

# Moleküldarstellung und Konstitutionsisomerie

## Lernziele

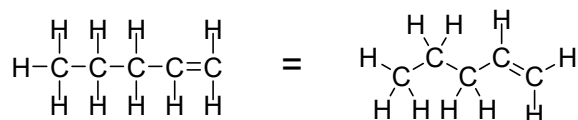
- Sie können Moleküle als Valenzstrichformeln zeichnen
- Sie können Moleküle als Skelettformeln zeichnen
- Sie können Moleküle als Keil-Strichformeln zeichnen
- Sie wissen, was Konstitutionsisomere sind und können zu einer Summenformel unterschiedliche Isomere zeichnen

## Valenzstrichformeln (Lewis-Formeln)

Für das Schreiben von sogenannten **Lewis-Formeln** gelten die folgenden Regeln:

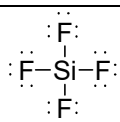
- Der Atomrumpf (zur Erinnerung: dieser beinhaltet den Atomkern sowie alle Elektronen ausser den Valenzelektronen) wird durch das Atomsymbol des entsprechenden Elements wiedergegeben.
- Ein einfach besetztes Orbital wird durch einen Punkt symbolisiert
- Ein doppelt besetztes Orbital wird durch einen Strich (oder zwei Punkte) symbolisiert

Typischerweise ordnet man die vier Valenzorbitale orthogonal zueinander an, ausser es handelt sich um ringförmige Strukturen oder es liegen Mehrfachbindungen vor. Es ist aber prinzipiell nicht falsch, Atomketten in einer Zick-Zack-Darstellung zu zeichnen, ausser aber, es ergeben sich Bindungswinkel von 180°.



Soll also die Valenzstrichformel eines Moleküls gezeichnet werden, so geht man wie folgt vor:

- Man bestimmt die Anzahl Valenzelektronen für jedes Atom; dies ergibt in der Summe die Gesamtzahl der Valenzelektronen - und damit die Anzahl der Elektronenpaare
- Die Atome werden untereinander mit Einzelbindungen verbunden
- Die verbleibenden Elektronenpaare werden so verteilt, dass jedes Atom (ausser dem H-Atom) ein Elektronenoktett besitzt.



Als Beispiel sei das Molekül  $\text{SiF}_4$  betrachtet: In diesem Molekül befinden sich insgesamt 32 Valenzelektronen (je sieben für die vier F-Atome und vier für das Si-Atom). Folglich muss die Valenzstrichformel 16 Elektronenpaare beinhalten.

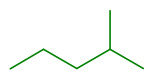
Dem Si-Atom fehlen noch vier Elektronen, den F-Atomen noch je ein Elektron bis zum Erreichen einer vollständig gefüllten Valenzschale. Man erhält deshalb die links abgebildete Valenzstrichformel, welche die **Konnektivität** zwischen den Atomen sowie Ort und Anzahl freier Elektronenpaare korrekt wiedergibt, nicht jedoch die Geometrie des Moleküls.

## Skelettformeln

Das Zeichnen von Lewis-Formeln führt schon bei relativ kleinen Molekülen zu unübersichtlichen Strukturen. Besonders Moleküle, welche über eine grosse Anzahl Kohlenstoff-Atome verfügen, sind problematisch, da an jedem Kohlenstoff-Atom bis zu vier verschiedene Substituenten gebunden sein können. Es drängt sich daher auf, für dieses immer wiederkehrende Strukturelement eine Kurzschreibweise einzuführen - die **Skelettformel**. Skelettformeln zeigen das Kohlenstoffgerüst (die Verbindungen aller Kohlenstoffatome, die das Rückgrat oder Skelett des Moleküls bilden) mit allen anhängenden funktionellen Gruppen wie zum Beispiel -OH oder -Br. Für das Zeichnen von Skelett-Formeln gelten die folgenden vier Regeln:

- Bindungen zwischen zwei Kohlenstoff-Atomen werden ganz normal als Strich gezeichnet. Die Symbole der Kohlenstoff-Atome selbst werden jedoch weggelassen. Somit entspricht auch jeder Anfang und jedes Ende eines Bindungsstrichs einem Kohlenstoff-Atom.

- Um mehr als zwei Kohlenstoff-Atome zu zeichnen, gibt man die Bindungs-Striche als Zick-Zack-Linie an. Der Winkel zwischen den Strichen beträgt dabei im Normalfall 120°; nur bei vier Bindungen, Ringen oder linearen Molekülteilen sollte hiervon abgewichen werden.

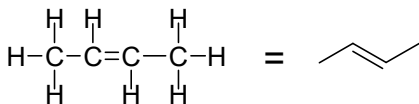


120° Winkel eingehalten

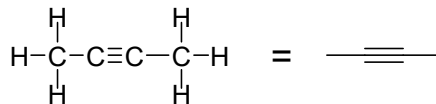


ungünstige Bindungswinkel

- Doppelbindungen werden durch zwei parallele Linien dargestellt, Dreifachbindungen entsprechend durch drei parallele Linien; lineare Molekülteile müssen auch in der Skelettformel linear dargestellt werden.



Zick-Zack wenn möglich



180°-Winkel muss wiedergegeben werden

- Wasserstoff-Atome welche mit Kohlenstoff-Atomen verbunden sind, sowie deren Bindung, werden nicht gezeichnet, Wasserstoff-Atome, welche nicht an ein Kohlenstoff-Atom gebunden sind, müssen hingegen immer angegeben werden
- Bindungen zu Hetero-Atomen (alle anderen Nichtmetall-Atome ausser C und H) werden ganz normal gezeichnet, ebenso die Symbole der Hetero-Atome selbst. Die freien Elektronenpaare der Hetero-Atome werden hingegen im Normalfall weggelassen.
- Zeichnen Sie niemals ein Kohlenstoff-Atom (oder ein anderes Element der 2. Periode) mit mehr als vier Bindungen.

Ansonsten gelten die gleichen Regeln wie für das Aufstellen von Valenzstrichformeln. Insbesondere kann die genaue räumliche Anordnung der Atome auch hier mit der Keil-Strich-Schreibweise wiedergegeben werden. Bei Skelettformeln ist es auch immer erlaubt, Molekülteile explizit anzugeben, die gemäss den obigen Regeln nicht unbedingt erforderlich wären.

## Aufgabe 1

Bestimmen Sie von den folgenden Molekülen, welche als Skelettformeln dargestellt sind, die zugehörigen Summenformeln. Die in **braun** angegebenen Namen (auf Englisch) dienen der selbstständigen Überprüfung mit **MolView** (Erklärung hierzu am Ende des Dokuments).

Summenformel:	Summenformel:
<b>Cyclohexane</b>	<b>2-Ethyl-3-methyl-1-pentene</b>
Summenformel:	Summenformel:
<b>7-Hydroxyquinoline</b>	<b>Nicotine</b>

## Aufgabe 2

Zeichnen Sie die folgenden Moleküle, welche als Valenzstrichformeln dargestellt sind, als Skelettformeln. Die in **braun** angegebenen Namen (auf Englisch) dienen der selbstständigen Überprüfung Ihrer Lösung mit [MolView](#) (Erklärung hierzu am Ende des Dokuments).

$  \begin{array}{c}  \text{H} \quad \text{H} \\    \quad   \\  \text{C} = \text{C} - \text{C} - \text{C} \equiv \text{C} - \text{H} \\    \quad   \quad   \\  \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H}  \end{array}  $	
1-Hexen-5-yne	

$  \begin{array}{c}  \text{O} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{O} \\     \quad   \quad   \quad   \quad    \\  \text{H}-\text{O}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\  \quad   \quad   \quad   \\  \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{N}-\text{H} \\  \quad \quad \quad   \\  \quad \quad \quad \text{H}  \end{array}  $	
DL Glutamic acid	

Mefenamic acid	

## Konstitutionsisomerie

Moleküle, welche die gleiche Summenformel besitzen, sich aber in ihrer Struktur voneinander unterscheiden, bezeichnet man als **Isomere**, beziehungsweise als zueinander isomer. Genaugenommen handelt es sich in dem oben gezeigten Beispiel um sogenannte **Konstitutionsisomere**. Derartige Isomere unterscheiden sich voneinander in ihren chemischen und physikalischen Eigenschaften.

Als Beispiel dienen Moleküle mit der Summenformel C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O:		
Lewis-Formel	$  \begin{array}{c}  \text{H} \quad \text{H} \\    \quad   \\  \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{C}-\text{H} \\    \quad   \\  \text{H} \quad \text{H}  \end{array}  $	$  \begin{array}{c}  \text{H} \quad \text{H} \\    \quad   \\  \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\    \quad   \\  \text{H} \quad \text{H}  \end{array}  $
Systematischer Name	Dimethylether	Ethanol
Smp. / Sdp.	-141 °C / -25 °C	-114 °C / 78 °C

### Aufgabe 3

Zeichnen Sie jeweils sämtliche mögliche Konstitutionsisomere zur angegebenen Summenformel. Zeichnen Sie die Moleküle einerseits als vollständige Valenzstrichformeln und andererseits als Skelettformeln.

Wenn Sie aufgrund der Regeln zur Molekülgeometrie einen Winkel von  $120^\circ$  oder  $180^\circ$  erwarten, sollte Ihre Darstellung auch diesem Winkel entsprechen.

Die in **braun** angegebenen Namen (auf Englisch) dienen der selbstständigen Überprüfung (siehe unten).

	Valenzstrichformel	Skelettformel
<b>C<sub>3</sub>H<sub>6</sub></b> (zwei Isomere) Propene Cyclopropane		

	Valenzstrichformel	Skelettformel
<b>C<sub>3</sub>H<sub>4</sub></b> (drei Isomere) Propyne Cyclopropene Propadiene		

[illegible]

## Keil-Strich-Formeln

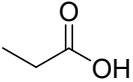
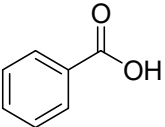
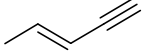
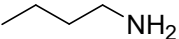
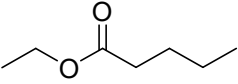
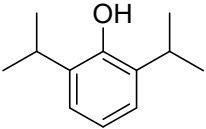
Um dreidimensionale Molekülstrukturen möglichst einfach zu Papier bringen zu können, hat man sogenannte **Keil-Strich-Formeln** entwickelt. Dabei handelt es sich um eine erweiterte Lewis-Schreibweise, bei der auch die räumliche Orientierung der Bindungen berücksichtigt wird.

- Die Hauptkette des Moleküls liegt in der Papierebene und wird wie bei der Skelett-Darstellung wo möglich als Zick-Zack-Kette gezeichnet; Bindung in der Ebene werden als gewöhnlicher Strich dargestellt.
- Jene Bindungen, welche aufgrund der räumlichen Orientierung der Orbitale aus der Papierebene nach vorne herausragen, zeichnet man als ausgefüllten Keil; Alle Bindungen, die von der Papierebene nach hinten gehen, zeichnet man als gestrichelten Keil.
- Man richtet das Molekül so aus, dass möglichst viele Bindungen in der Papierebene zu liegen kommen.

### Aufgabe 4

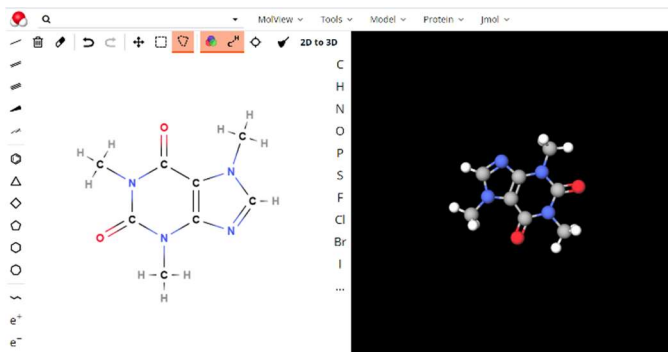
Zeichnen Sie die folgenden Moleküle, welche in der Skelettformel dargestellt sind, als vollständige Valenzstrichformeln in der **Keil-Strich-Darstellung**.

Die in **braun** angegebenen Namen (auf Englisch) dienen der selbstständigen Überprüfung (siehe unten).

	Skelettformel	Vollständige Keil-Strich-Formel
Propanoic acid		
Benzoic acid		
Pent-2-en-4-yne		
1-Aminobutane		
Ethyl pentanoate		
Propofol		

## Überprüfung Ihrer Lösungen

Alle drei Aufgaben können mit Hilfe von [MolView](https://molview.org) überprüft werden. Öffnen Sie die Website von MolView: <https://molview.org> und öffnen Sie das Programm, indem Sie auf **Close Popup** klicken; Sie sollten nun die abgebildete Seite sehen.



Im linken Fenster sieht man das jeweilige Molekül in der Skelettdarstellung, im rechten Fenster die dreidimensionale Struktur des Moleküls. Bei gedrücktem Cursor kann hier das Molekül im Raum rotiert werden.

### Kontrolle Aufgabe 1



Geben Sie im Fenster oben links neben dem Lupensymbol den Namen des jeweiligen Moleküls ein (**braune Namen**)

und drücken Sie die Eingabetaste. Es erscheint nun die Struktur des ausgewählten Moleküls.

Tools ▾ Model ▾ Prot

LINK

</> Embed

EXPORT

📄 Structural formula image

📄 3D model image

📄 MOL file

CHEMICAL DATA

📄 Information card

📄 Spectroscopy

📄 PubChem source

Wählen Sie nun im Tab **Tools** den Eintrag **Information card** aus. Es erscheinen nun auf der rechten Seite zuerst allgemeine Informationen zum Molekül, gefolgt von einer Tabelle, welche zuerst die Summenformel des Moleküls zeigt. Kontrollieren Sie die angegebene Formel mit Ihrer Lösung.

**Formula**

$C_{15}H_{15}NO_2$

Kehren Sie mit **Return** (oben links) zur Strukturdarstellung zurück.

Um die Summenformel nachzuvollziehen aktivieren Sie das Feld **C- c<sup>H</sup> H** in der Menü-Leiste – auf diese Weise können Sie sämtliche Atomsymbole und H-Atome sichtbar machen.

### Kontrolle Aufgabe 2



Geben Sie im Fenster oben links neben dem Lupensymbol den Namen des jeweiligen Moleküls ein (**braune Namen**)

und drücken Sie die Eingabetaste. Vergleichen Sie die Skelettformel im linken Fenster mit Ihrer Lösung.

### Kontrolle Aufgabe 3



Geben Sie im Fenster oben links neben dem Lupensymbol den Namen des jeweiligen Moleküls ein (**braune Namen**) und drücken Sie die Eingabetaste. Vergleichen Sie die

Skelettformel im linken Fenster mit Ihrer Lösung.

Um die Valenzstrichformel zu kontrollieren aktivieren Sie das Feld **C-H, c<sup>H</sup>** um alle Atomsymbole und H-Atome anzuzeigen.

Klicken Sie anschliessend auf das **Besensymbol** ✓, um die Winkel in der Valenzstrichdarstellung zu optimieren. Im Idealfall stimmt das angezeigte Molekül nun mit Ihrer Valenzstrichformel überein, wobei nur die Valenzelektronen der Bindungen dargestellt werden.

## Kontrolle Aufgabe 4



Q Xylene



Geben Sie im Fenster oben links neben dem Lupensymbol den Namen des jeweiligen Moleküls ein (**braune Namen**)

und drücken Sie die Eingabetaste. Vergleichen Sie die 3D-Darstellung im rechten Fenster mit Ihrer Lösung.

Rotieren Sie das Molekül im rechten Fenster so, dass das Hauptgerüst senkrecht zu Bildschirmenebene ist – sie sehen dann auf einen Blick, welche Atome in der Bildebene liegen und welche aus dieser nach vorne, beziehungsweise hinten herausragen.

