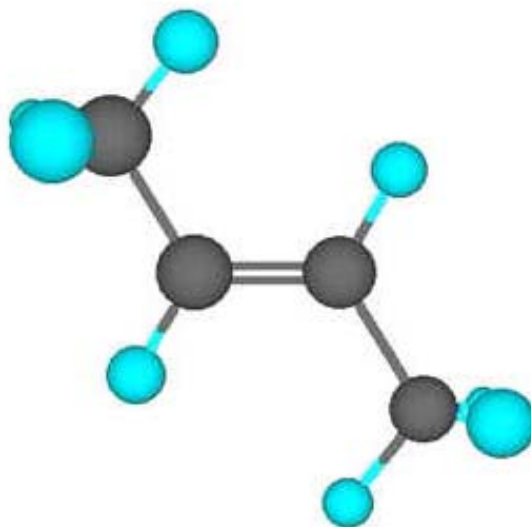


ORGANISCHE CHEMIE



Struktur organischer Verbindungen:

Formeln, Nomenklatur und Reaktionsmechanismen

Chemische Formeln

Summenformeln

Strukturformeln (Konstitutionsformeln)

- Ausführliche Strukturformeln
- Vereinfachte Strukturformeln
- Strichformeln

Chemische Formeln

Summenformeln

- geben die chemische Zusammensetzung einer Verbindung an
- Art und Verhältnis der chemischen Elemente
- Molmasse der Verbindung (g/mol)

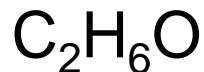


2 x Natrium

1 x Kohlenstoff

3 x Sauerstoff

$$M = 2 \times 22.99 + 1 \times 12.01 + 3 \times 15.99 = 105.96 \text{ g/mol}$$



2 x Kohlenstoff

6 x Wasserstoff

1 x Sauerstoff

$$M = 2 \times 12.01 + 6 \times 1.01 + 1 \times 15.99 = 46.07 \text{ g/mol}$$

Summenformeln sagen nichts über die Struktur der Verbindung aus.

Chemische Formeln

Strukturformeln (Konstitutionsformeln)

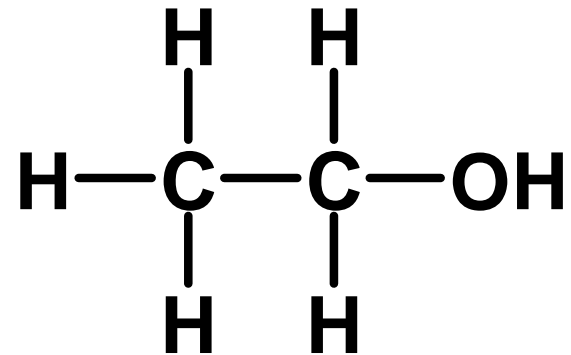
geben die chemische Zusammensetzung und die **genaue Struktur** einer Verbindung an.

- Art und Verhältnis der chemischen Elemente
- Molmasse der Verbindung (g/mol)
- **genaue Verknüpfung der Atome untereinander**
(Art und Zahl der Bindungen)

Ausführliche Konstitutionsformeln:

Beispiel: C_2H_5OH

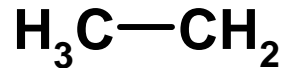
- Kohlenstoffkette zeichnen (90° Winkel)
(gerade oder verzweigt)
- Substituenten (funktionelle Gruppen) hinzufügen
- freie Valenzen mit Wasserstoff auffüllen



Vereinfachte Konstitutionsformeln

Beispiel: C_2H_5OH

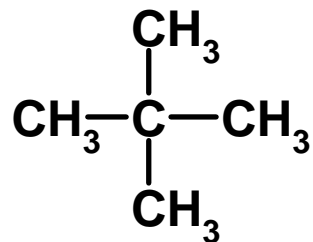
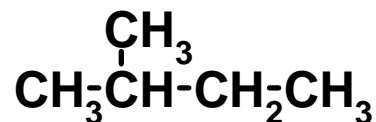
- Kohlenstoffe und Wasserstoffe werden zusammengefasst
- Substituenten (funktionelle Gruppen) hinzufügen
- C-C-Einfachbindungen können (müssen nicht) geschrieben werden



Vereinfachte Konstitutionsformeln

Beispiel: C_5H_{12}

- Kohlenstoffe und Wasserstoffe werden zusammengefasst
- Substituenten (funktionelle Gruppen) hinzufügen
- C-C-Einfachbindungen können (müssen nicht) geschrieben werden

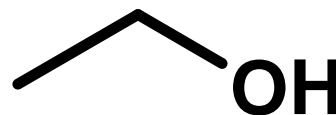
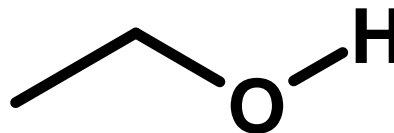
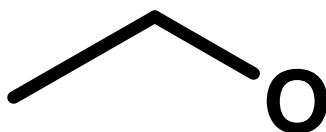


keine weiteren
Substituenten

Strichformeln

Beispiel: C₂H₅OH

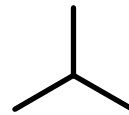
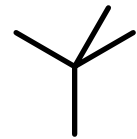
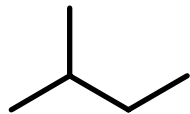
- Kohlenstoffkette mit allen Bindungen zeichnen (meist 120°)
- C-Atome werden meist nicht explizit geschrieben
- Wasserstoffatome an Kohlenstoffen werden nicht geschrieben
- Substituenten (funktionelle Gruppen) hinzufügen
- Wasserstoffe an Substituenten werden geschrieben (oft direkt ohne Einfachbindung)



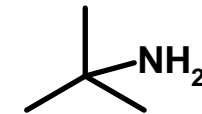
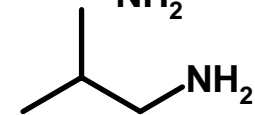
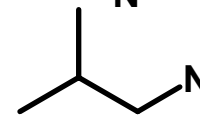
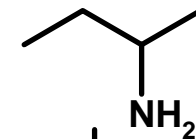
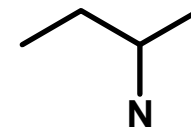
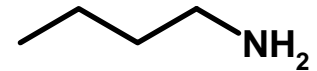
Strichformeln werden besonders in der organischen Synthesechemie angewendet.

Strichformeln

Beispiel: C_5H_{12}



Beispiel: $C_4H_9NH_2$



- Kohlenstoffkette mit allen Bindungen zeichnen (meist 120°)
- C-Atome werden meist nicht explizit geschrieben
- Wasserstoffatome an Kohlenstoffen werden nicht geschrieben
- Substituenten (funktionelle Gruppen) hinzufügen
- Wasserstoffe an Substituenten werden geschrieben

Nomenklatur organischer Verbindungen

Regeln zur Identifikation von organischen Verbindungen

Diese Regeln müssen **eindeutig** sein und das eindeutige **Erstellen von Formeln aus Namen und umgekehrt** erlauben. Zu jeder Formel muß es einen eindeutigen und korrekten Namen geben und umgekehrt.

Herausgabe der Nomenklaturregeln und Kontrolle der Richtigkeit:
IUPAC (International **U**nion of **P**ure and **A**ppplied **C**hemistry)

Nomenklatur (Namensgebung)

```
graph TD; A[Nomenklatur (Namensgebung)] --> B[Systematische Nomenklatur]; A --> C[Trivialnamen];
```

Systematische Nomenklatur

- Eindeutige Regeln
- "IUPAC-Namen"

Ethanol
Chlorbenzol
Propansäure

Trivialnamen

- historische Bezeichnungen
- Vereinfachungen

Weingeist
Buttersäure
Amylalkohol

Was muß ein IUPAC-Verbindungsname aussagen?

- Anzahl der Kohlenstoffatome in der längsten Kette
- Länge und Anzahl von Verzweigungen
- Art und Position von funktionellen Gruppen (Substituenten)

Funktionelle Gruppen sind Substituenten oder Atomgruppen, die das chemische Verhalten einer Stoffklasse bestimmen, z.B. -Cl, -Br, -I (Halogensubstituenten), -OH (Hydroxygruppen), -NO₂ (Nitrogruppen), -CHO (Aldehydgruppen).

Nomenklaturregeln: Beispiel Alkane

1) **längste Kohlenstoffkette**

Endung -an

2) **Seitenketten** mit Endung -yl

3) **Position der Seitenketten** mit Zahlen vor dem Stammnamen kennzeichnen (möglichst kleine)

4) **Anzahl der gleichen**

Seitenketten mit griechischen Zahlwörtern angeben

Seitenketten	Vorsilbe
1	keine
2	di-
3	tri-
4	tetra-

C-Anzahl

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

R

Name

Meth-

Eth-

Prop-

But-

Pent-

Hex-

Hept-

Oct-

Non-

Dec-

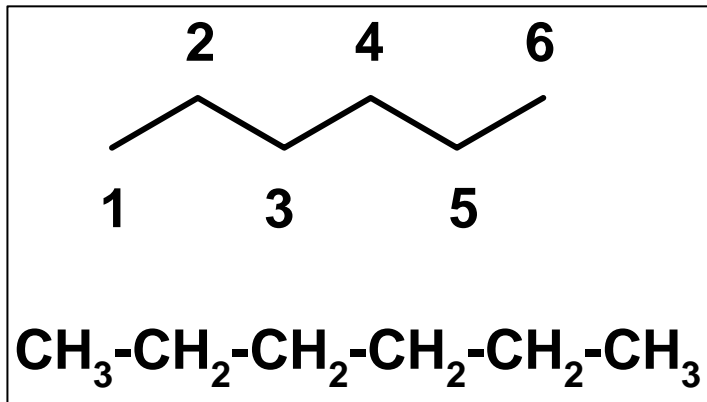
Undec-

Dodec-

Alk-

Name: "Positionszahlen - Anzahl - Seitenketten (yl) - Hauptkette (an)"

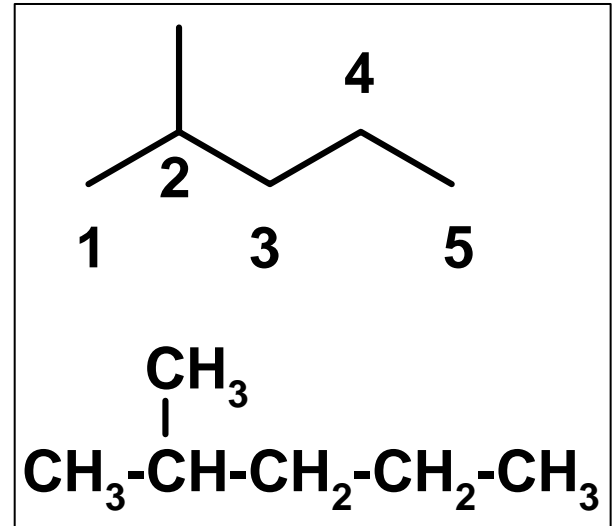
Beispiel: 4,4-Di-ethyl-5-methylnonan



6 Kohlenstoffe,
keine Seitenketten

Hex-an

Hexan



Längste Seitenkette:
5 Kohlenstoffe: Pent-an

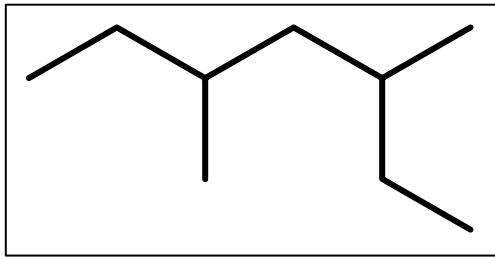
1 Seitenkette mit 1 C: Meth-yl

Seitenkette am zweiten C:
2-methyl (nicht 4-methyl)

2-Methylpentan

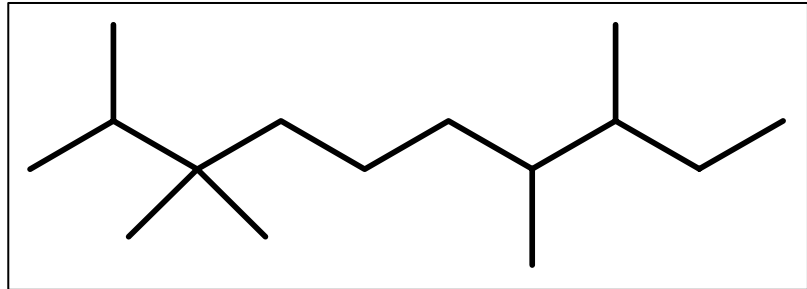
Kohlenstoffgruppen werden allgemein als **Alkylgruppen** bezeichnet.

Nomenklaturregeln: Beispiel Alkane



- Längste Seitenkette: heptan (nicht hexan)
- zwei gleiche Seitenketten an Position 3 und 5: 3,5-dimethyl

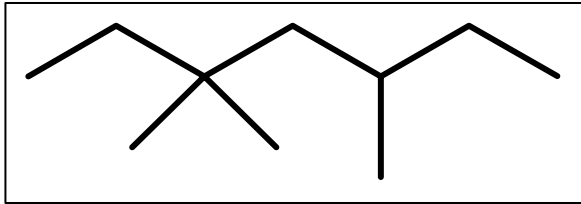
3,5-Dimethylheptan



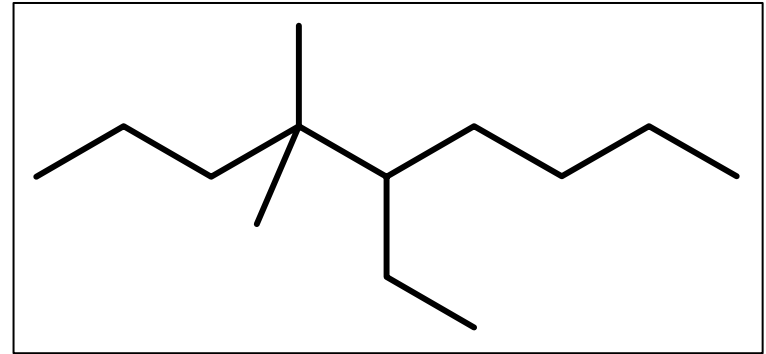
- Längste Seitenkette: decan
- fünf gleiche Seitenketten an Positionen 2,3,3,7 und 8: 2,3,3,7,8-pentamethyl (nicht 3,4,8,8,9-pentamethyl)

2,3,3,7,8-Pentamethyldecan

Nomenklaturregeln: Beispiel Alkane



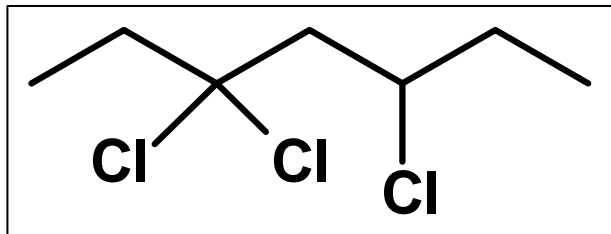
3,3,5-Trimethylheptan



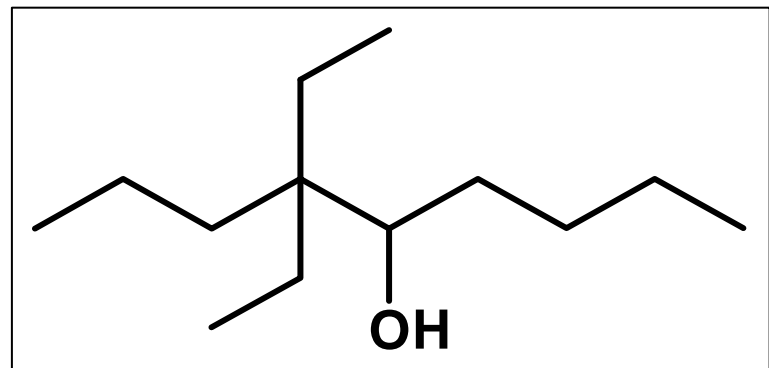
5-Ethyl-4,4-dimethylnonan

Viele Substituenten werden in der Nomenklatur wie Seitenketten gehandhabt.

Substituenten mit ihren Positionsangaben werden **alphabetisch** geordnet (griechische Vorsilben zählen nicht).



3,3,5-Trichloroheptan



4,4-Diethyl-5-hydroxynonan

Isomere - ident, oder doch nicht ident ?

Konstitutionsisomere (Strukturisomere)

gleiche Summenformel, **völlig unterschiedliche Struktur**.

Konfigurationsisomere (Stellungsisomere)

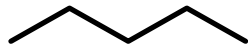
gleiches Kohlenstoffgerüst, **Substituenten unterschiedlich angeordnet**, verschiedene Verbindungen

Konformationsisomere

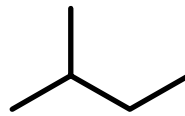
gleiche Verbindungen, Rotation um drehbare Bindungen

Konstitutionsisomere (Strukturisomere)

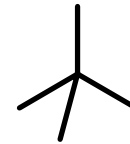
Konstitutionsisomere haben die **gleiche Summenformel**, aber **völlig unterschiedliche Struktur**. Zum Überführen der Isomere ineinander müssten viele Bindungen gebrochen werden.



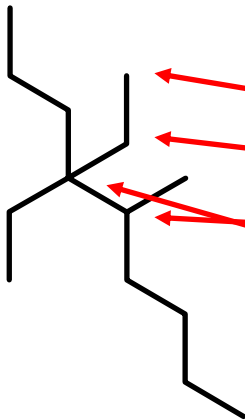
C_5H_{12}
Pentan



C_5H_{12}
2-Methylbutan



C_5H_{12}
2,2-Dimethylpropan



Primäres C-Atom:

an 1 C gebunden (3 H)

Sekundäres C-Atom:

an 2 C gebunden (2 H)

Tertiäres C-Atom:

an 3 C gebunden (1 H)

Quartäres C-Atom:

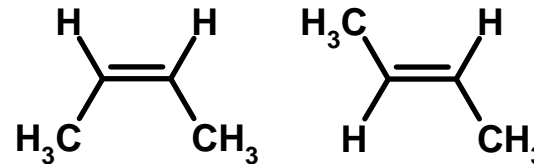
an 4 C gebunden (0 H)

Beispiel: 4,4-Diethyl-5-methylnonan

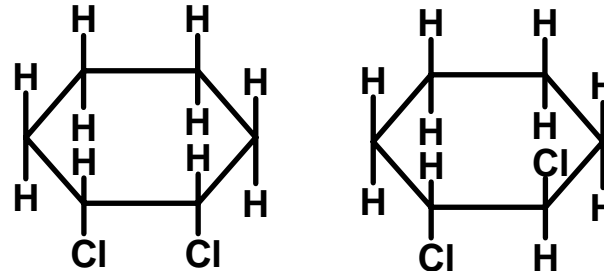
Konfigurationsisomere (Stellungsisomere)

Konfigurationsisomere besitzen ein **gleiches Kohlenstoffgrundgerüst**, sind ähnliche Verbindungen, jedoch sind **Substituenten unterschiedlich angeordnet**. Zum Überführen der Isomere ineinander müssten zwei Bindungen gebrochen werden (z.B. "Drehen" von Doppelbindungen, "Spiegeln" der Verbindung).

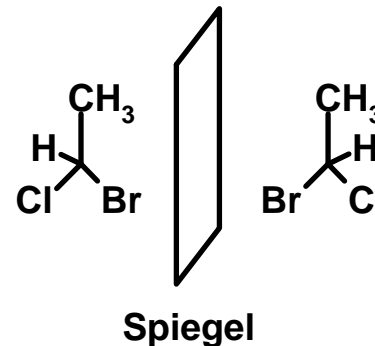
- **cis/trans-Isomere**
an Doppelbindungen



- **cis/trans-Isomere**
an cyclischen Verbindungen



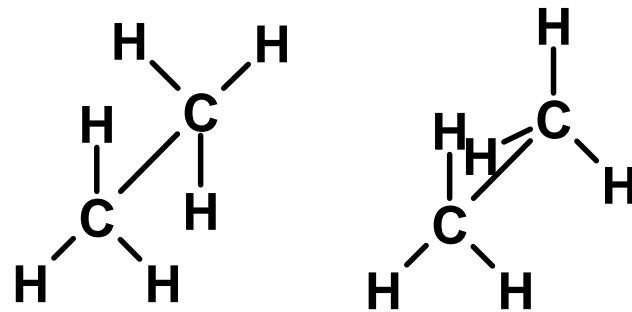
- **optische Isomere (Enantiomere,**
spiegelbildliche Verbindungen)



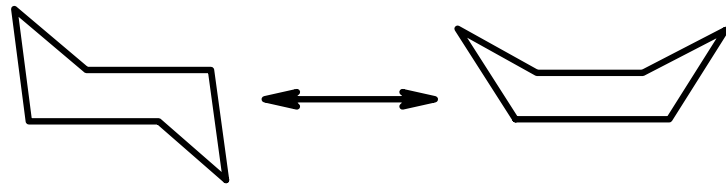
Konformationsisomere (Rotationsisomere)

Konformationsisomere stammen von **einer Verbindung**. Überführen der Isomere ineinander erfolgt durch Drehen oder Umklappen von Einfachbindungen, also ohne chemische Reaktion.

- Rotation um Einfachbindungen



- Sessel-Boot-Konformation in Sechsring-Verbindungen



Isomere - ident, oder doch nicht ident ?

Konstitutionsisomere (Strukturisomere)

gleiche Summenformel, **völlig unterschiedliche Struktur**.

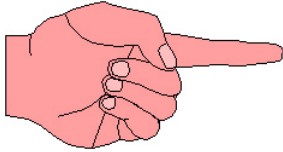
Konfigurationsisomere (Stellungsisomere)

gleiches Kohlenstoffgerüst, **Substituenten unterschiedlich angeordnet**, verschiedene Verbindungen

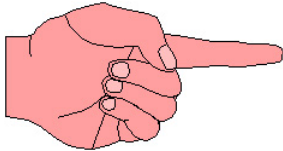
Konformationsisomere

gleiche Verbindungen, Rotation um drehbare Bindungen

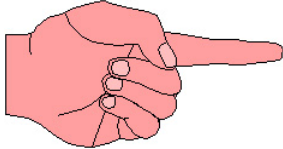
Reaktionsmechanismen und Reaktionstypen



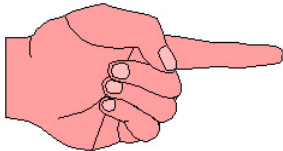
- Wie erfolgt ein Bindungsbruch?
Homolyse / Heterolyse



- Welchen Einfluß haben funktionelle Gruppen?
Induktiver Effekt (+I und -I)



- Wie sind die reagierenden Teilchen geladen?
Nucleophile / Elektrophile



- Wie lassen sich Reaktionen allgemein einteilen?
Sechs Gruppen: Substitution,
Umlagerung,
Addition / Eliminierung,
Oxidation / Reduktion

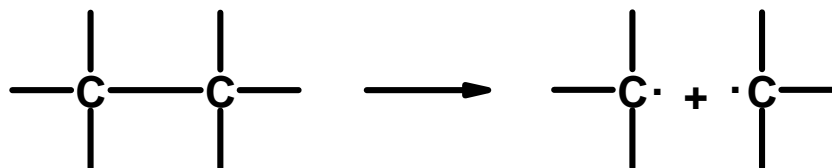
Reaktionsmechanismen und Reaktionstypen

Anorganische Chemie: meist Ionenreaktionen

Organische Chemie: **Bildung und Trennung kovalenter Bindungen**

Bindungsbruch erfolgt prinzipiell auf zwei Wegen:

1. Homolyse
(radikalische Spaltung)



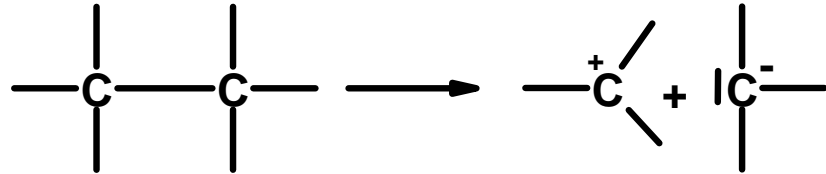
Jedes Atom behält ein **ungepaartes Elektron**. Es entstehen zwei **Radikale**.

Radikale sind extrem reaktionsfähig. Homolytische Reaktionen laufen oft in der Gasphase ab, sie werden durch **unpolare Lösungsmittel** begünstigt.

Reaktionsmechanismen und Reaktionstypen

Bindungsbruch erfolgt prinzipiell auf zwei Wegen:

2. Heterolyse
(nicht-radikalische Spaltung)



Ein Atom übernimmt das **Bindungselektronenpaar**. Es entstehen ein **Anion (negativ geladen)** und ein **Kation (positiv geladen)**. Heterolytische Reaktionen werden durch **polare Lösungsmittel** begünstigt.

Bei C-C-Bindungsspaltung entstehen ein **negativ geladenes Kohlenstoffanion** (Carbanion, sp^3 -hybridisiert) und ein **positiv geladenes Kohlenstoffkation** (Carbeniumion, sp^2 -hybridisiert).

Reaktionsmechanismen und Reaktionstypen

Induktiver Effekt (I-Effekt)

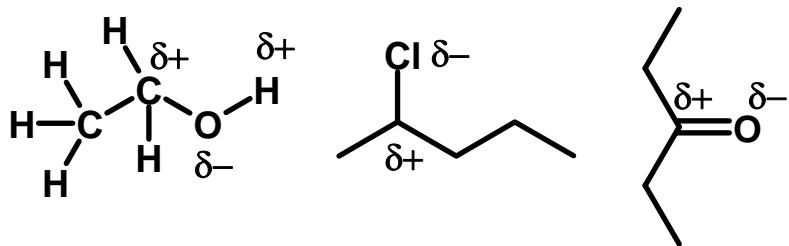
Der induktive Effekt beruht auf der **unterschiedlichen Elektronegativität der Atome** im Molekül. Der I-Effekt bewirkt das **Entstehen polarer Bindungen**. Man spricht von **positiven und negativen Partialladungen** oder Polarisierung.

Reaktionsmechanismen und Reaktionstypen

Induktiver Effekt (I-Effekt)

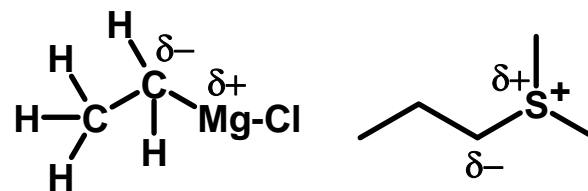
-I -Effekt

- elektronegative Gruppen erhalten negative Teilladungen
- $F > NO_2 > Cl > Br > OH > NH_2$
- C an Gruppen, die einen -I -Effekt haben, greift negative Ladungen an



+I -Effekt

- elektropositive Gruppen erhalten positive Teilladungen
- z.B.: Metalle, Kationen, Alkylreste
- C an Gruppen, die einen +I -Effekt erzeugen, greift positive Ladungen an

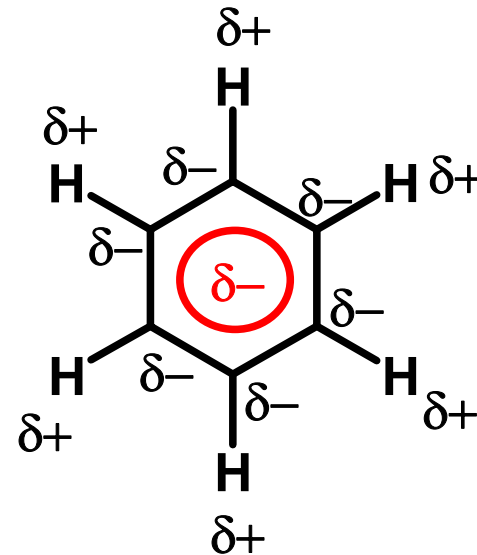
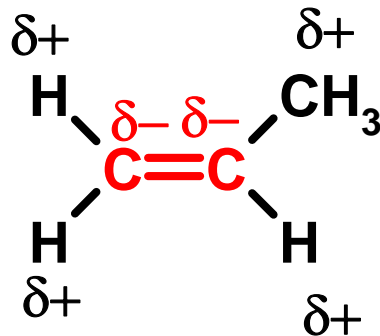


Induktiver Effekt (I-Effekt)

Das elektronegative Atom ist negativiert (negative Partiaalladung), das elektropositive Atom positiviert (positive Partiaalladung).

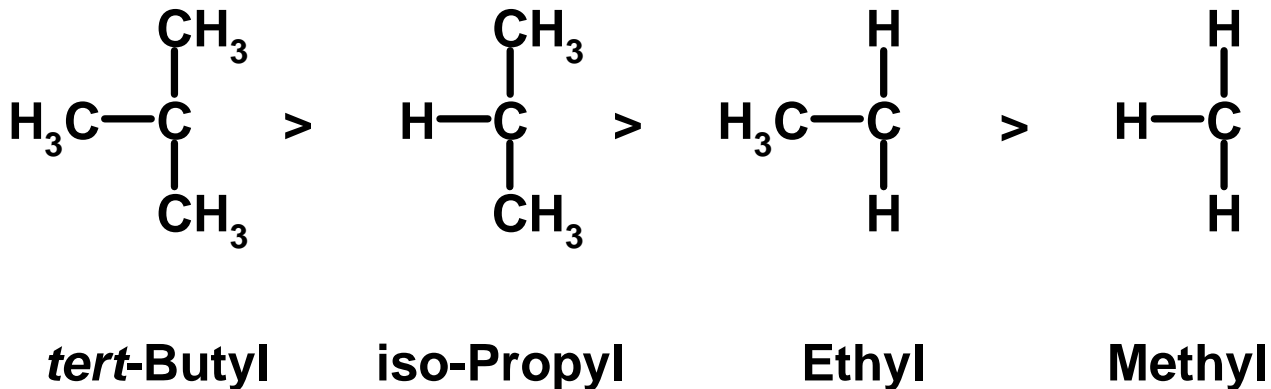
Das C in C=O ist stärker positiviert als das C in C-O.

“Gehäufte” Elektronen (Doppelbindungen, Aromaten) bewirken negative Partiaalladungen an ihren Nachbarkohlenstoffen, diese werden elektrophil angegriffen.



Induktiver Effekt (I-Effekt)

Alkylketten negativieren den Nachbarkohlenstoff. Sie haben einen **+I -Effekt**, der mit steigendem Verzweigungsgrad zunimmt.



Reaktionsmechanismen und Reaktionstypen

Reagenzien lassen sich nach ihrer Fähigkeit zur **Elektronenabgabe** oder **Elektronenaufnahme** einteilen.

“Plus” will zu “minus”, “minus” will zu “plus”.

Elektrophile Teilchen

(elektronenliebend, Elektronenpaarakzeptor)

- tragen eine **positive Ladung** oder sind stark positiviert
- **greifen negativierte Zentren (mit hoher Elektronendichte) an**
- z.B.: H^+
 NO_2^+ , SO_3
Metallkationen
Salze: AlCl_3 , BF_3 , ZnCl_2
Carbeniumionen
Lewis-Säuren

Reaktionsmechanismen und Reaktionstypen

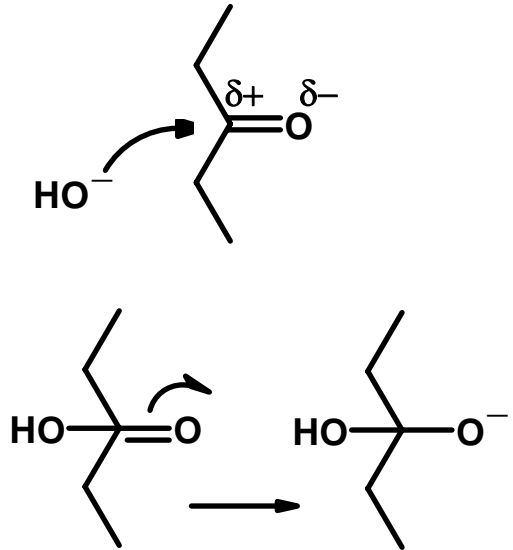
Reagenzien lassen sich nach ihrer Fähigkeit zur **Elektronenabgabe** oder **Elektronenaufnahme** einteilen.

“Plus” will zu “minus”, “minus” will zu “plus”.

Nucleophile Teilchen
(kernliebend, Elektronenpaardonor)

- haben **ein oder mehrere freie Elektronenpaare**
- **greifen positivierte Zentren an**
(gehen zu Elektrophilen)
- z.B.: Cl⁻, Br⁻, I⁻
HO⁻, HS⁻, H₂O, H₂S
R-OH (Alkohole)
R-SH (Thiole)
R-NH₂ (Amine), NH₃
Carbanionen
Lewis-Basen

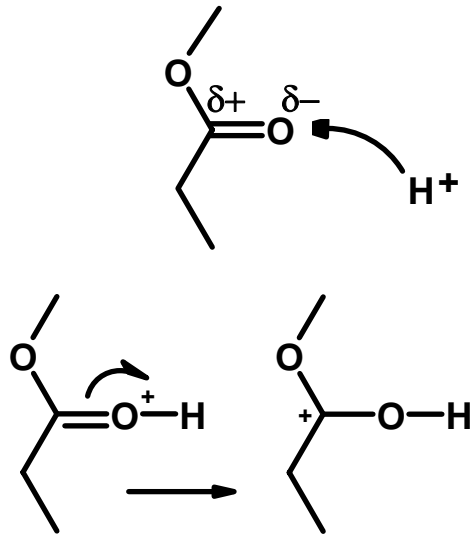
Nucleophile Teilchen (kernliebend, Elektronenpaardonor)



- haben ein oder mehrere freie Elektronenpaare
- greifen positivierete Zentren an

“Plus” will zu “minus”, “minus” will zu “plus”
(elektrostatische Anziehung).

Elektrophile Teilchen (elektronenliebend, Elektronenpaarakzeptor)

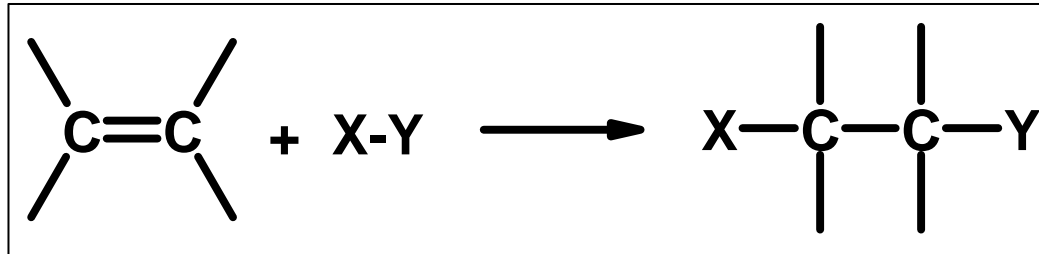


- tragen eine positive Ladung oder sind stark positiviert
- greifen negativierte Zentren an

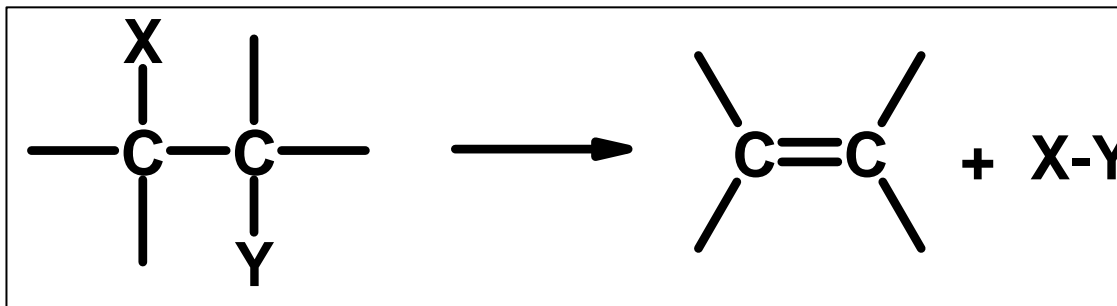
“Plus” will zu “minus”, “minus” will zu “plus”
(elektrostatische Anziehung).

Reaktionsmechanismen und Reaktionstypen

3. Addition (A): Anlagerung einer Gruppe XY an eine Doppelbindung (Mehrfachbindung) unter Ausbildung einer Einfachbindung



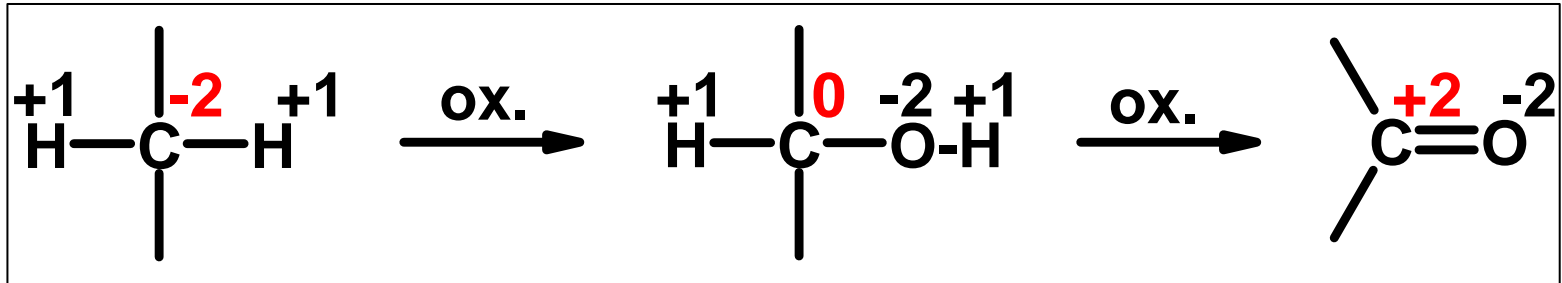
4. Eliminierung (E): Abspaltung von Gruppen unter Ausbildung von Doppelbindungen (Mehrfachbindungen), Umkehr der Addition



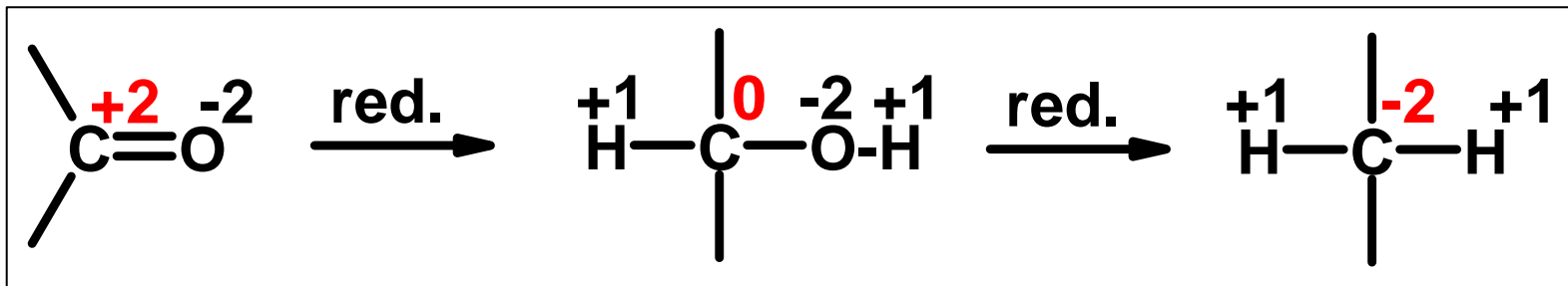
Die Reaktionstypen lassen sich durch die reagierenden Teilchen genauer beschreiben, z.B.: nucleophile Substitution (S_N), elektrophile Addition (A_E).

Reaktionsmechanismen und Reaktionstypen

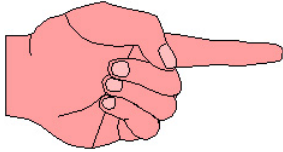
5. Oxidation (Ox): Aufnahme von Sauerstoff, Abgabe von Wasserstoff, Erhöhung der Oxidationszahl (= Elektronenabgabe)



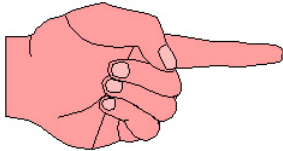
6. Reduktion (Red): Aufnahme von Wasserstoff, Abgabe von Sauerstoff, Erniedrigung der Oxidationszahl (= Elektronenaufnahme)



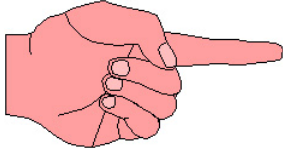
Reaktionsmechanismen und Reaktionstypen



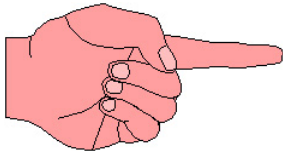
- Wie erfolgt ein Bindungsbruch?
Homolyse / Heterolyse



- Welchen Einfluß haben funktionelle Gruppen?
Induktiver Effekt (+I und -I)



- Wie sind die reagierenden Teilchen geladen?
Nucleophile / Elektrophile



- Wie lassen sich Reaktionen allgemein einteilen?
Sechs Gruppen: Substitution,
Umlagerung,
Addition / Eliminierung,
Oxidation / Reduktion