

2. Klassische Strukturlehre

2.1 Verhältnisformel und Molekülformel

(siehe: Allgemeine Chemie I, hier nur Zusammenfassung)

Atomgewicht werden in atomaren Masseneinheiten angegeben. **Definition:** M_A von $^{12}\text{C} = 12.0$. Obwohl die einzelnen Kernsorten ganze Zahlen von Protonen und Neutronen enthalten, ergeben sich wegen der unterschiedlichen Anteile an verschiedenen Isotopen bei natürlicher Häufigkeit für die einzelnen Elemente nicht-ganzzahlige Atommassen.

Beispiel: Chlor (75.5% ^{35}Cl , 24.5% ^{37}Cl) $M_A = 35.453$

Einzelne Moleküle enthalten zwar immer entweder ^{35}Cl oder ^{37}Cl , für makroskopische Mengen muss aber mit dem statistisch gewichteten Wert gerechnet werden.

Die **Verhältnisformel** gibt an, welche Atome in welchem Verhältnis zueinander in einer Verbindung vorkommen: z.B. (CH_2O), ($\text{C}_5\text{H}_4\text{NCl}$). Sie wird aus dem Resultat der Verbrennungsanalyse berechnet.

Beispiel: Einwaage	1.824 mg Substanz	
Verbrennungsergebnis:	2.681 mg CO_2	(Molekulargewicht 44.01)
	1.090 mg H_2O	(Molekulargewicht 18.015)

Berechnung der Gewichtsanteile C,H,O:

Kohlenstoff:

$$\frac{\text{Gewicht } (\text{CO}_2) \cdot \text{Atomgewicht } (\text{C})}{\text{Molekulargewicht } (\text{CO}_2)} = \frac{2.681 \text{ mg} \cdot 12}{44.01} = 0.7312 \text{ mg}$$

Wasserstoff:

$$\frac{\text{Gewicht } (\text{H}_2\text{O}) \cdot 2 \cdot \text{Atomgewicht } (\text{H})}{\text{Molekulargewicht } (\text{H}_2\text{O})} = \frac{2 \cdot 1.090 \text{ mg} \cdot 1.001}{18.015} = 0.1211 \text{ mg}$$

Gewichtsprozente:

Kohlenstoff: $100 \times 0.7312 \text{ mg} / 1.824 \text{ mg} = 40.09 \%$

Wasserstoff: $100 \times 0.1211 \text{ mg} / 1.824 \text{ mg} = 6.64 \%$

Sauerstoff: durch Differenz $100\% - 40.09\% - 6.64\% = 53.27\%$

Atomverhältnis

	Gewichtsprozente : Atomgewichte	Division durch kleinste	Atomverhältnis
Kohlenstoff:	$40.09 : 12 = 3.36$: 3.33	≈ 1
Wasserstoff:	$6.64 : 1.008 = 6.64$: 3.33	≈ 2
Sauerstoff:	$53.27 : 16.00 = 3.33$: 3.33	≈ 1

Verhältnisformel: $\text{C}_1\text{H}_2\text{O}_1 = (\text{CH}_2\text{O})$

Diese Verhältnisformel gilt für sehr viele Moleküle: z.B. Formaldehyd, Essigsäure, Traubenzucker.

Die **Molekularformel** oder **Summenformel** gibt an, wieviel Atome jedes Elements im Molekül vorhanden sind. Sie wird aus der Verhältnisformel erhalten, wenn zusätzlich das **Molekulargewicht** (auch Formelgewicht M_F genannt) bekannt ist. Das Molekulargewicht wird in der Regel durch Massenspektrometrie erhalten. Andere Methoden sind die Ebullioskopie (Siedepunktserhöhung), Dampfdruckosmometrie oder Kryoskopie (Gefrierpunktserniedrigung)

Beispiel: Traubenzucker: M^+ im Massenspektrum 180, Verhältnisformel $(CH_2O)_n$ (30 für $n=1$),
es muss um 6 erweitert werden, die **Molekülformel** von Traubenzucker ist $C_6H_{12}O_6$

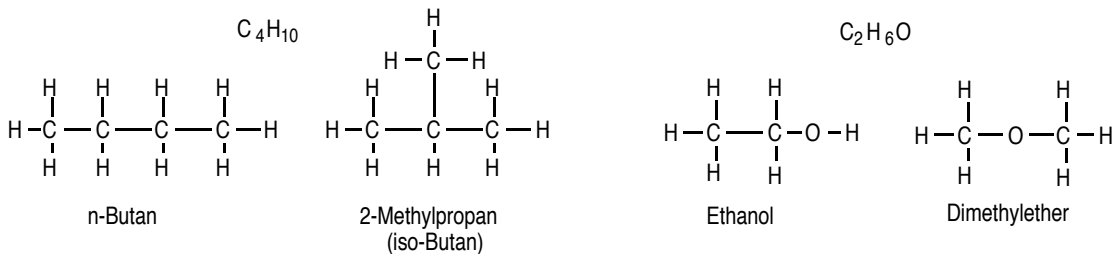
2.2. Konstitution

2.2.1 Konstitution und Konstitutionsisomere

Die Eigenschaften einer Verbindung sind durch die Molekülformel allein noch nicht bestimmt, sondern sie hängen auch von der Art ab, wie die einzelnen Atome im Molekül verbunden sind. Verbindungen mit gleicher Molekülformel können völlig unterschiedliche Eigenschaften haben, weil die Atome in ihnen unterschiedlich verbunden sind.

Die **Konstitution** eines Moleküls beinhaltet sowohl die Elementarzusammensetzung (Molekülformel) als auch die Verbundenheit der Atome untereinander. Sie wird als zweidimensionale Darstellung in der **Strukturformel** dargestellt, in der die Verbundenheit von Atomen durch einen Strich symbolisiert wird. **Konstitutionsisomere** sind Moleküle mit gleicher Molekülformel aber unterschiedlicher Verbundenheit.

Beispiele für Konstitutionsisomere:



2.2.2 Konstante Valenzen

Die klassische Strukturlehre von Kekulé, Couper, Butlerow und anderen postulierte, dass jedes Element eine konstante Wertigkeit besitze, d.h. eine bestimmte Zahl von Bindungen zu anderen Atomen eingehen könne.

Für die Hauptelemente in der organischen Chemie heisst das:

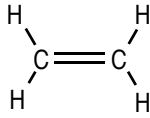
Wasserstoff (H)	ist	1-wertig
Kohlenstoff (C)	ist	4-wertig
Stickstoff (N)	ist	3-wertig
Sauerstoff (O)	ist	2-wertig

Es muss betont werden, dass dieses Ergebnis damals ohne irgendeine Kenntnis des Atomaufbaus und der Rolle von Bindungselektronen, sondern allein aufgrund der gefundenen Molekülformeln und des Phänomens der **Konstitutionsisomerie** erhalten wurde.

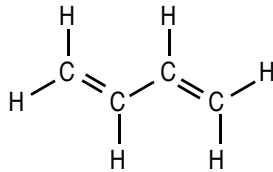
2.2.3 Mehrfachbindungen, Ketten und Ringe

Die Valenzen (zur Ausbildung von Bindungen fähige Stellen) mehrwertiger Atome können auch durch Mehrfachbindungen (Doppel- und Dreifachbindungen) abgesättigt werden:

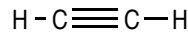
Beispiele:



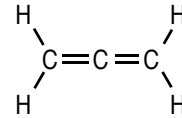
Ethen



1,3-Butadien



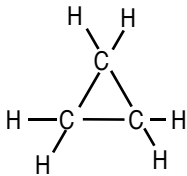
Ethin



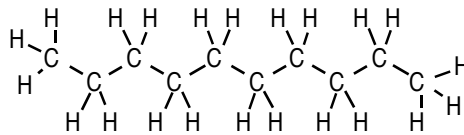
Allen

In organischen Molekülen sind mehrwertige Atome (besonders Kohlenstoff) oft als lineare und verzweigte Ketten oder als Ringe miteinander verbunden:

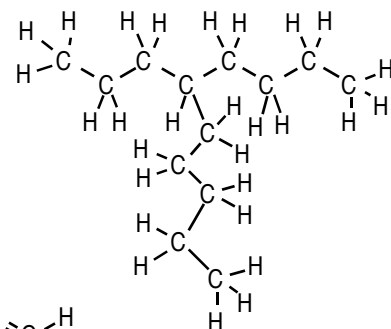
Beispiele



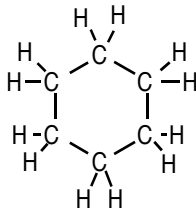
Cyclopropan



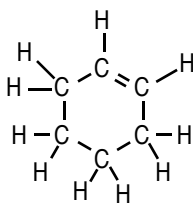
Decan



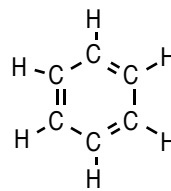
5-Propyl-decan



Cyclohexan



Cyclohexen



Benzol

2.2.4 Bestimmung der Anzahl Doppelbindungen / Ringe aus der Molekülformel

Da jede Mehrfachbindung und jeder Ring zwei Valenzen absättigt, die sonst durch Bindungen zu anderen Atomen abgesättigt würden, kann aus der Molekülformel der sogenannte Doppelbindungsparameter $F = \text{Anzahl Doppelbindungen} + 2 \times \text{Anzahl Dreifachbindungen} + \text{Anzahl Ringe}$ bestimmt werden.

Die Molekülformel sei $V_a W_b X_c Y_d Z_e$

Die Formel lautet: $F = (2a + 2 + d + 3e - b)/2$ a = vierwertige (V=C, Si)

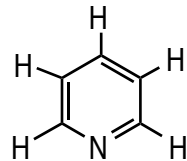
b = einwertige (W=H, Cl, Br, I)

c = zweiwertige (X=O)

d = dreiwertige (Y=N)

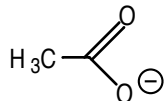
e = fünfwertige (Z=P, S)

Beispiel: Pyridin C_5H_5N $F = (2 \times 5 + 2 + 1 - 5) / 2 = 4$ (drei Doppelbindungen und ein Ring)



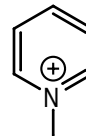
Beachte: Kommen in der Strukturformel Atome mit Formalladungen (= andere als die Standardwertigkeit der neutralen Atome) vor, so muss die effektive Wertigkeit berücksichtigt werden. Beispiele

Acetat Ion:



Hier ist das Sauerstoffatom mit der formalen negativen Ladung einwertig

N-Methylpyridinium Ion



Hier ist das Stickstoffatom vierwertig

2.2.5 Strukturformeln: Symbolik und abgekürzte Schreibweise

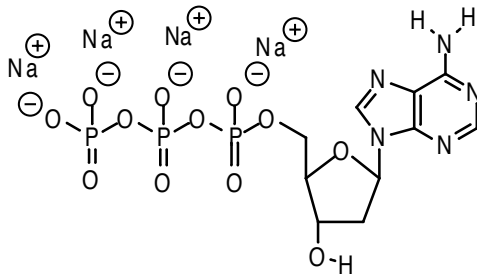
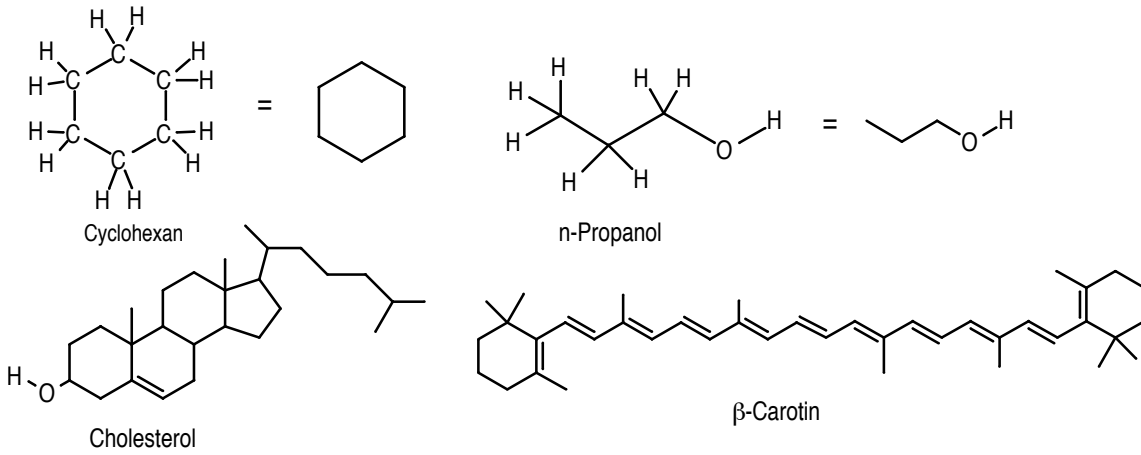
Um auch komplexe Strukturformeln einigermaßen speditiv zeichnen zu können, hat sich in der organischen Chemie eine abgekürzte Schreibweise eingebürgert:

Die Elementsymbole für C-Atome werden nicht mehr geschrieben, jede Ecke und jedes Ende des Bindungszugs symbolisiert ein C-Atom.

Die Wasserstoffatome an C werden nicht gezeichnet, sondern alle freien Valenzen eines Kohlenstoffatoms werden gedanklich mit Wasserstoff abgesättigt.

Heteroatome (= alle Atome ausser Wasserstoff und Kohlenstoff) werden als Atomsymbol gezeichnet, Wasserstoffatome an Heteroatomen ebenfalls.

Beispiele:



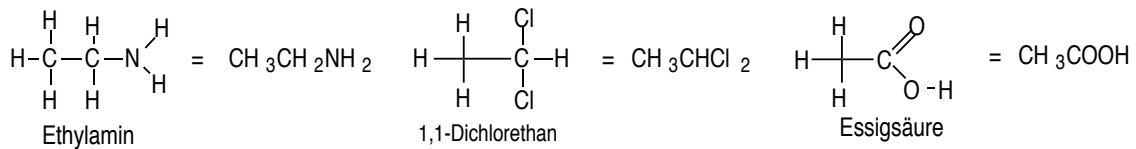
Adenosintriphosphat tetranatriumsalz (ATP)

Berechnen Sie als Übung die Molekularformeln dieser Verbindungen.

Überprüfen Sie das Ergebnis, indem Sie die Doppelbindungsparameter berechnen und mit der Strukturformel vergleichen

Eine weitere Schreibweise verwendet für einzelne Gruppen von Atomen Summenformeln. Die Bindungsstriche werden da, wo eindeutig, weggelassen. Diese Schreibart wird vor allem in Publikationen gerne für kleinere Moleküle angewandt, da sie auf einer Linie Platz haben und keine Graphiken gesetzt werden müssen.

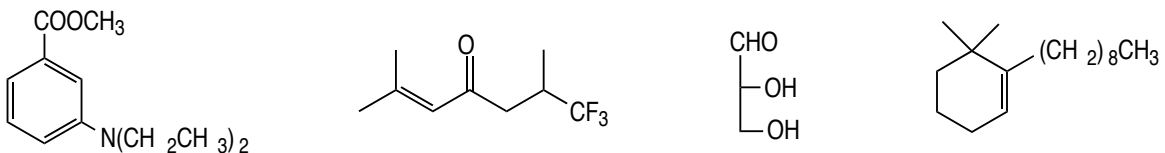
Beispiele:



Weitere Beispiele werden wir im Kapitel über funktionelle Gruppen antreffen.

In der Praxis werden die beiden abgekürzten Schreibweisen häufig gemischt verwendet:

Beispiele:



2.3 Kovalente Bindungen

2.3.1 Oktettregel und Lewis-Strukturformeln

Kovalente Bindungen:

Für eine detaillierte Diskussion der Begriffelisationspotential, Elektronenaffinität und die Erklärung der Gründe für die Ausbildung ionischer, kovalenter und metallischer Bindungen wird auf die Vorlesung Allgemeine Chemie verwiesen.

Der für die organische Chemie wichtigste Teil des Periodensystems (im Kopf haben!):

Valenzelektronen	1	2	3	4	5	6	7	8
1. Periode	H							He
2. Periode	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
3. Periode	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
4. Periode							Br	
5. Periode							I	

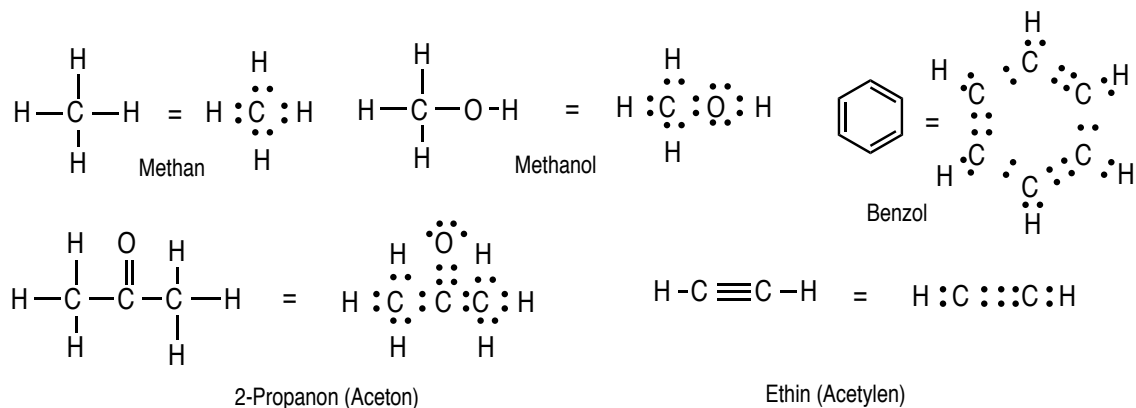
Fett gedruckte Elemente haben die Tendenz mit **Kohlenstoff kovalente Bindungen** einzugehen. In metallorganischen Verbindungen (Bindungen zwischen Kohlenstoff und Metallen) sind Übergänge zwischen ionischen und kovalenten Bindungen zu beobachten.

Oktettregel:

Atome haben die Tendenz, die Elektronenkonfiguration des nächstliegenden Edelgases zu erreichen. Kovalent gebundene Atome erreichen dies, indem sie Valenzelektronen mit dem Bindungspartner teilen. In Lewis-Strukturen werden die einzelnen Valenzelektronen als Punkte dargestellt.

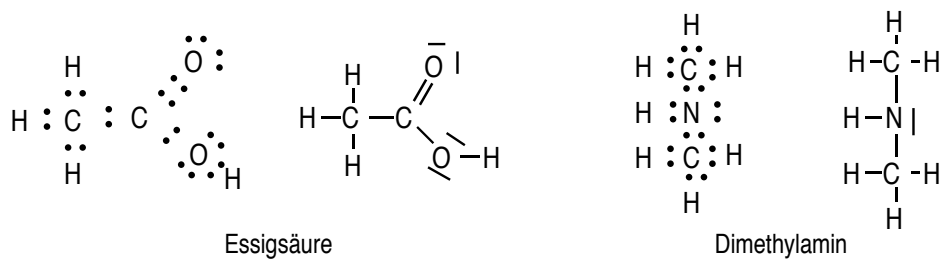
dargestell

	Valenzelektronen	Angestrebte Zahl (volle Schale)	notwendige Bindungen (= Wertigkeit)	nicht bindende Elektronen
$\text{H}\cdot$	1	2	1	0
$\cdot\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{C}}}\cdot$	4	8	4	0
$\cdot\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{N}}}\cdot$	5	8	3	2
$\cdot\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}\cdot$	6	8	2	4
$\cdot\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{F}}}\cdot, \text{Cl, Br, I}$	7	8	1	6



2.3.2 Bindungselektronen und nichtbindende (einsame) Elektronenpaare

Geteilte Bindungselektronenpaare werden zwischen den Atomsymbolen, nicht bindende Elektronenpaare am betreffenden Atom lokalisiert gezeichnet. Abkürzend werden die Bindungselektronenpaare als Bindungsstrich, die nichtbindenden (einsamen, Englisch: lone pairs) Elektronenpaare als Strich am Atom gezeichnet. Der ursprünglich nur als Verknüpfungssymbol gedachte Bindungsstrich erhält im Rahmen der Lewis-Theorie also eine neue Bedeutung als Abkürzung für ein Bindungselektronenpaar. Beispiele:



2.3.3 Sextett-Moleküle

Besonders Atome aus der dritten Hauptgruppe des Periodensystems können in Molekülen unter Verletzung der Oktettregel von nur 6 Valenzelektronen (**Sextett** statt Oktett) umgeben sein. Diese Moleküle sind aber relativ instabil und haben das Bestreben, durch Anlagerung weiterer Elektronen zum Oktett zu gelangen.

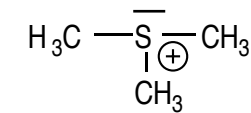


2.3.4 Formale Ladungen

Regel für die Bestimmung der formalen Ladung eines Atoms in einer Lewis-Struktur:

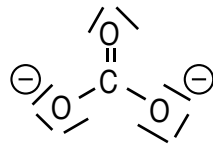
$$\begin{aligned} \text{Formalladung} = & \quad \text{Anzahl Valenzelektronen des neutralen Atoms} \\ & - \text{Anzahl Elektronen in einsamen Elektronenpaaren} \\ & - \text{Hälfte der Elektronen in Bindungselektronenpaaren.} \end{aligned}$$

Beispiele:



Trimethylsulfonium Ion

$$\begin{aligned} \text{Schwefelatom:} & \quad 6 \text{ Valenzelektronen} \\ & - 2 \text{ nichtbindende Elektronen} \\ & - 6/2 \text{ Bindungselektronen} \\ \hline & +1 = \text{Formale Ladung} \end{aligned}$$



Carbonat Ion

$$\begin{aligned} \text{Sauerstoff (einfach gebunden):} \\ 6 \text{ VE} - 6 \text{ nb} - 2/2 \text{ be} = -1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Sauerstoff (doppelt gebunden):} \\ 6 \text{ VE} - 4 \text{ nb} - 4/2 \text{ be} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Kohlenstoff:} \\ 4 \text{ VE} - 8/2 \text{ be} = 0 \end{aligned}$$

Achtung: Formale Ladungen sind das Resultat der Elektronenbuchhaltung im Lewis-Formalismus und umfassen immer ganze Ladungen. Sie dürfen nicht mit der Ladungsdichteverteilung in einem Molekül (sog. Partialladungen) verwechselt werden!

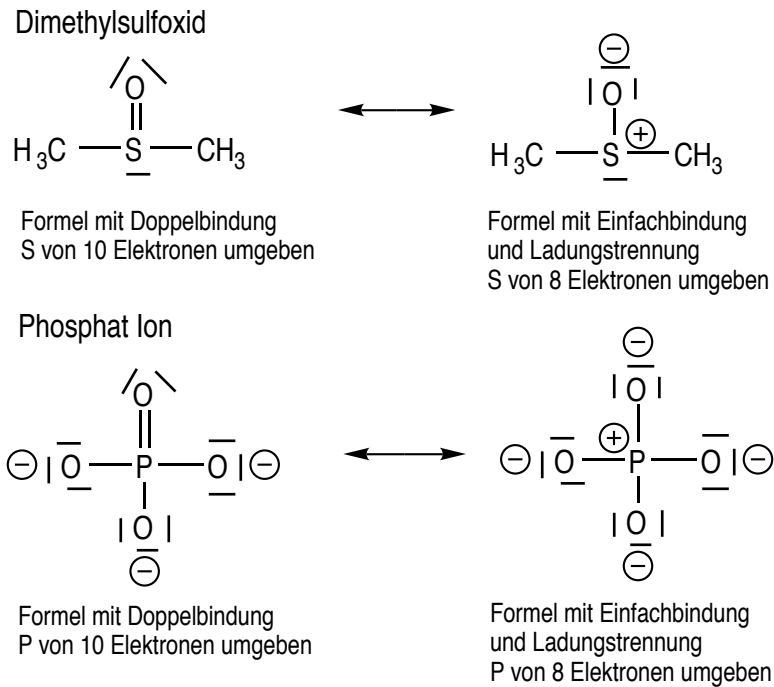
2.3.5 Oktett-Erweiterung

Bei den Elementen Schwefel und Phosphor werden häufig Lewisformeln geschrieben, in denen das Zentralatom von mehr als 8 Elektronen umgeben ist.



10 Valenzelektronen

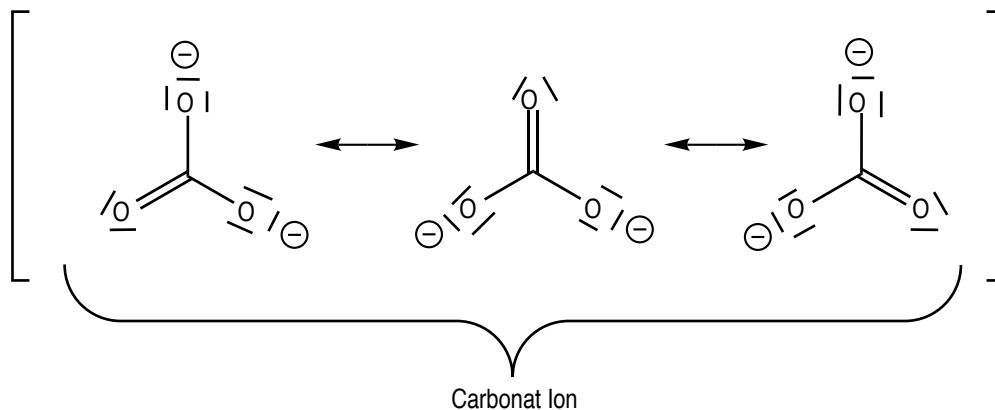
Oft lassen sich aber auch ladungstrennte Formen schreiben, in denen die Oktettregel eingehalten wird:



2.3.6 Grenzstrukturen

Die oben für Dimethylsulfoxid und Phosphat gezeichneten Strukturen sind **Grenzstrukturen**. Sie werden dann gezeichnet, wenn eine einzige Lewisstruktur die tatsächliche Elektronen- und Ladungsverteilung und/oder die Symmetrieeigenschaften eines Moleküls nur unvollständig wiedergeben kann. Grenzstrukturen sind Symbole aus der Resonanztheorie (siehe ausführliche Diskussion in Kapitel 4), die versucht, die Delokalisierung von Elektronen mit Valenzbindungs-Strukturen (Lewis-Strukturen) zu beschreiben.

Hier nur ein weiteres Beispiel:



Im Carbonat Ion sind alle Sauerstoffatome gleichwertig, die drei **Grenzstrukturen** zusammen beschreiben ein einziges Molekül. Das Molekül selbst entspricht einem **Hybrid** (Mischform) dieser drei Grenzstrukturen. Grenzstrukturen werden mit Doppelkopfpfeilen zueinander in Beziehung gesetzt.

2.4 Molekülgeometrie

2.4.1 Bindungslängen

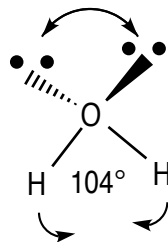
In organischen Molekülen sind die Bindungslängen für ein gegebenes Paar von Bindungspartnern innerhalb enger Grenzen erstaunlich konstant. Doppelbindungen sind stets kürzer als Einfachbindungen und Dreifachbindungen kürzer als Doppelbindungen. Die Bindungslänge steht in direktem Zusammenhang mit der Bindungsstärke (d.h. Bindungsenergie): Bei gleichen Bindungspartnern sind kürzere Bindungen stärker als längere Bindungen. Tabelle 1 im Anhang gibt eine Übersicht über die wichtigsten typischen Bindungslängen.

2.4.2 Gerichtete Bindungen: Gegenseitige Abstossung von Valenzelektronen (VSEPR)

Die räumliche Anordnung der Bindungen wird dominiert durch die gegenseitige Abstossung der Elektronenpaare. Nach der VSEPR-Theorie (**v**alence **s**hell **e**lectron **p**air **r**epulsion), ordnen sich die Liganden räumlich so an, dass die gegenseitige Abstossung der Valenzelektronen minimal ist. Für Kohlenstoff mit vier Einfachbindungen ist die günstigste Anordnung (schwächste Abstossung der Bindungselektronen) diejenige eines Tetraeders (Tetraederwinkel 109°). Für Zentren mit drei Einfachbindungen und einem Elektronensextett, ist die günstigste Ausrichtung diejenige mit drei Bindungen (120° Winkel) in einer Ebene. Da einsame Elektronenpaare (eep) im Mittel näher beim Kern zu finden sind als bindende Elektronenpaare (bep), werden sie stärker abgestossen. Doppelbindungen werden bezüglich Abstossung gleich behandelt wie ein einsames Elektronenpaar.

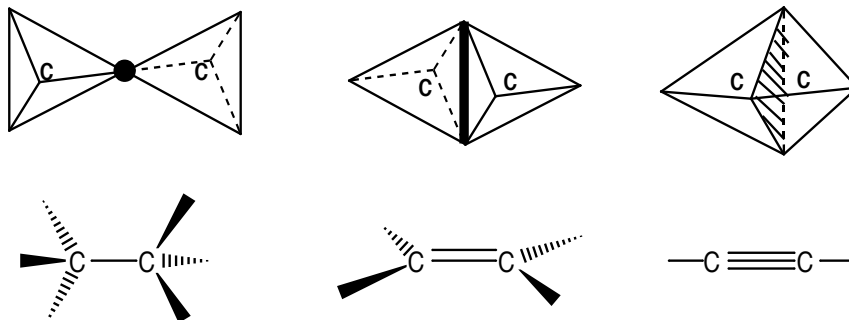
Die Abstossung nimmt ab in der Reihenfolge (eep \leftrightarrow eep) > (eep \leftrightarrow bep) > (bep \leftrightarrow bep).

In Wasser z.B., führt die Abstossung der beiden einsamen Elektronenpaare am Sauerstoff zu einer Kompression des Winkels zwischen den beiden Bindungen zu Wasserstoff:



2.4.3 Verknüpfte Tetraeder als Eselsbrücke für die Geometrie um Mehrfachbindungen

Die aus Mehrfachbindungen resultierende Geometrie kann man sich leicht merken, wenn man davon ausgeht, dass einfach gebundene Atome eine Ecke, durch Doppelbindung verbundene Atome eine Kante, und durch Dreifachbindung verbundene Atome eine Fläche eines Tetraeders gemeinsam haben.

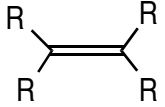
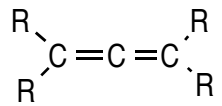

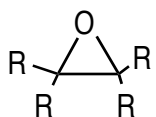


2.5 Funktionelle Gruppen

2.5.1 Zum Begriff der funktionellen Gruppe

Organische Verbindungen, die lediglich aus über Einfachbindungen verknüpften Kohlenstoff- und Wasserstoffatomen bestehen (Alkane), sind sehr reaktionsträge. Wenn das Molekül Heteroatome und/oder Mehrfachbindungen aufweist, sind diese in der Regel die reaktiven Stellen. Solche charakteristische Gruppen von Atomen weisen oft eine einheitliche Reaktivität auf, d.h. sie verleihen allen Verbindungen, in denen sie enthalten sind, ähnliche Reaktionsfähigkeit, unabhängig vom Rest des C-H Gerüsts (dieser Rest wird häufig mit R- bezeichnet). Deshalb werden die Substanzklassen in der organischen Chemie weitgehend durch die für sie typischen **funktionellen Gruppen** bestimmt. Begrifflich ist es wichtig, die Namen der Substanzklassen von denjenigen der funktionellen Gruppen zu trennen: Eine Verbindung ist ein **Alkohol**, sie reagiert an der **Hydroxygruppe**; ein **Amin** wird an der **Aminogruppe** protoniert.

2.5.2 Die wichtigsten Klassen organischer Verbindungen

Stoffklasse	Funktionelle Gruppe	Allgemeine Struktur	Bemerkungen
Alkane	keine	$R-H$	Cycloalkane: Mit Ringen
Alkene	C-C Doppelbindung		Cycloalkene: mit Ringen Cumulene: 
Aromatische Kohlenwasserstoffe	Benzolring		Heteroaromaten: Mit Heteroatomen im Ring
Alkine	CC-Dreifachbindung	$R-C\equiv C-R$	
Alkylhalogenide Fluor-, Chlor-, Brom-, Iodalkan	Halogenatom	$R-F$ $R-Br$ $R-Cl$ $R-I$	
Alkohole	Hydroxygruppe	$R-OH$	R-CH ₂ -OH primäre (R) ₂ CH-OH sekundäre (R) ₃ C-OH tertiäre
Ether	Ethergruppe	$R-O-R$	Oxirane, Epoxide: 

Peroxide	Peroxidgruppe	$R-O-O-R$	R-O-OH Hydroperoxide
Amine	Aminogruppe	$ \begin{array}{l} R-N \begin{array}{l} \nearrow H \\ \searrow H \end{array} \text{ primär} \\ R-N \begin{array}{l} \nearrow H \\ \searrow R \end{array} \text{ sekundär} \\ R-N \begin{array}{l} \nearrow R \\ \searrow R \end{array} \text{ tertiär} \end{array} $	
Hydrazine	Hydrazogruppe	$ \begin{array}{c} R \quad R \\ \diagdown \quad \diagup \\ N-N \\ \diagup \quad \diagdown \\ R \quad R \end{array} $	
Thiole	Thiol oder Mercaptogruppe	$R-SH$	
Sulfide, Thioether	Sulfidgruppe	$R-S-R$	
Disulfide	Disulfidgruppe	$R-S-S-R$	
Acetale und Ketale	Acetalgruppe Ketalgruppe	$ \begin{array}{cc} \text{Acetal} & \text{Ketal} \\ \begin{array}{c} R \\ \\ H-C-O-R \\ \\ H \end{array} & \begin{array}{c} R \\ \\ R-C-O-R \\ \\ R \end{array} \end{array} $	Hemiacetal: $ \begin{array}{c} R \\ \\ H-C-OH \\ \\ H \end{array} $
Aldehyde	Formylgruppe	$ \begin{array}{c} O \\ \\ R-C-H \end{array} $	
Ketone	Ketogruppe, Carbonylgruppe	$ \begin{array}{c} O \\ \\ R-C-R \end{array} $	
Imine	Iminogruppe	$ \begin{array}{c} N-R \\ \\ R-C-R \end{array} $	auch Schiff'sche Base genannt
Carbonsäuren	Carboxylgruppe	$ \begin{array}{c} O \\ \\ R-C-OH \end{array} $	Carboxylat: $ \begin{array}{c} O \\ \\ R-C-O^{\ominus} \end{array} $

Carbonsäureester	Alkoxy-carbonylgruppe		Lactone:
Amide	Carboxamidgruppe		R=Alkyl oder H Lactame:
Säurechloride			entsprechend Säurebromid, ---iodid
Thioester			
Nitrile	Nitril-, Cyangruppe	$R-C \equiv N$	
Carbonsäureanhydride			
Phosphorsäureester, Phosphate	Phosphatgruppe		
Nitroverbindungen	Nitrogruppe		
Sulfoniumsalze			
Ammoniumsalze			R= Alkyl oder H

Sulfoxide		$\begin{array}{c} \text{O}^- \\ \\ \text{R}-\text{S}^+-\text{R} \end{array}$	
Sulfonsäuren	Sulfogruppe	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{R}-\text{S}-\text{OH} \\ \\ \text{O} \end{array}$	Sulfonsäureester: $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{R}-\text{S}-\text{O}-\text{R} \\ \\ \text{O} \end{array}$

Literatur: Yourkanis Kapitel 1.1 - 1.15. Problems: 1-8, 12, 13-16.

Wichtige Begriffe und Definitionen Kapitel 2:

Ordnungszahl	Anzahl der Protonen im Kern eines Elements	atomic number
Massenzahl	Masse eines Isotops in Einheiten von $^{12}\text{C}/12$ (amu) ca. = Anzahl Protonen + Neutronen	mass number
Atomgewicht	Statistisch aus der natürlichen Häufigkeit der einzelnen Isotope berechnete mittlere Atommasse (in $^{12}\text{C}/12$)	atomic weight
Isotop	Atome desselben Elements mit unterschiedlicher Zahl Protonen	isotope
Verhältnisformel	Gibt an in welchem Verhältnis die einzelnen Elemente in einer Verbindung vorkommen	
Molekularformel (früher Summenformel)	Gibt an wieviele Atome der einzelnen Elemente in der Verbindung vorkommen	molecular formula
Formelgewicht (Molekulargewicht)	Statistisch nach der natürlichen Häufigkeit der Isotope berechnete Masse des Moleküls in $^{12}\text{C}/12$ -Einheiten (amu)	molecular weight
Konstitution	Beinhaltet die Molekülformel und die Verbundenheit der einzelnen Atome im Molekül (wird durch Strukturformel angegeben)	constitution
Konstitutionsisomere	Moleküle mit gleicher Molekülformel aber unterschiedlicher Verbundenheit.	constitutional isomers
Wertigkeit	Anzahl kovalente Bindungen, die ein Atom eingehen kann.	valency

Doppelbindungsparameter	Anzahl Doppelbindungen + 2x Anzahl Dreifachbindungen + Anzahl Ringe	
kovalente Bindung	Bindung durch gemeinsame (geteilte) Elektronen	covalent bond
Oktettregel	Bindungssituationen, in denen jedes Atom von 2 (1. Reihe), 8 (2. Reihe), 18 (3. Reihe) Valenzelektronen umgeben ist sind besonders stabil.	octett rule
nichtbindende oder einsame Elektronen (Elektronenpaare)	Zu einem bestimmten Atom gezählte, nicht an einer Bindung beteiligte (geteilte) Elektronen	non bonding electrons lone pairs
Formale Ladung	in ganzen Elektronenladungen. Formale Ladung = Anzahl Valenzelektronen des neutralen Atoms – Anzahl einsame Elektronen – 1/2 der geteilten Elektronen (Bindungselektronen)	formal charge
Lewisstruktur	Strukturformel in der alle Valenzelektronen als Punkte oder paarweise als Striche eingezeichnet sind	Lewis formula
VSEPR	Valence shell electron pair repulsion Modell zur Vorhersage der Bindungsgeometrie an einem Zentrum über die Abstossung der Valenzelektronen	
Elektronegativität	empirisch festgelegte Skala der Tendenz der Atome , Bindungselektronen anzuziehen.	electronegativity
Dipolmoment einer Bindung eines Moleküls	Produkt von Distanz und Partialladung. Dargestellt als Pfeil mit Spitze bei der negativen Partialladung. Einheit 1 Debye Moleküle: Vektorsumme der Bindungsdipolmomente	dipole moment
Funktionelle Gruppe	Atomgruppe (mit Heteratomen und / oder Mehrfachbindungen), die dem Molekül eine bestimmte Reaktionstendenz verleihen. Bestimmend für die Stoffklasse	functional groups
Stoffklassen	Nach funktionellen Gruppe geordnete Klassen von organischen Verbindungen mit ähnlicher Reaktivität.	classes of compounds