  $\pi$ -Systeme und somit kommen die Elektronen *delokalisiert* (“nicht einem bestimmten Ort zugehörig”) vor. Verschiedene Grenzformen eines Teilchens mit  $\pi$ -Systemen nennt man *Resonanz- oder Grenzstrukturen*.

Eine Molekülstruktur kann nicht einer bestimmten Grenzstruktur zugeordnet werden. Vielmehr ist sie alle Grenzstrukturen gemeinsam, und das Molekül und seine Eigenschaften wird durch all seine Grenzstrukturen beschrieben.



(a) Resonanzstrukturen von Ozon: Durch die Verschiebung der  $\pi$ -Bindung auf das linke Sauerstoffatom und des nichtbindenden Elektronenpars des formal negativ geladenen Sauerstoffatoms zu einer Doppelbindung kann die andere Grenzstruktur erreicht werden.



(b) Resonanzstrukturen von Kohlenmonoxid: Durch die Verschiebung einer  $\pi$ -Bindung auf das Sauerstoffatom wird eine weitere Resonanzstruktur erreicht werden. Beachte, dass bei C dann die Oktettregel nicht erfüllt wird und diese Resonanzstruktur also eine tiefe Gewichtung besitzt.

Figure 6: Durch das Verschieben von Elektronenpaaren können verschiedene Grenzstrukturen desselben Moleküls formuliert werden.

### 4.5 Molekülorbitale

## 5 VSEPR/VSEPD

Während die Lewis-Struktur aufzeigen kann, welche Atome wie miteinander binden, ist das VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion) Modell dazu da, um zu zeigen, wie die Atome räumlich mit

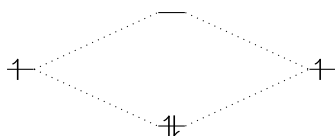
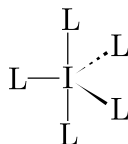


Figure 7: MO-Diagramm von H<sub>2</sub>

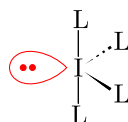
einander stehen. VSEPR wird immer nach dem gleichen Schema angewandt.

Hier wird dies am Beispiel von IF<sub>4</sub><sup>+</sup> gezeigt.

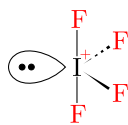
1. Zentralatom bestimmen: **I**
2. Valenzelektronen des ungeladenen Zentralatoms aufschreiben: **I = 7 e<sup>-</sup>**
3. Ladungen dazurechnen.
  - (a) Bei positiver Ladung subtrahiert man e<sup>-</sup>
  - (b) Bei negativer Ladung addiert man e<sup>-</sup>.
  - (c) Falls negative Ladung und Sauerstoff vorhanden: negative Ladung nicht addieren sondern O<sup>-</sup> bilden.
- 7 e<sup>-</sup> - 1 e<sup>-</sup> = 6 e<sup>-</sup>**
4. Anzahl Bindungen bestimmen.
  - (a) Falls H und O vorkommen: OH machen
  - (b) F = Einfachbindung
  - (c) OH oder O<sup>-</sup> = Einfachbindung
  - (d) O = Doppelbindung
- 4 · F = 4 · EB**
5. Anzahl Bindungen abziehen.
  - (a) Einfachbindung = 1 e<sup>-</sup>
  - (b) Doppelbindung = 2 e<sup>-</sup>
- 6 e<sup>-</sup> - 4 e<sup>-</sup> = 2 e<sup>-</sup>**
6. Übrige e<sup>-</sup> durch 2 teilen. Dies ist die Anzahl Lonepairs.
  - (a) Falls X.5 Lonepairs: X Lonepairs + 1 Radikalorbital
- 2 e<sup>-</sup> / 2 = 1 Lonepair**
7. Koordinationszahl und Grundstruktur (Figure: 7) bestimmen:
  - (a) jeder Bindungspartner = 1
  - (b) jedes Lonepair = 1
  - (c) jedes Radikalorbital = 1



8. Grosse Domänen (Doppelbindungen, Lonepairs) in grosse Domänen Spots einzeichnen.
  - (a) Pentagonal bipyramidal: equatorial ( $\alpha_{\text{eq}} = 120^\circ > \alpha_{\text{ax}} = 90^\circ$ )
  - (b) Heptagonal bipyramidal: axial ( $\alpha_{\text{eq}} = 72^\circ < \alpha_{\text{ax}} = 90^\circ$ )
  - (c) Mehrere grosse Domänen haben die grösstmögliche Distanz.



9. Restliche Domänen einzeichnen und Ladung am Zentralatom einzeichnen.



Grosse Domänen nehmen mehr Platz ein und drücken kleinere Domänen näher zusammen. Beispiel: Bindungswinkel im idealen Tetraeder =  $109.5^\circ$ . Winkel H–O–H ist  $104.45^\circ$

## 5.1 Aufgaben

Zeichnen Sie die räumliche Struktur der folgenden Moleküle:

Nr.	Molekül	Nr.	Molekül
1	SO <sub>2</sub>	9	ClO <sub>2</sub>
2	XeF <sub>2</sub>	10	NH <sub>3</sub>
3	IF <sub>7</sub>	11	IF <sub>3</sub>
4	ClF <sub>4</sub> <sup>+</sup>	12	SO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>
5	H <sub>2</sub> O	13	BF <sub>3</sub>
6	SiF <sub>4</sub>	14	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>
7	PH <sub>3</sub>	15	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>
8	SO <sub>3</sub>	16	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>

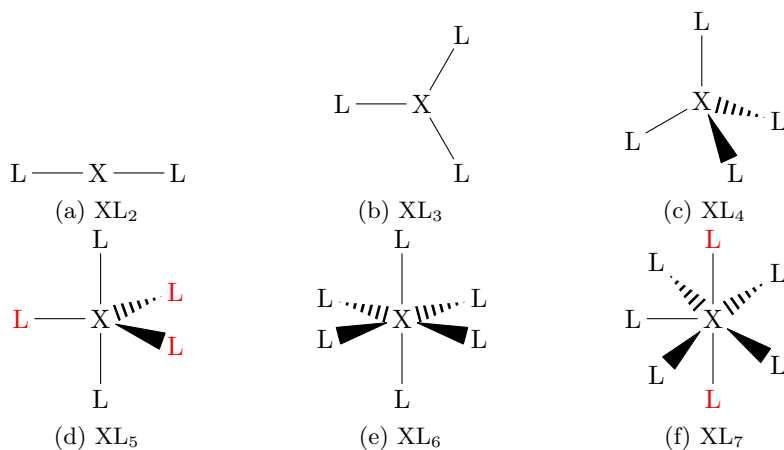


Figure 8: Die verschiedenen Konfigurationen. Rote **L** zeigen, wo die grossen Domänen eingeführt werden. Punktsymmetrische Geometrien (Linear, Trigonal, Tetraedrisch, Oktaedrisch, Quadratisch Planar) besitzen keine Präferenz.

## 6 Komplexe

### 6.1 Licht

Für die Beschreibung von elektro-magnetischer Strahlung sind einige Zahlen wichtig:

- Die Lichtgeschwindigkeit  $c = 299\,792\,458\text{ m s}^{-1}$
- Die Plank'sche Konstante  $h = 6.626\,070\,15 \times 10^{-34}\text{ J s}^{-1}$
- Die Frequenz  $\nu$  [ $\text{s}^{-1}$ ] beschreibt, wie oft die Welle sich pro Sekunde wiederholt
- Die Wellenlänge  $\lambda$  [m] beschreibt, welche Distanz zurückgelegt wird, bis sich die Welle wiederholt
- Die Energie  $E$  [J] beschreibt die Energie, welche die Welle trägt

Es gibt viele Arten Wellenlänge, Frequenz und Energie in Abhängigkeit von einander darzustellen. Hier sind einige die Möglichkeiten:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (2)$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{E}{h} \quad (3)$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{E} \quad (4)$$

### 6.2 Atome

Alles kann als Welle dargestellt werden, man verwendet dabei die de-Broglie-Wellenlänge:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (5)$$

wobei  $h$  die Plank'sche Konstante ist,  $m$  ist die Masse des Objektes in [kg] und  $v$  ist die Geschwindigkeit in [ $\text{m s}^{-1}$ ].

Für das Wasserstoff Atom gibt es eine klar berechenbare Formel zur Berechnung der spektralen Linien, sprich der Wellenlänge, welche man braucht um das Elektron in eine höhere Schale  $n$  anzuregen.

$$\frac{1}{\lambda} = R_h \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (6)$$

Wobei  $R_h$  die Rydbergkonstante für das Wasserstoffatom ist (Zahlenwert müsst Ihr nicht kennen) und  $n_1 = 1, 2, 3, \dots$  die tiefere Schale und  $n_2 = 1, 2, 3, \dots$  die höhere Schale ist.

ähnlich lässt sich die Energiedifferenz der Spektralen Linien für Wasserstoff im Bohren'schen Atommodell berechnen:

$$\Delta E[\text{J}] = -2.18 \times 10^{-18}\text{ J} * \left( \frac{1}{n_e^2} - \frac{1}{n_a^2} \right) \quad (7)$$

Wobei  $n_e$  die Endschale und  $n_a$  die Anfangsschale ist. Merken Sie sich hier das Konzept, dass die Energiedifferenz zwischen hohen Schalen z.B.  $n_e = 10$  und  $n_a = 11$  deutlich kleiner ist als die von tieferen Schalen  $n_e = 1$  und  $n_a = 2$ .

### 6.3 Komplexe

Bei Komplexen ist die Aufspaltung der Orbitale entscheidend dafür, welche Wellenlängen aufgenommen werden. Die Energie, welche aufgenommen wird entspricht dabei der Aufspaltung. Für grosse Aufspaltungen, wird hoch energetisches Licht bzw. Licht mit kurzer Wellenlänge absorbiert. Für kleine Aufspaltungen wird Licht mit langer Wellenlänge bzw. kleiner Energie aufgenommen. Wichtig bei

Komplexen ist, dass es einen Angeregten Zustand gibt, so sind  $d^0$  farblos (z.B.  $[\text{Ti}(\text{Cl})_4]$ ), da es keine Elektronen gibt, welche angeregt werden können.  $d^{10}$  Komplexe (z.B.  $[\text{Zn}(\text{OH}_2)_6]^{2+}$ ) sind auch farblos, da es keine Möglichkeit gibt Elektronen in eine höhers nicht vollbesetztes Orbital zu bewegen.

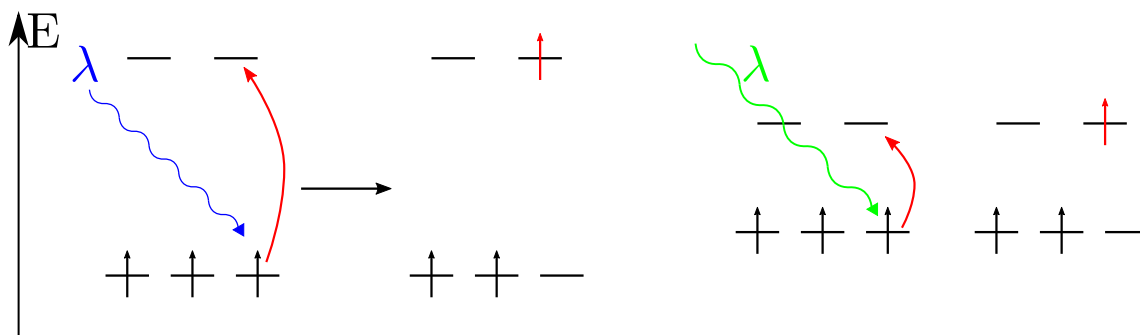


Figure 9: Aufnahme von Licht von zwei verschieden stark aufgespaltenen Oktaedrischen Komplexen.

Bei Komplexen sieht man die Komplementärfarbe (Figure 9) von der Farbe des Lichts, welches für die Anregung absorbiert wurde. Man kann daraus ablesen, welche Komplexe eine grosse Aufspaltung und welche eine kleine Aufspaltung haben. So sind zum Beispiel gelbgrüne, gelbe und orange Komplexe stark aufgespalten, da sie violettes, blaues und grünblaues Licht absorbieren.

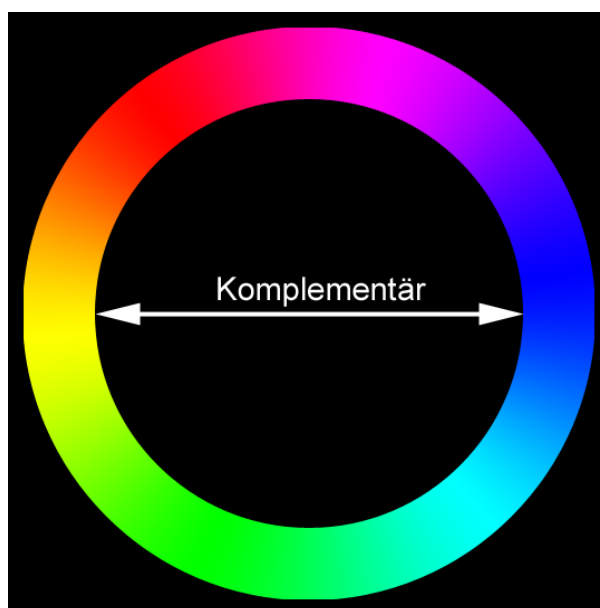


Figure 10: Das Farbrad[?] ] mit einem Beispiel für zwei Komplementärfarben.

## 6.4 Übungen

Berechnen Sie die Wellenlänge und Energie von gelbem Licht (Frequenz =  $520 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ ).

Berechnen Sie die Frequenz und Wellenlänge von Röntgenstrahlung (Energie =  $1.99 \times 10^{-15} \text{ J}$ )

Ein Neutron, ein Elektron, ein Lastwagen und ein Mensch bewegen sich je mit  $5 \text{ m s}^{-1}$ . Welches Objekt hat die kürzeste Wellenlänge nach Broglie? Welches Objekt hat die kleinste Frequenz?

Sie rennen um einen Baum mit  $5.56 \text{ m s}^{-1}$ . Was ist Ihre Wellenlänge?

Welche Energie ist mindestens nötig um ein Elektron im Wasserstoffatom von  $n = 1$  zu  $n = 4$  anzuregen?

Zeigen Sie, anhand eines Energiediagramms, graphisch, wieso ein  $d^{10}$  Komplex farblos ist.

Komplex A ist gelb, Komplex B ist blau. Welcher Komplex hat die höhere Aufspaltung?

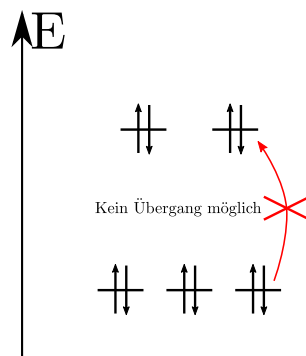
Lösungen: Gelbes Licht:  $\lambda = 5.77 \times 10^{-7} \text{ m}$ ,  $E = 3.45 \times 10^{-19} \text{ J}$

Röntgenstrahlung:  $\lambda = 9.98 \times 10^{-11} \text{ m}$ ,  $\nu = 3.00 \times 10^{18} \text{ s}^{-1}$

Wellenlänge: Elektron  $>$  Neutron  $>$  Mensch  $>$  Lastwagen

Frequenz: Elektron  $<$  Neutron  $<$  Mensch  $<$  Lastwagen

Ich (72.2 kg):  $1.84 \times 10^{-36} \text{ m}$



Komplex A hat die grössere Aufspaltung (Komplementärfarbe = blau). (Komplex B hat die Komplementärfarbe gelb)

## References

- [1] Nist periodensystems. <https://www.nist.gov/pml/periodic-table-elements>. 07.05.2020.
- [2] Allan K. Hovland. Aufbau on a chessboard. *Journal of Chemical Education*, 63(7):607, 1986.



## 7 Lösungen

