**Atom- und Molekülvisualisierung im Chemie-Unterricht – eine Sammlung von Unterrichtseinheiten**

Michael Bleichenbacher und Tilmann Geldbach

Kantonsschule Zürich Nord

## Über das Projekt

Es gibt inzwischen eine Vielzahl kostenlos installierbarer Programme und Browser-basierten Anwendungen welche es erlauben, Atomverbände und Moleküle visualisieren. Ohne grossen Aufwand lassen sich so die dreidimensionalen Eigenschaften darstellen, Bindungswinkel und Bindungslängen bestimmen, sowie weitere Messungen wie etwa das Dipolmoment und die Elektronendichteverteilung im Molekül ermitteln.

So reizvoll diese Möglichkeiten auch sind, so schwierig mag es sein, sich für eine bestimmte Anwendung zu entscheiden und diese in den Unterricht zu integrieren. Im Folgenden soll eine Reihe möglicher Unterrichtseinheiten vorgestellt werden, welche sich ohne grösseren Aufwand umsetzen lassen und keine über den normalen Chemie-Unterricht hinausgehende Kenntnisse verlangen.

Vermutlich ist das meiste, was hier vorgestellt wird, schon in der einen oder anderen Form irgendwo publiziert oder durchgeführt worden – insbesondere im Molekularium.ch finden sich viele ähnliche (und noch viele andere) Beispiele … es ist also nicht unser Anspruch, etwas vollkommen neues und aussergewöhnliches zu präsentieren, sondern vielmehr eine Anregung für den Einsatz derartiger Programme zu liefern und erste Hürden diesbezüglich abzubauen. Der wesentliche Unterschied besteht nun vor allem darin, dass hier fertige Unterrichtseinheiten/Arbeitsblätter vorliegen, in welchen die SchülerInnen und Schüler Schritt für Schritt angeleitet werden.

Es war uns deshalb wichtig, relativ einfache Aufgaben umzusetzen, welche die Schülerinnen und Schüler im besten Fall selbstständig bearbeiten (im Unterricht oder zuhause) und korrigieren können. Bewusst wird nicht versucht, sich auf möglichst wenige Programme zu beschränken, sondern eine Auswahl zu präsentieren, welche in unseren Augen besonders geeignet, beziehungsweise besonders attraktive Möglichkeiten bietet. Indem der Umgang mit diesen Programmen vermittelt wird, lassen sich die so gewonnen Fertigkeiten auf beliebige Fragestellungen übertragen.

Die vorliegenden Unterrichtseinheiten sollen als leicht anzupassende Vorlage dienen und den möglichen Einsatz demonstrieren. Von jeder Einheit liegt einerseits eine Version für die Schülerinnen und Schüler vor, anderseits eine Version mit Musterlösungen sowie Kommentaren und möglichen Einschränkungen/Problemen bei der Verwendung.

Die meisten der vorliegenden Einheiten sollten sich innerhalb einer Lektion bearbeiten lassen – je nachdem, wie geübt die SchülerInnen und Schüler bereits im Umgang mit den Software-Anwendungen sind. Dabei nimmt die Komplexität der Aufgaben schrittweise zu: Während in den ersten beiden Einheiten die Software eine reine Kontrollfunktion übernimmt, geht es bei den weiteren Aufgaben in zunehmendem Masse auch darum, Messungen vorzunehmen oder spezifische geometrische Konstellationen zu untersuchen.

Auch wenn jede Unterrichtseinheit völlig eigenständig ist, so macht es Sinn, die Schülerinnen und Schüler regelmässig mit derartigen Aufgaben und Fragestellungen in Kontakt zu bringen, damit sie auch eine gewisse Routine im Umgang mit derartigen Programmen bekommen.

## Motivation

Die Kombination der Lerninhalte mit entsprechender Software ergibt eine Vielzahl an lernwirksamen Vorteilen:

* Das Lernen wird abwechslungsreicher, interaktiver und damit auf mehr kognitive Kanäle erweitert,   
  was die Motivation und die Freude am Lernen vergrössert.
* Die Individualisierung des Lernens wird für die Schülerinnen und Schüler erleichtert und es ergibt sich die Möglichkeit einer Selbstkontrolle betreffend der korrekten Lösung der Aufgaben
* Die Lehrperson erhält mehr Möglichkeiten, lernschwächere Schülerinnen und Schüler individuell zu betreuen und anzuleiten
* Die erworbene Routine im Umgang mit den Programmen lässt sich zu einem späteren Zeitpunkt bei anderen Themen im Unterricht nutzen
* Die Programme zur Molekülvisualisierung knüpfen nahtlos an Anforderungen an der Hochschule an und stellen ein Werkzeug dar, welches auch in anspruchsvollerem Kontext verwendet werden kann.

Zwar ist die Anwendung der Programme in den meisten Fällen sehr einfach, es besteht aber die grosse Gefahr, dass die mit den Programmen erhaltenen Ergebnisse nicht ausreichend reflektiert werden und durch fehlerhafte Eingabe Fehlvorstellungen resultieren. Das Ziel der zu erarbeitenden Module besteht darum nicht nur darin, Schüler- und LehrerInnen an die Software heranzuführen, sondern durch exemplarische und unmittelbar anwendbare Beispiele / Module alle Aspekte und mögliche Fehlerquellen zu diskutieren. Anhand der gewählten Beispiele sollte es dann den Lehrpersonen leichtfallen, die vorgestellten Konzepte nach Wunsch zu erweitern und anzupassen.

## Übersicht über die Einheiten

1.: Zeichnen von Molekülen,

* Übungen zur Skelett- und Keil-Strich-Darstellung

2.: VSEPR-Modell

* Lernen typischer Geometrien und Bindungswinkel
* Einfluss nichtbindender Elektronenpaare auf die Geometrie

3.: Polare Bindungen und Dipol-Moleküle

* Richtung von Polaritätsvektoren
* Einfluss von Bindungswinkel und Elektronegativität
* Vektoraddition

4.: Zwischenmolekulare Wechselwirkungen

* Vergleich von Molekülen mit/ohne permanentem Dipol
* Vergleich von Molekülen mit/ohne Wasserstoff-Brücken
* Anwendung von ZMK auf Schmelzpunkt von HF und H2O

5.: Struktur der Elemente am Beispiel der 3. Periode

* Übergang von der Metallbindung zur Kovalenzbindung
* Ermittlung der Dichte anhand der Kristallstruktur

6.: Modifikationen von Kohlenstoff

* Bestimmung von Bindungslängen und Bindungswinkel im Kristall
* Korrelation zwischen Struktur und Materialeigenschaften

7.: Untersuchung eines Proteins: Hämoglobin

* Betrachtung von Strukturelementen eines Proteins
* Untersuchung von Komplexen

8.: Untersuchung eines Proteins: Acetylcholinesterase

* Untersuchung des katalytischen Zentrums eines Enzyms
* Substrat-Enzym-Wechselwirkungen
* Korrelation von Struktur und Toxizität

## Verwendete Programme und Webseiten

Im Folgenden sollen die für die Unterrichtseinheiten verwendeten Websites und Programme kurz vorgestellt und Vor-Und Nachteile aufgelistet werden:

**Phet** <https://phet.colorado.edu/de/>

Das Projekt "PhET interaktive Simulationen" der University of Colorado Boulder wurde 2002 vom Nobelpreisträger Carl Wieman gegründet und bietet kostenlose interaktive Simulationen aus Mathematik und Wissenschaft.

* Browser-basierte Anwendung
* Vielzahl möglicher Simulationen zum Chemieunterricht
* Qualität der Simulationen sehr unterschiedlich
* Ohne konkreten Arbeitsauftrag im Selbststudium nicht zwingend sinnvoll

**MolView** <https://molview.org>

Mit MolView lassen sich auf einfache Weise Moleküle visualisieren und auch selbst zeichnen. Ebenso können Bindungslängen und Winkel gemessen werden, sowie Dipolvektoren und eine Elektronendichteverteilung an der Moleküloberfläche dargestellt werden.

* Browser-basierte Anwendung
* Leicht zu bedienen
* Direkte Anbindung an Datenbanken – dies erlaubt schnelles Auffinden insbesondere von MS und IR Spektren
* Einfache Darstellung der Elektronendichteverteilung im Molekül
* Möglichkeit, Bindungsvektoren und Dipolmoment darzustellen
* Qualität der Ergebnisse nicht immer gut
* Erlaubt im Editor auch das Zeichnen unsinniger Moleküle
* Im Vergleich zu Avogadro oder Jmol eingeschränkte Funktionalität
* Keine H-Brücken
* Geometrie-Optimierung weniger eindrucksvoll als bei Avogadro; nur 100 Iterationen je Optimierung

**Mol\* / Protein Data Bank** <https://molstar.org> [www.rcsb.com](http://www.rcsb.com)

Mol\* ist in gewissen Hinsicht der Browser-basierte Nachfolger von Jmol (man erspart sich somit die nicht immer ganz problemlose Verwendung von Java) und bietet sich insbesondere für die Betrachtung komplexer STrkturen (Proteine) an.

Mol\* ist standardmässig in der Protein Data Bank für die Darstellung von Strukturen eingestellt und die Oberfläche zeigt sich etwas übersichtlicher, als wenn man Mol\* direkt aufruft. Für die Betrachtung von Proteinstrukturen empfiehlt es sich daher, dies über die Seite der Protein Data Bank zu machen und nicht die .cif-dateien in Mol\* zu öffnen.

* Browser-basierte Anwendung
* Sehr viele (komplexe) Einstellungsmöglichkeiten
* Bedienung nicht immer intuitiv, insbesondere bei Mol\*

**Molekularium** [www.molekularium.ch](http://www.molekularium.ch)

Umfassende Sammlung von Visualisierungen von Molekülen, Festkörperstrukturen und Animationen.

* Browser-basierte Anwendung
* Grosse Sammlung unterrichtsrelevanter Visualisierungen
* Sehr viele Einstellungsmöglichkeiten
* Sehr schneller Zugriff auf spezifische Ansichten – insbesondere bei Enzymen
* Anzahl an Möglichkeiten könnte ohne detaillierte Anleitung überfordern
* Im ersten Moment beschränkt auf die vorgegebene Auswahl an Beispielen
* Aufgrund der vorjustierten Ansichten (zum Beispiel bei Enzymen) möglicherweise weniger nachvollziehbar, als wenn Schritt für Schritt selbst herausgearbeitet

**AVOGADRO / AVOGADRO2** <https://www.openchemistry.org/projects/avogadro2/>

Avogadro 2 ist eine Software, mit welcher sich einerseits Moleküle und Strukturen visualisieren lassen, andererseits Geometrien optimieren und Wechselwirkungen simulieren lassen. Momentan sind die Möglichkeiten bei AVOGADRO2 noch eingeschränkt (im Vergleich zur älteren, aber nicht mehr weiterentwickelten Version 1.2) und es ist zu hoffen, dass hier in den kommenden Monaten noch Verbesserungen gemacht werden.

* Eindrucksvolle Geometrie-Optimierung (insbesondere in Version 1.2)
* Möglichkeit zur Simulation zwischenmolekularer Wechselwirkungen
* Sehr viele Möglichkeiten
* Software muss installiert werden
* Software nicht übertrieben stabil
* Aktuellste Version 1.99 noch mit eingeschränkter Funktionalität

**VESTA** <https://jp-minerals.org/vesta/en/>

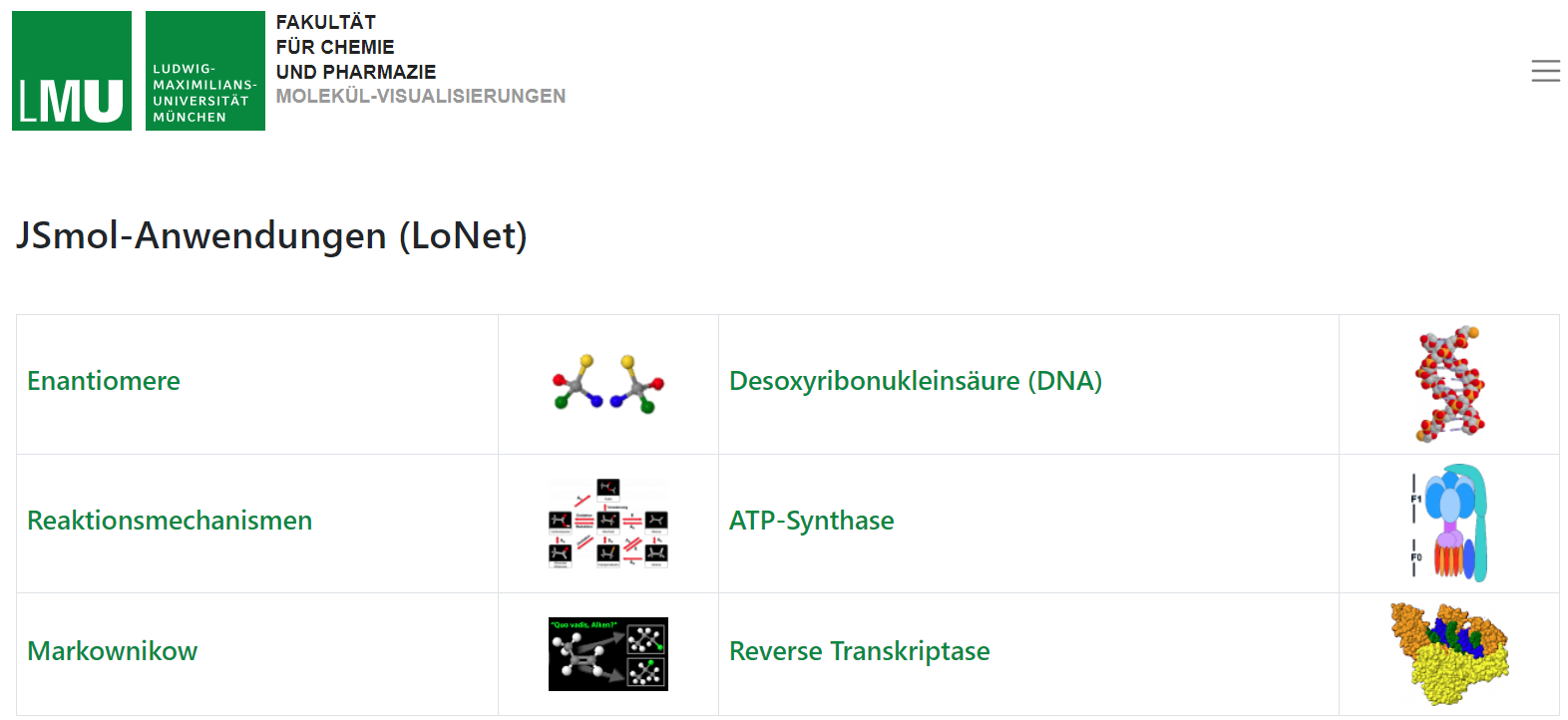
Bei VESTA handelt es sich um ein Programm zur 3D-Visualisierung, welches sich insbesondere für die Betrachtung von anorganischen Substanzen anbietet.

* Übersichtliche Software für alle Plattformen, ideal für die Visualisierung von anorganischen Kristallstrukturen
* Einfache Erzeugung von Koordinationspolyedern – insbesondere bei Salzen interessant
* Software muss installiert werden
* Nicht möglich, einzelne Atome zu löschen

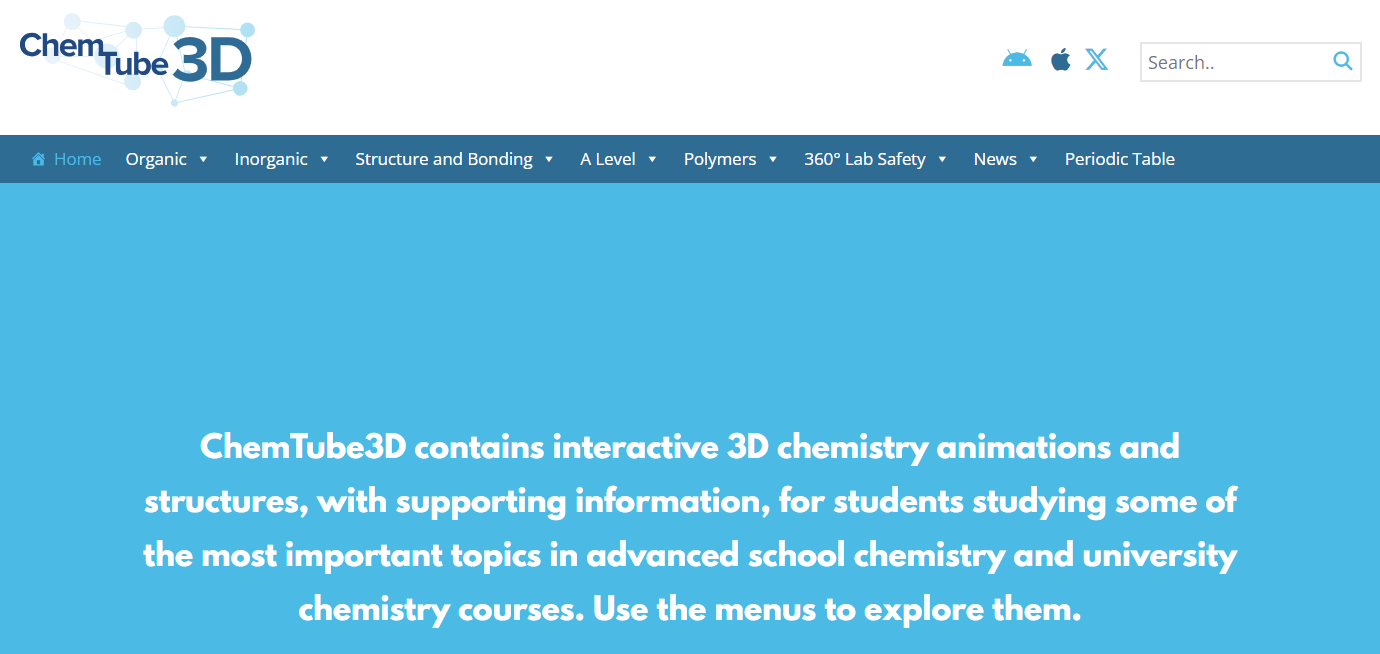
## Weitere Lohnenswerte Ressourcen für die Molekülvisualisierung

Molekülvisualisierungen der LMU München <https://molvis.cup.uni-muenchen.de>

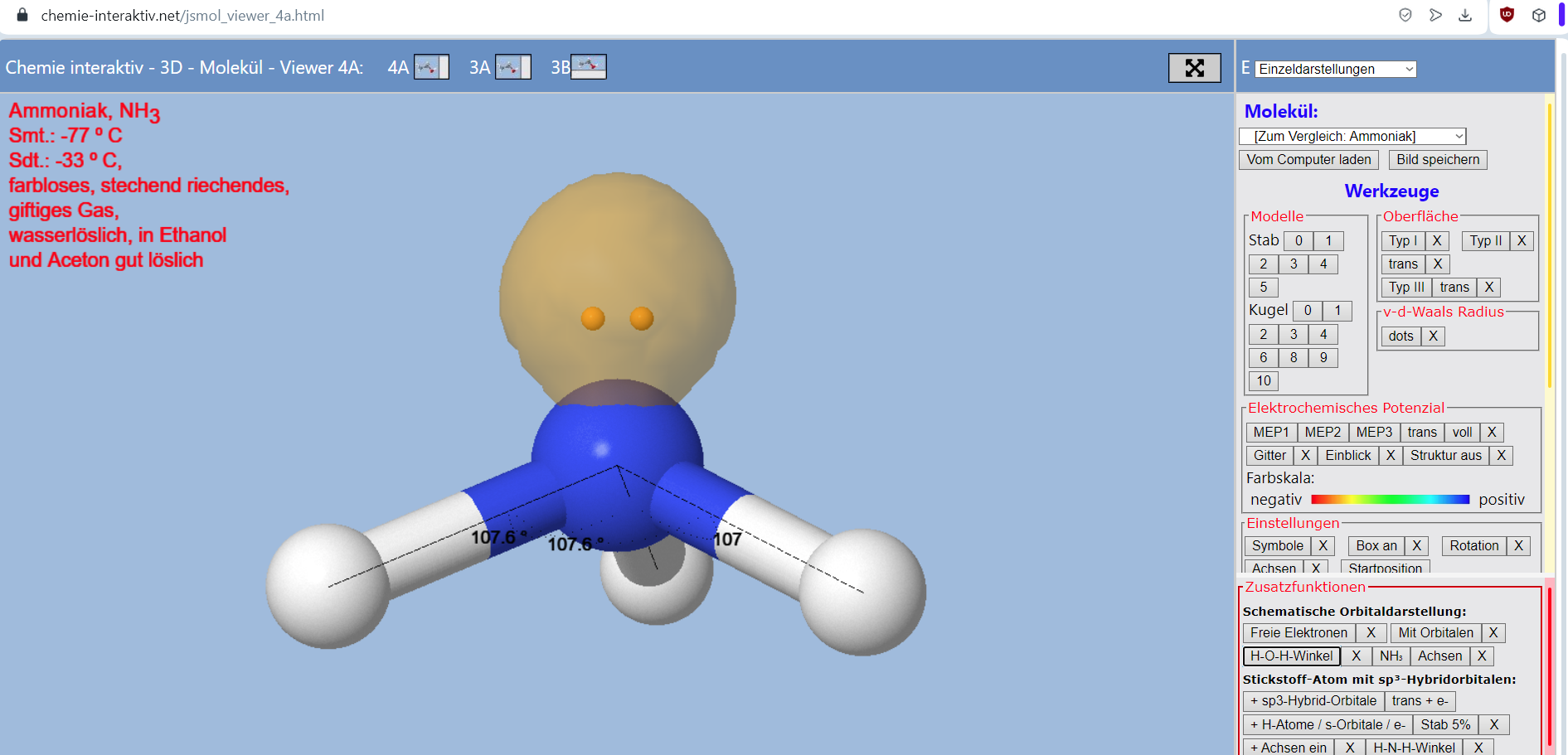
* Tolle Visualisierungen zu Reaktionsmechanismen (elektrophile Addition, Nucleophile Substitution)
* Sehr gute Visualisierung von IR-Schwingungen



Vielzahl von Animationen aus allen Bereichen der Chemie <https://www.chemtube3d.com>



Molekül-Visualisierung <https://chemie-interaktiv.net/jsmol_viewer_4a.html>



# Moleküldarstellung und Konstitutionsisomerie

## Motivation

Das Darstellen von Molekülstrukturen ist eine der zentralen Kompetenzen in der Chemie. Anhand der folgenden Übungen sollen die Schülerinnen und Schüler an eher einfachen Molekülen die Regeln für die Valenzstrichformeln, Skelettformeln und Keil-Strich-Formeln selbstständig trainieren und überprüfen.

## Voraussetzungen

* Regeln zur Darstellung von Valenzstrichformeln
* Regeln zur Darstellung von Skelettformeln
* Prinzip der Konstitutionsisomerie (und gegebenenfalls der Konfigurationsisomerie)
* Regeln zur Darstellung von Keil-Strich-Formeln

## Ablauf

1. MolView Valenzstrichformeln in Skelettformeln übersetzen - Selbstkontrolle der Ergebnisse mit MolView
2. Konstitutionsisomere als Valenzstrichformeln und Skelettformeln darstellen - Selbstkontrolle der Ergebnisse mit MolView
3. Ausgehend von der Skelettformel Moleküle in der Keil-Strich-Darstellung zeichnen - Selbstkontrolle der Ergebnisse mit MolView

#### Vorteile:

* Möglichkeit, Strukturen selbstständig zu überprüfen (siehe Hinweise)
* Nicht an Modelle (z.B. Molymod) gebunden
* Einfaches Umschalten zwischen der Skelett-Darstellung und der Lewis-Formel

#### Nachteile:

* Darstellung der Valenzstrichformel in MolView weicht möglicherweise von der gewohnten Darstellung ab
* Nichtbindende Elektronenpaare können nicht visualisiert werden

## Hinweise und Einschränkungen

Im Vorfeld muss man sich überlegen, welche Regeln einem für die Darstellung von Valenzstrichformeln und Skelettformeln wichtig sind. Am Beispiel von 3-Methylpentansäure sollen einige der Punkte aufgezeigt werden, welche bei Verwendung von MolView problematisch sein können oder zumindest zu Widersprüchen führen.

1. Sollen klassische Valenzstrichformeln mit 90° Winkeln oder mit Zick-Zack gezeichnet werden? Erzeugt man in MolView Darstellungen, welche sämtliche Atome und Atomsymbole beinhalten, so erhält man eine Darstellung, in welcher die Hauptkette in Zick-Zack-Anordnung ist. Dies hat allerdings auch den Vorteil, dass man schon sehr nahe an den Regeln für Skelettformeln und Keil-Strich-Formeln ist.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| Valenzstrichformel mit 90° Winkeln   * Verbreitete Darstellungsform * Enthält nichtbindende Elektronenpaare * Unrealistische Bindungswinkel | Valenzstrichformel in MolView   * Realitätsnähere Bindungswinkel * Darstellung nichtbindender Elektronenpaare in MolView nicht möglich |
|  |  |
| Skelettformel in MolView   * Entspricht den üblichen Regeln (kann auch schwarz-weiss dargestellt werden) | 3D-Ansicht in MolView   * Konformation weicht bei den meisten Molekülen von der Skelettformal ab |

1. Erstellt man eine Übung zur Keil-Strich-Formeln, so sollte man unbedingt im Vorfeld überprüfen, wie das jeweilige Molekül im 3D-Modell dargestellt wird. Eine möglicherweise andere Konformation könnte zu Verwirrung führen. Möglicherweise ergeben sich aber auch fehlerhafte Darstellungen: So wird beispielsweise die 3D-Struktur von Propadien fälschlicherweise planar dargestellt., wenn dieses über den Namen Propadien oder Allen aufgerufen wird. Zeichnet man das Molekül im Editor hingegen selbst, so erhält man die korrekte Struktur mit einem Diederwinkel von 90°.
2. Bei Aufgabe 3c gibt es noch ein Konformationsisomer (E/Z) – hier muss man sich überlegen, inwieweit dies thematisiert werden soll, oder nicht.
3. Nach dem gleichen Prinzip wie das nun folgende Arbeitsblatt kann man auch Aufgaben erstellen, bei welchen die Schülerinnen und Schüler die Nomenklatur organischer Moleküle lernen sollen.

# 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 SiF4 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.



* Doppelbindungen werden durch zwei parallele Linien dargestellt, Dreifachbindungen entsprechend durch drei parallele Linien; lineare Molekülteile müssen auch in der Skelettformel linear dargestellt 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: **C6H12** | Summenformel: **C8H16** |
| Cyclohexan | 2-Ethyl-3-methyl-1-pentene |
|  |  |
| Summenformel: **C9H7NO** | Summenformel: **C10H15N2** |
| 7-Hydroxyquinoline | Nicotine |

### 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).

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| 1-Hexen-5-yne |  |

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| 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 C2H6O: | | |
|  | Lewis-Formel |  |  |
|  | 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° oder 180° erwarten, sollte Ihre Darstellung auch diesem Winkel entsprechen.

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

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Valenzstrichformel | Skelettformel |
| C3H6  (zwei Isomere)  Propene  Cyclopropane |  |  |
|  |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Valenzstrichformel | Skelettformel |
| C3H4  (drei Isomere)  Propyne  Cyclopropene  Propadiene |  |  |
|  |  |
|  |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Valenzstrichformel | Skelettformel |
| C2H4O2  (acht/neun Isomere)  Acetic acid  Ethen-1,2-diol  Ethen-1,1-diol  2-Hydroxyethanal  Oxiran-2-ol  1,2-Dioxetane  1,3-Dioxetane  Methyl formate |  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |

# 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**

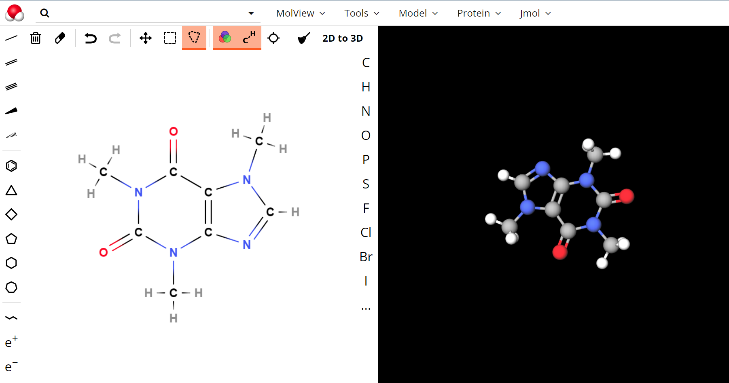
Zeichnen Sie die folgenden Moleküle, welche in der Skelettdarstellung gegeben sind, als vollständige Valenzstrichformeln in der **Keil-Strich-Darstellung**.

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

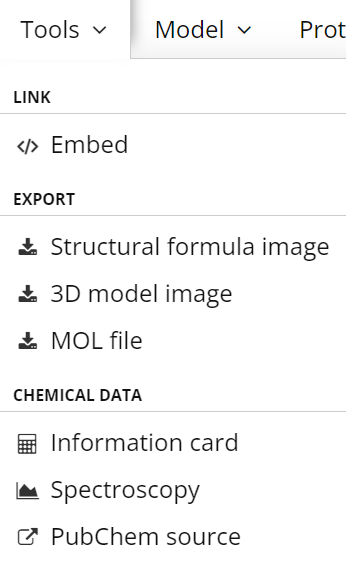
Alle drei Aufgaben können mit Hilfe von MolView überprüft werden. Öffnen Sie die Website von MolView: https://molview.org und öffnen Sie das Programm, indem Sie auf Close Popup klicken; Sie sollten nun die abgebildete Seite sehen.

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.

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.

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

Um die Summenformel nachvollziehen aktivieren Sie das Feld **C-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.

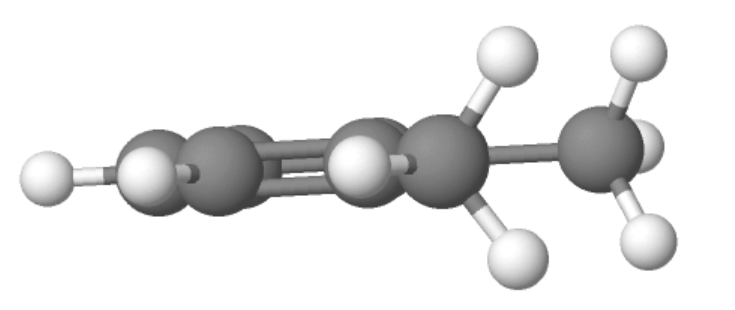
Um die Valenzstrichformel zu kontrollieren aktivieren Sie das Feld **C-H**, um alle Atomsymbole und H-Atome anzuzeigen.

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

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 Bildschirmebene ist – sie sehen dann auf einen Blick, welche Atome in der Bildebene liegen und welche aus dieser nach vorne, beziehungsweise hinten herausragen.



Papierebene