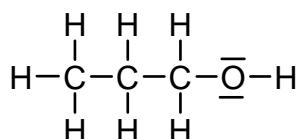


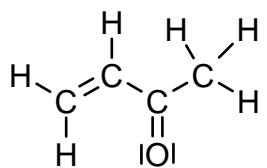
Vorlesung 4

Darstellungsweisen für Molekülstrukturen

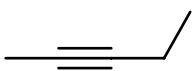
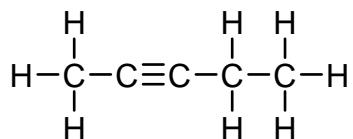
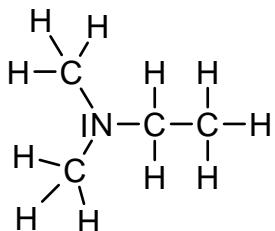
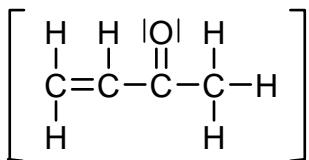
Lewis (Kekulé)-
Formeln



Strichformeln*

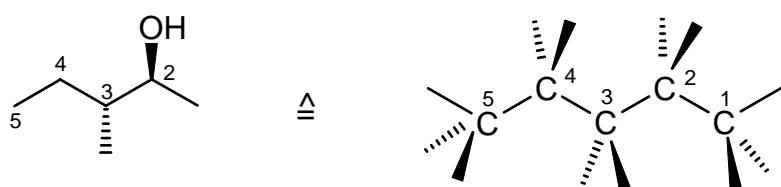


Kurzschriftweise



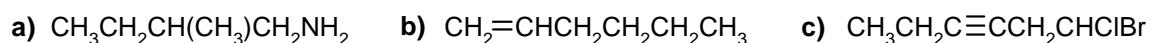
*Bei Strichformeln wird die Kette zickzackförmig angegeben (Ausnahme sp-Zentren). Jeder Knick bzw. das Ende eines Strichs bedeutet ein Kohlenstoffatom, es sei denn es ist ein Heteroatom angegeben. Die verbleibenden Valenzen am Kohlenstoff werden gedanklich durch Wasserstoffe ersetzt.

Keilstrichformen dienen zur Darstellung stereochemischer Beziehungen. Im folgenden Beispiel steht die OH-Gruppe an C-2 nach vorn, die CH₃-Gruppe an C-3 nach hinten.

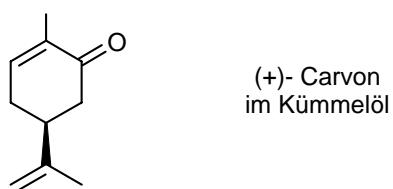


Wichtiger Hinweis: Solange Sie im Umgang mit Strukturformeln nicht sehr geübt sind (bei den meisten Studierenden wird dieser Punkt erst in höheren Semestern erreicht), sollten Sie Reaktionen grundsätzlich anhand von Lewis-Formeln diskutieren, weil Sie dann durch Beachtung der Vierbindigkeit des Kohlenstoffs Fehler leichter vermeiden können.

Übungen A4-1. Formen Sie die nachfolgenden Strukturformeln in die Lewis- (bzw. Kekulé)-Schreibweise sowie die Strich- (evtl. Keilstrich)-Schreibweise um.



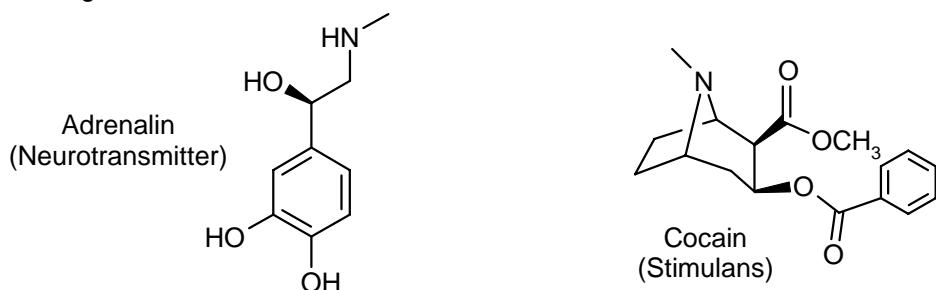
Übung A4-2. Nachfolgend erkennen Sie das Terpen (+)-Carvon in der Keilstrich-Schreibweise. Ergänzen Sie die nicht ausgeschriebenen Atome und ermitteln Sie daraus die Summenformel!



Übungen B4-1. Formen Sie die nachfolgenden Strukturformeln in die Lewis- (bzw. Kekulé)-Schreibweise sowie die Strich- (evtl. Keilstrich)-Schreibweise um.



Übung B4-2. Nachfolgend erkennen Sie zwei Naturstoffe in der Keilstrich-Schreibweise. Ergänzen Sie die nicht ausgeschriebenen Atome und ermitteln Sie daraus die Summenformeln!



Bindung durch Überlappung von Atomorbitalen und Hybridorbitalen

σ - und π -Bindungen durch Überlappung von Atomorbitalen

(Vollhardt 3. Aufl. S. 19/20, 4. Aufl. S. 27/28; Hart S. 29/30; Buddrus S. 20)

σ -Bindungen (Rotationssymmetrie um die Kern/Kern-Verbindungsachse) durch Überlappung von 1s/1s, 1s/2p und 2p/2p.

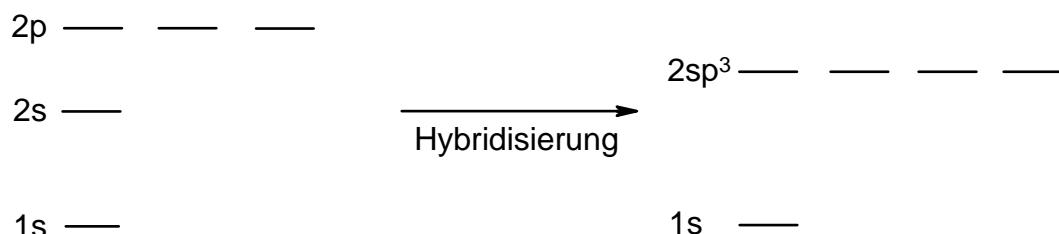
π -Bindungen durch Überlappung von 2p/2p.

Hybridorbitale

(Vollhardt, 3. Aufl., S. 21-25, 4. Aufl., S. 29-34; Hart, S. 30-33; S. 90-92; S. 123/124, Buddrus, S. 16/17)

Durch Mischen von Atomorbitalen am selben Atom erhält man Hybridorbitale. Dieses Mischen ist eine mathematische Operation und kein physikalischer Vorgang.

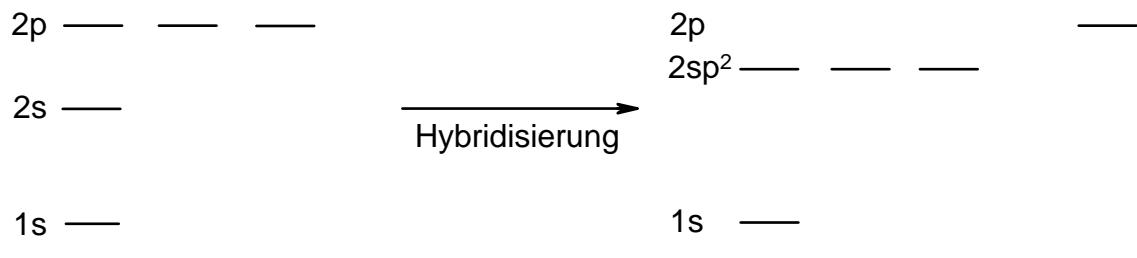
Um die Bindungsverhältnisse eines Kohlenstoffatoms mit vier Nachbaratomen zu beschreiben, wird das 2s-Orbital mit den drei 2p-Orbitalen gemischt, wobei man vier sp^3 Hybridorbitale (je 25 % s und 75 % p-Charakter) erhält (Video).



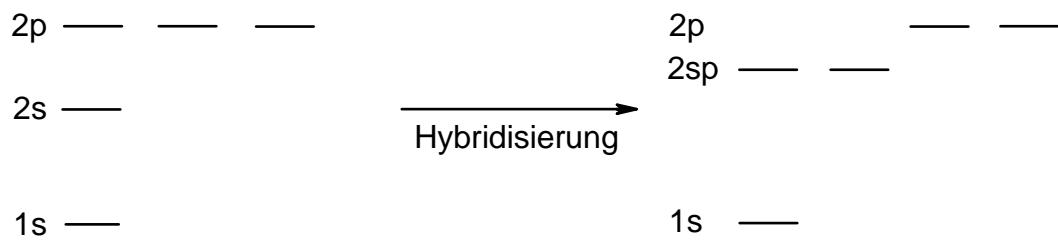
Diskussion der Bindungsverhältnisse in Methan

Einfach besetzte Hybrid-Orbitale können, wie vorher für einfach besetzte Atomorbitale besprochen, durch Wechselwirkung mit anderen einfach besetzten Atomorbitalen oder Hybridorbitalen σ -Bindungen ausbilden.

Um die Bindungsverhältnisse eines Kohlenstoffes mit drei Nachbaratomen zu beschreiben, wird das 2s-Orbital mit zwei 2p-Orbitalen gemischt, wobei drei sp^2 -Hybridorbitale (je 33 % s und 67 % p-Charakter) erhalten werden. Eines der 2p-Orbitale wird nicht einbezogen (Video).

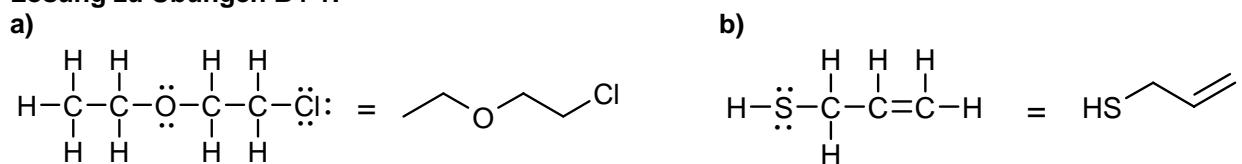


Um die Bindungsverhältnisse eines Kohlenstoffatoms mit zwei Nachbaratomen zu beschreiben, wird das 2s-Orbital mit einem der 2p-Orbitale gemischt, wobei zwei sp-Hybrid-Orbitale (je 50 % s, 50 % p-Charakter) erhalten werden, während die anderen beiden 2p-Orbitale nicht tangiert werden (Video).



Übung A4-3. Geben Sie die Hybridisierung aller Kohlenstoffe der in den Übungen A4-1, A4-2, B4-2 vorkommenden Moleküle an!

Lösung zu Übungen B4-1:



Lösung zu Übung B4-2:

