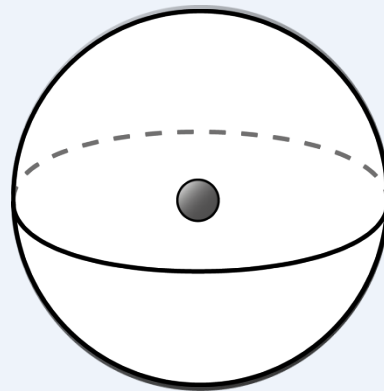


Molekülstruktur

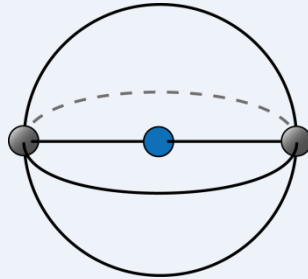
Molekülstruktur – VSEPR-Modell

- Modell der Valenzschalen-Elektronenpaar-Abstoßung
→ *valence shell electron pair repulsion*
- entwickelt in den 1950er Jahren von GILLESPIE und NYHOLM
- Erklärung der räumlichen Struktur von Molekülen und Molekül-Ionen durch die abstoßenden Kräfte zwischen Elektronenpaaren in der Valenzschale
- Doppel- und Dreifachbindungen werden wie ein Elektronenpaar behandelt
- freie/nicht bindende Elektronenpaare nehmen etwas mehr Platz in Anspruch als bindende Elektronenpaare



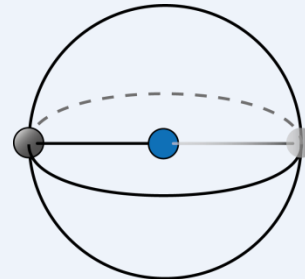
Struktur von Molekülen der allgemeinen Form AX_nE_m

- $AX_nE_m, n + m = 2$



AX_2
linear

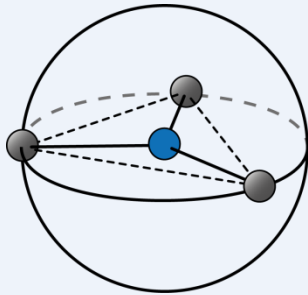
$\neq 180^\circ$



AX_1E_1

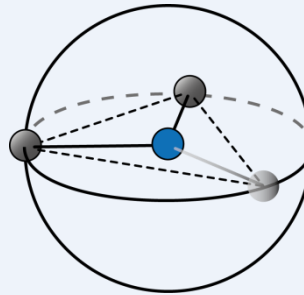
Struktur von Molekülen der allgemeinen Form AX_nE_m

- $AX_nE_m, n + m = 3$



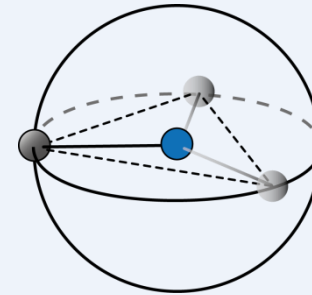
AX_3
trigonal-planar

$\sphericalangle 120^\circ$



AX_2E_1
gewinkelt

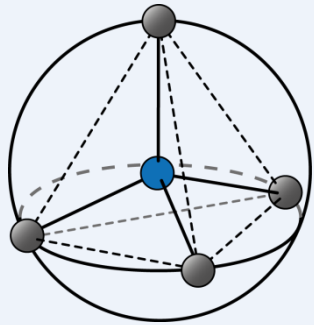
$\sphericalangle \approx 115^\circ$



AX_1E_2

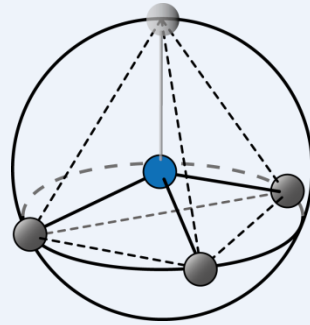
Struktur von Molekülen der allgemeinen Form AX_nE_m

- AX_nE_m , $n + m = 4$



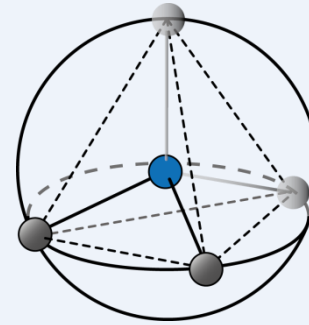
AX_4
tetraedrisch

$\sphericalangle 109,5^\circ$



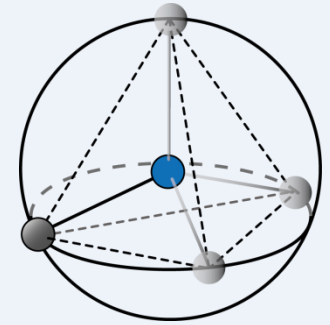
AX_3E_1
trigonal-pyramidal

$\sphericalangle \approx 107^\circ$



AX_2E_2
gewinkelt

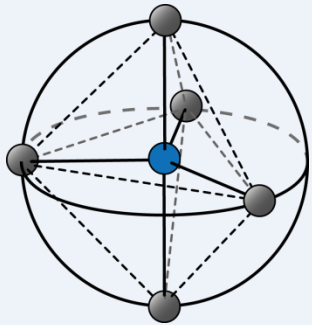
$\sphericalangle \approx 104^\circ$



AX_1E_3

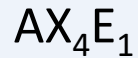
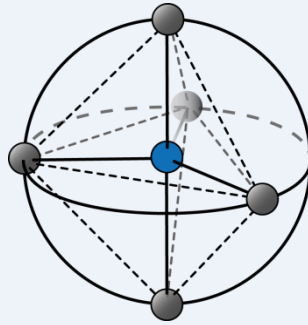
Struktur von Molekülen der allgemeinen Form AX_nE_m

- $AX_nE_m, n + m = 5$



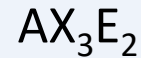
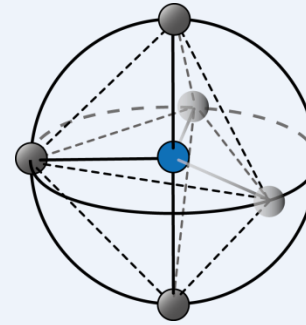
trigonal-bipyramidal

∠ $120^\circ/90^\circ$



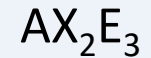
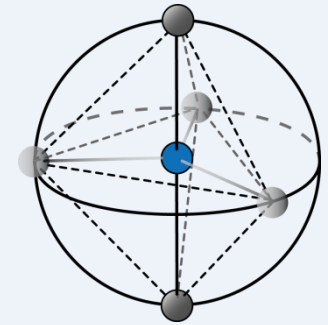
bispennoidal

∠ $175^\circ/110^\circ$



T-förmig

∠ $\approx 95^\circ$

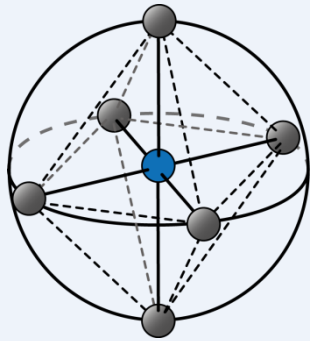


linear

∠ 180°

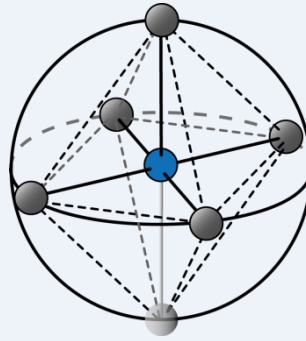
Struktur von Molekülen der allgemeinen Form AX_nE_m

- $AX_nE_m, n + m = 6$



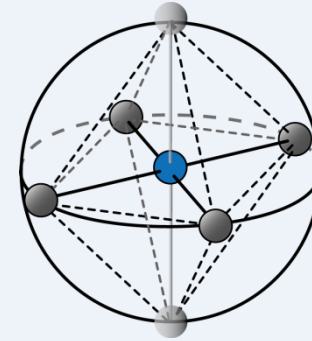
AX_6
oktaedrisch

$\sphericalangle 90^\circ$



AX_5E_1
quadratisch-pyramidal

$\sphericalangle \approx 85^\circ$

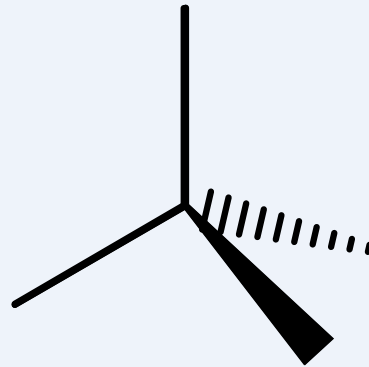


AX_4E_2
quadratisch-planar

$\sphericalangle 90^\circ$

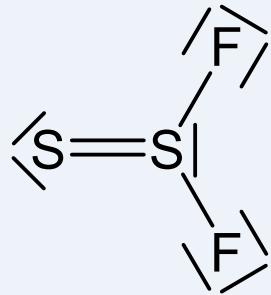
Darstellung von dreidimensionalen Molekülen

- Darstellung von Dreidimensionalität mittels Keilstrich-Schreibweise:
 - durchgezogene Linie → Bindung liegt in der Zeichenebene
 - ausgefüllter Keil → Bindung ragt nach vorne aus der Zeichenebene heraus
 - gestrichelter Keil → Bindung ragt nach hinten aus der Zeichenebene heraus

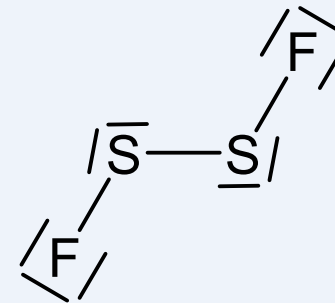


Isomere – Konstitutionsisomere

- *Isomere* (gr. ἴσος *isos*: gleich; gr. μέρος *méros*: Teil) sind Verbindungen, die bei gleicher Zusammensetzung unterschiedliche Molekülstrukturen haben.
- *Konstitutionsisomere* (lat. *constitutio*: Anordnung) unterscheiden sich in der Verknüpfung der Atome. Beispiel Dischwefeldifluorid (S_2F_2):



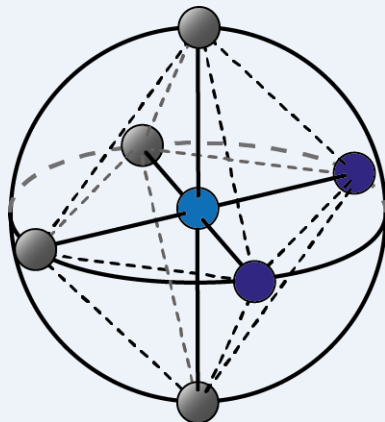
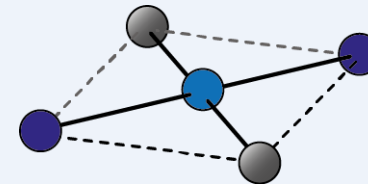
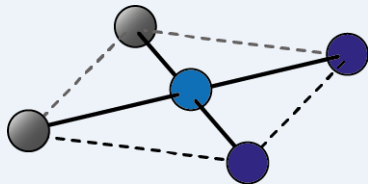
Thiothionylfluorid



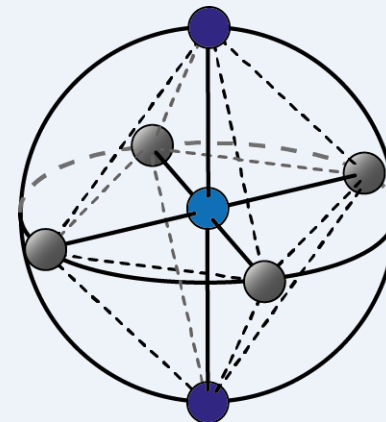
Difluordisulfan

Isomere – Stereoisomere

- *Stereoisomere* haben die gleiche Konstitution, aber eine andere räumliche Anordnung der Atome. Sie unterscheiden sich in ihrer Konfiguration.
- *Geometrische Isomere* (Diastereomere) treten z.B. bei quadratisch-planaren und oktaedrischen Molekülen auf:



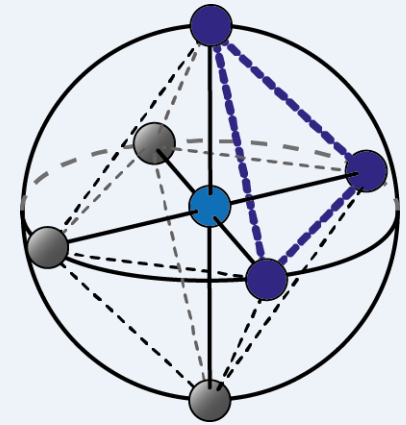
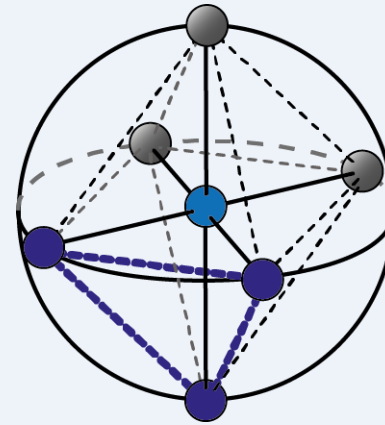
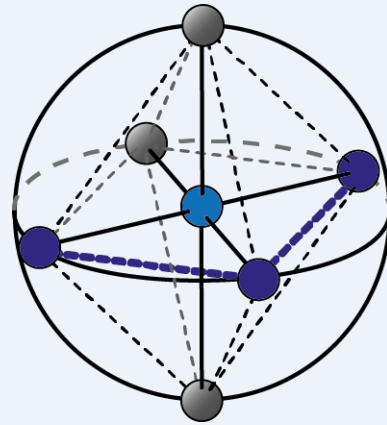
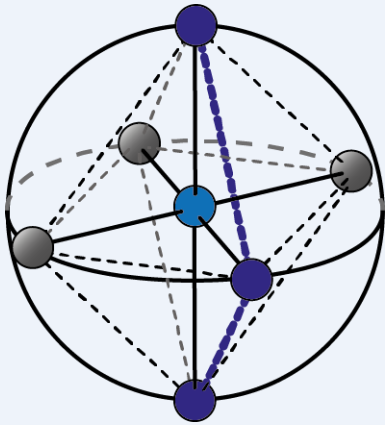
cis-Isomer
(von lat. *cis*: diesseits)



trans-Isomer
(von lat. *trans*: jenseits von)

Isomere – Stereoisomere

- *Stereoisomere* haben die gleiche Konstitution, aber eine andere räumliche Anordnung der Atome. Sie unterscheiden sich in ihrer Konfiguration.
- *Geometrische Isomere* (Diastereomere) treten z.B. bei oktaedrischen Molekülen auf:



mer-Isomer

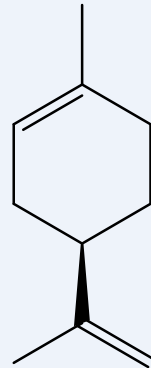
(von lat. *circulus meridianus*: Mittagskreis)

fac-Isomer

(von lat. *facies*: Gesicht)

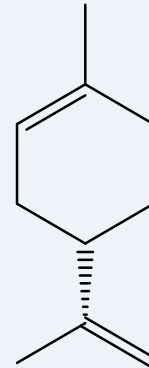
Warum? – Was macht die räumliche Struktur so wichtig?

- Beispiel Geruchssinn:

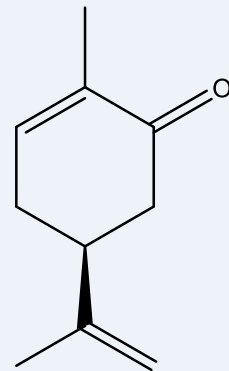


Zitrone

Limonen

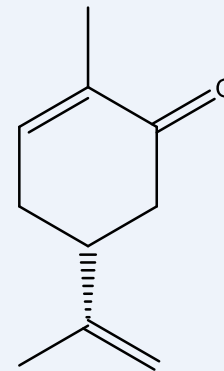


Orange



Kümmel

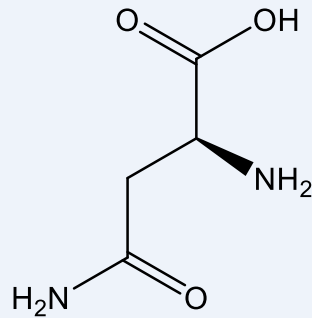
Carvon



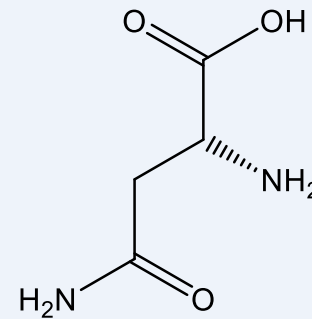
Minze

Warum? – Was macht die räumliche Struktur so wichtig?

- Beispiel Geschmackssinn:



bitter



süß

Asparagin