

Bachelorstudiengang Chemie
Modul Organische Chemie 1
Teil OC1a Grundlagen der Organischen Chemie

Grundlagen der Organischen Chemie

Prof. Dr. Thomas Ziegler

Institut für Organische Chemie
Universität Tübingen

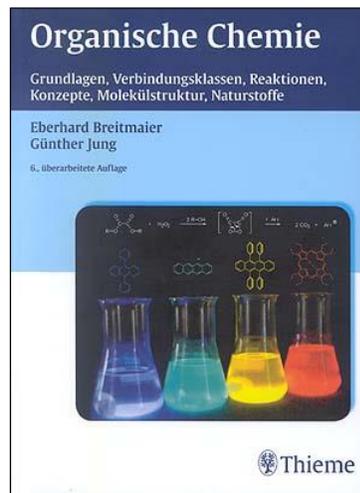
Erstmals gehalten im Sommersemester 2010

Kapitel 1	Besonderheiten der chemischen Bindung in organischen Molekülen
Kapitel 2	Alkane (Nomenklatur, Eigenschaften, Synthese, Reaktionen)
Kapitel 3	Alkene (Nomenklatur, Eigenschaften, Synthese, Reaktionen)
Kapitel 4	Alkine (Nomenklatur, Eigenschaften, Synthese, Reaktionen)
Kapitel 5	Benzol und andere aromatische Kohlenwasserstoffe (Eigenschaften, Reaktionen)
Kapitel 6	Chiralität
Kapitel 7	Halogenalkane (Nomenklatur, Eigenschaften, Synthese, Reaktionen)
Kapitel 8	Alkohole, Ether, Amine
Kapitel 9	Carbonylverbindungen (Carbonsäuren, Aldehyde)
Kapitel 10	Heterocyclen
Kapitel 11	Naturstoffe

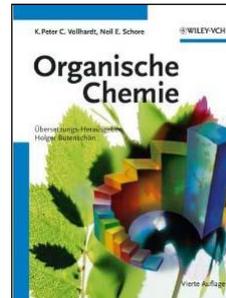
Weitere Informationen (Skript, Folien etc.): www.uni-tuebingen.de/ziegler/

Die Vorlesung beruht auf dem Lehrbuch „Organische Chemie“ (Breitmaier, Jung)

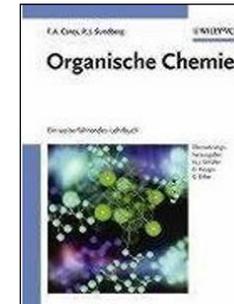
Organische Chemie: Grundlagen, Stoffklassen, Reaktionen, Konzepte, Molekülstruktur von Eberhard Breitmaier und Günther Jung von Thieme, Stuttgart (Broschiert - 27. Mai 2009);
Eur 49,95; ISBN-13: 978-3135415062



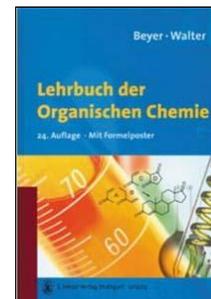
Weitere Lehrbücher



Organische Chemie
K. P. C. Vollhardt
Wiley-VCH; Eur 89,00



Organische Chemie
Ein weiterführendes Lehrbuch
Francis A. Carey
Wiley-VCH; Eur 99,00



Lehrbuch der Organischen Chemie
Hans Beyer, Wolfgang Walter
Hirzel, S; Eur 49,90



Organische Chemie
J- Clayden
Springer, Eur 89,99



**Marcellin Berthelot
(1827-1907)**

„La Chimie crée son objet.“

„Die Chemie schafft sich ihre
Forschungsobjekte selbst“

**„Cette faculté créatrice, semblable à celle de l'art lui-même,
la distingue essentiellement des sciences naturelles et historiques.“**

Diese kreative Fähigkeit, die der Kunst gleicht, unterscheidet sie
wesentlich von den Natur- und Geschichtswissenschaften.“



**Rede der Bundesministerin für Bildung und Forschung, Anja Karliczek,
zur Strategie Künstliche Intelligenz vor dem Deutschen Bundestag am 15. Februar 2019 in Berlin:**

(...)

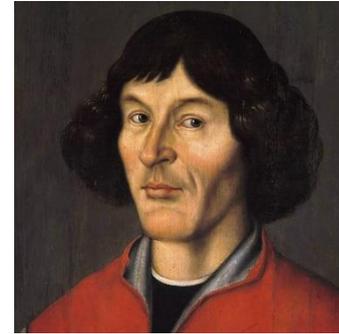
Das ist die *vierte* Säule, auf der unsere Strategie basiert. Wir sind nicht in China. Totale Kontrolle durch den Staat werden wir niemals akzeptieren. Wir sind aber auch nicht in den USA.

Wir gehen einen anderen, einen eigenen Weg. Wir lassen uns von unserem christlichen Menschenbild leiten. Jeder technologische Fortschritt hat sich dahinter einzureihen.



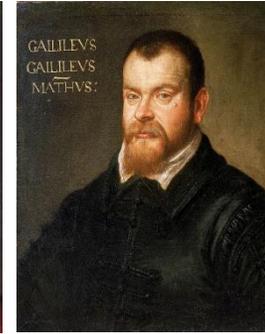
**Rede der Bundesministerin für Bildung und Forschung, Anja Karliczek,
zur Strategie Künstliche Intelligenz vor dem Deutschen Bundestag am 15. Februar 2019 in Berlin:**

„Jeder technologische Fortschritt hat sich <hinter unserem christlichen Menschenbild> einzureihen“.



Nikolaus Kopernikus
1473-1543

1543
heliozentrisches
Weltbild

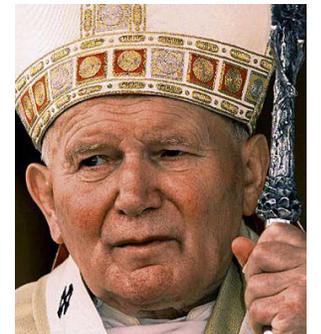


Galileo Galilei
1564-1642

1633-1642
Hausarrest durch Urban VIII
Verbot des heliozentrischen Weltbildes



Maffeo Barberini
Urban VIII
1568-1644



Karol Wojtyła
Johannes-Paul II
1920-2005

2. Nov. 1992
Rehabilitation
Galileis

**Rede der Bundesministerin für Bildung und Forschung, Anja Karliczek,
zur Strategie Künstliche Intelligenz vor dem Deutschen Bundestag am 15. Februar 2019 in Berlin:**

„Jeder technologische Fortschritt hat sich <hinter unserem christlichen Menschenbild> einzureihen“.

Was ist Organische Chemie?

Wikipedia:

Die **Chemie** ist eine Naturwissenschaft, die sich mit dem Aufbau, den Eigenschaften und der Umwandlung von Stoffen beschäftigt.

Die **organische Chemie** ist ein Teilgebiet der Chemie.

Darin werden die chemischen Verbindungen behandelt, die auf Kohlenstoff basieren.

Chemical Abstract Service: 2020: ca. 170 Millionen Verbindungen seit 1800

Davon sind ca. 85% Organische Verbindungen



Warum ist der Kohlenstoff an 85% aller Verbindungen beteiligt?

Was ist Organische Chemie?

Wikipedia:

Die **Chemie** ist eine Naturwissenschaft, die sich mit dem Aufbau, den Eigenschaften und der Umwandlung von Stoffen beschäftigt.

Die **organische Chemie** ist ein Teilgebiet der Chemie.

Darin werden die chemischen Verbindungen behandelt, die auf Kohlenstoff basieren.

Chemical Abstract Service: 2020: ca. 170 Millionen Verbindungen seit 1800
Davon sind ca. 85% Organische Verbindungen



Holz



Zucker



Kunststoff



Windeln



Bauschaum



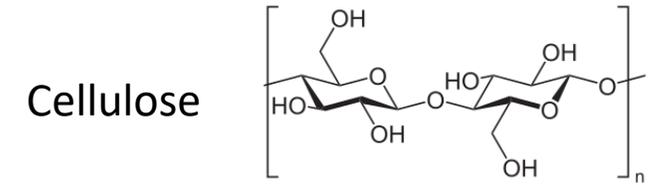
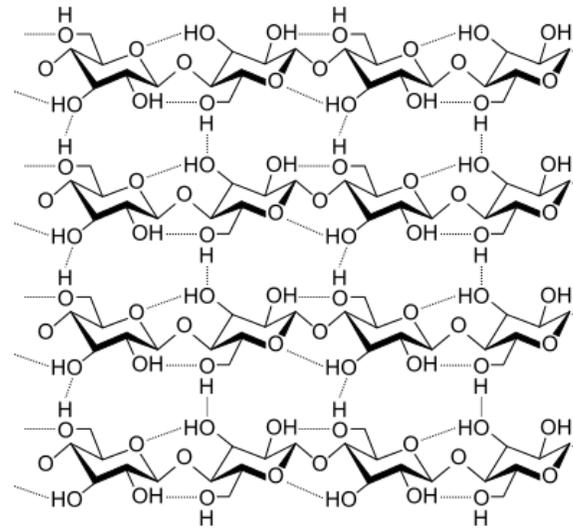
kaltes Licht



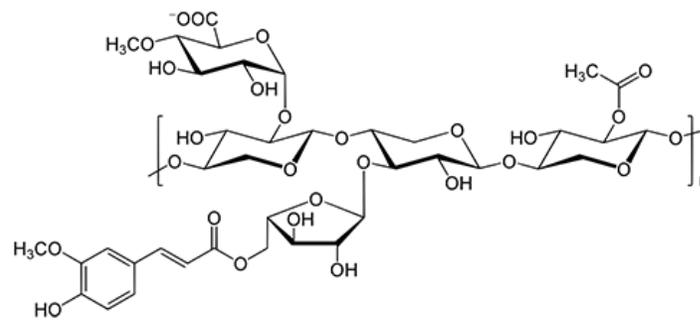
oszillierende Reaktionen

Holz

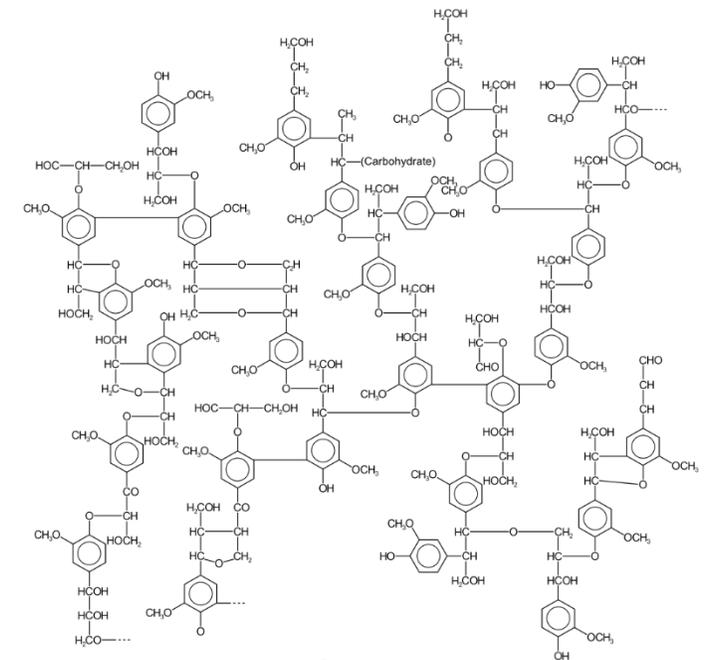
- 50% Cellulose
- 20% Hemicellulose
- 20% Lignin
- 10% andere Stoffe



Adansonia digitata
Afrikanischer Baobab-Baum (Affenbrotbaum)



Hemicellulose



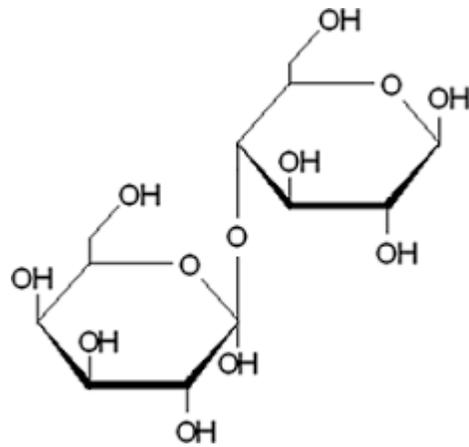
Lignin

Saccharose (Haushaltszucker)
(engl. sucrose)

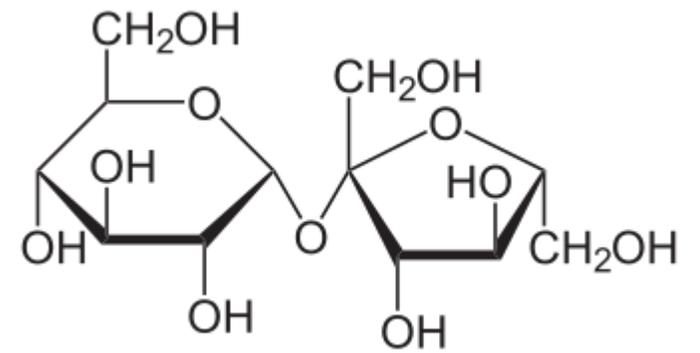


Südzucker AG, Offstein / Pfalz seit 1884

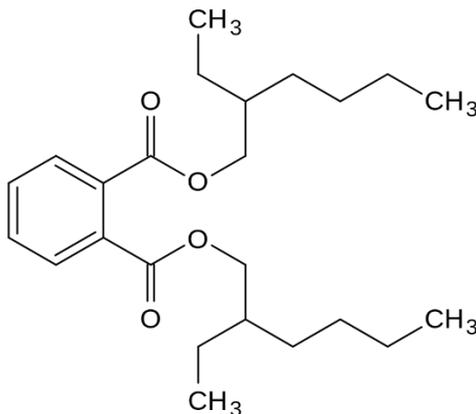
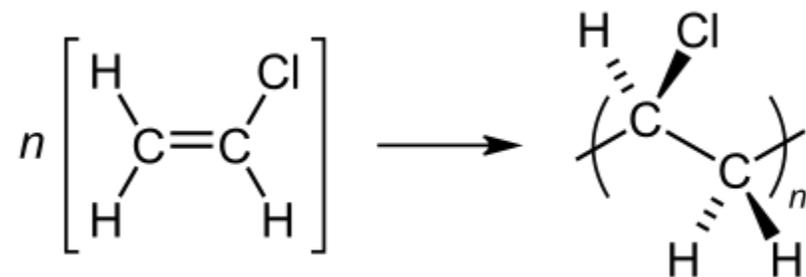
Cellobiose



Saccharose



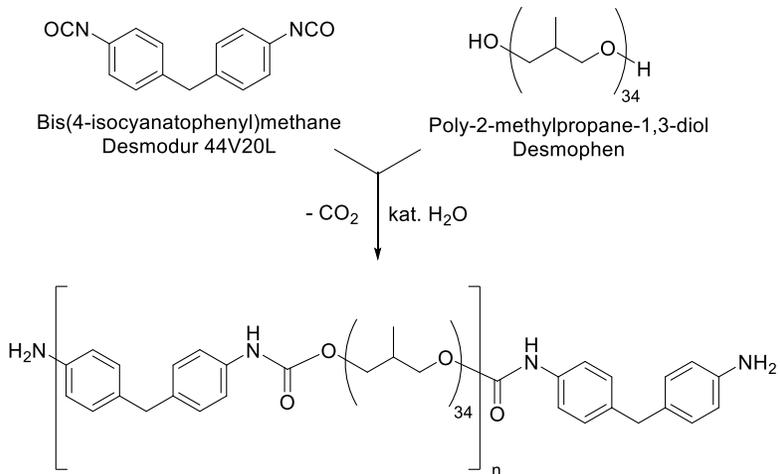
Polyvinylchlorid (PVC)



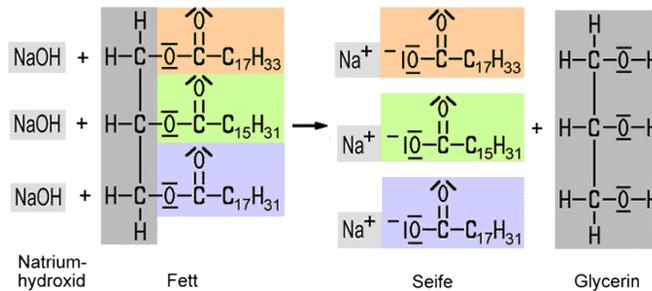
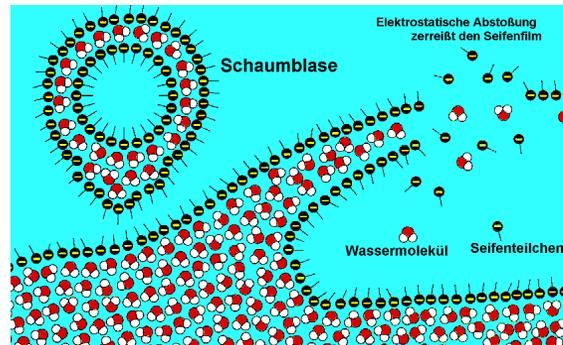
Weichmacher
Diethylhexylphthalat (DEHP)

Polyurethan

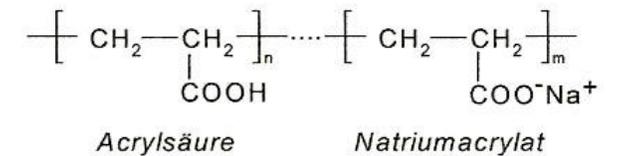
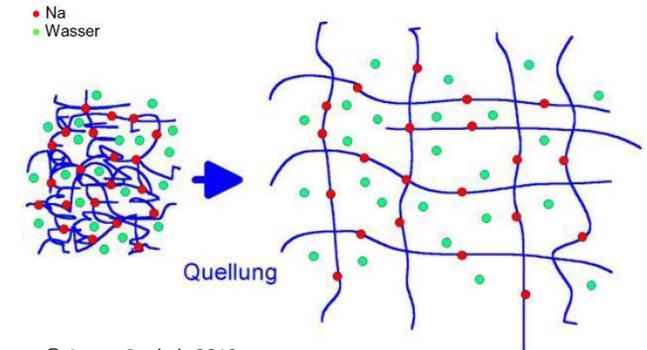
Polyurethan (Bauschaum)



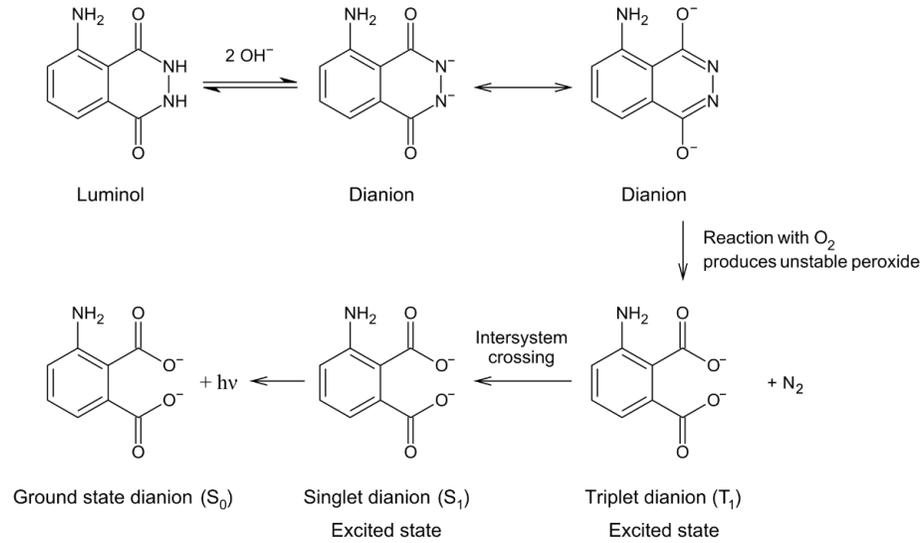
Seifenschaum



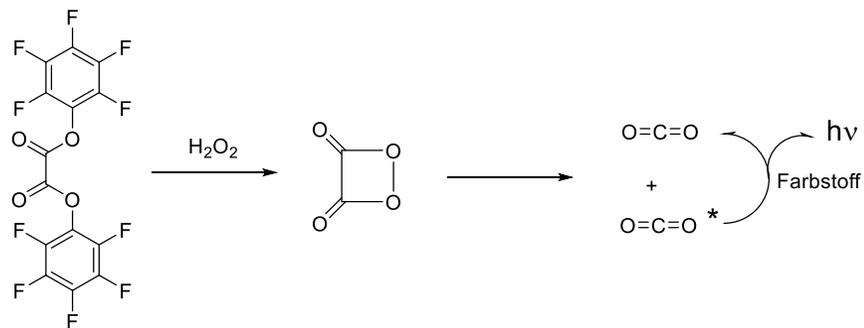
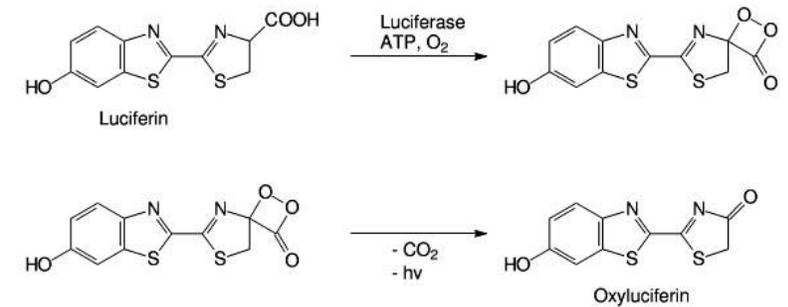
Hydrogel-Superabsorber (Babywindeln)



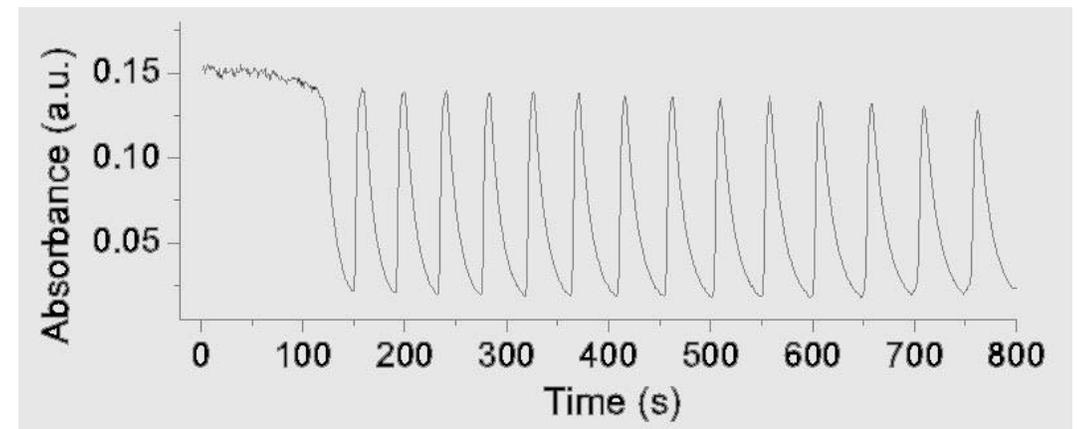
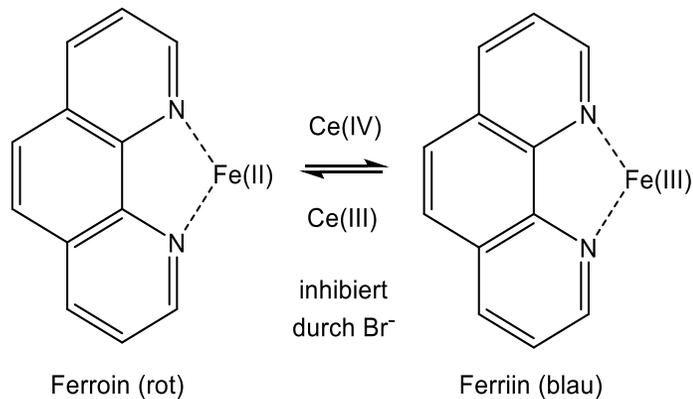
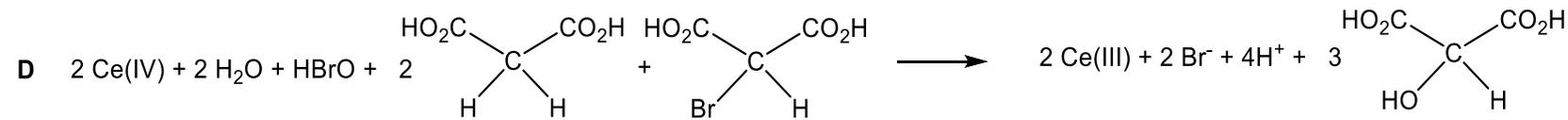
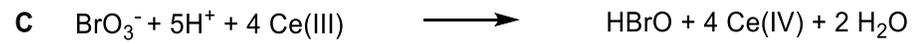
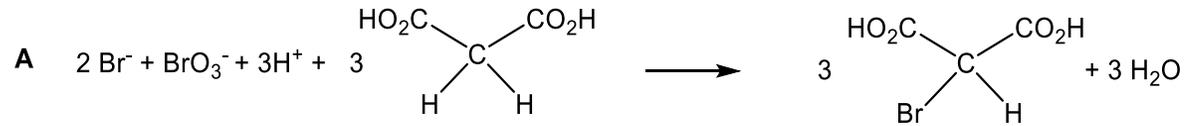
Chemiluminiszenz



Lichterzeugung bei Leuchtkafern

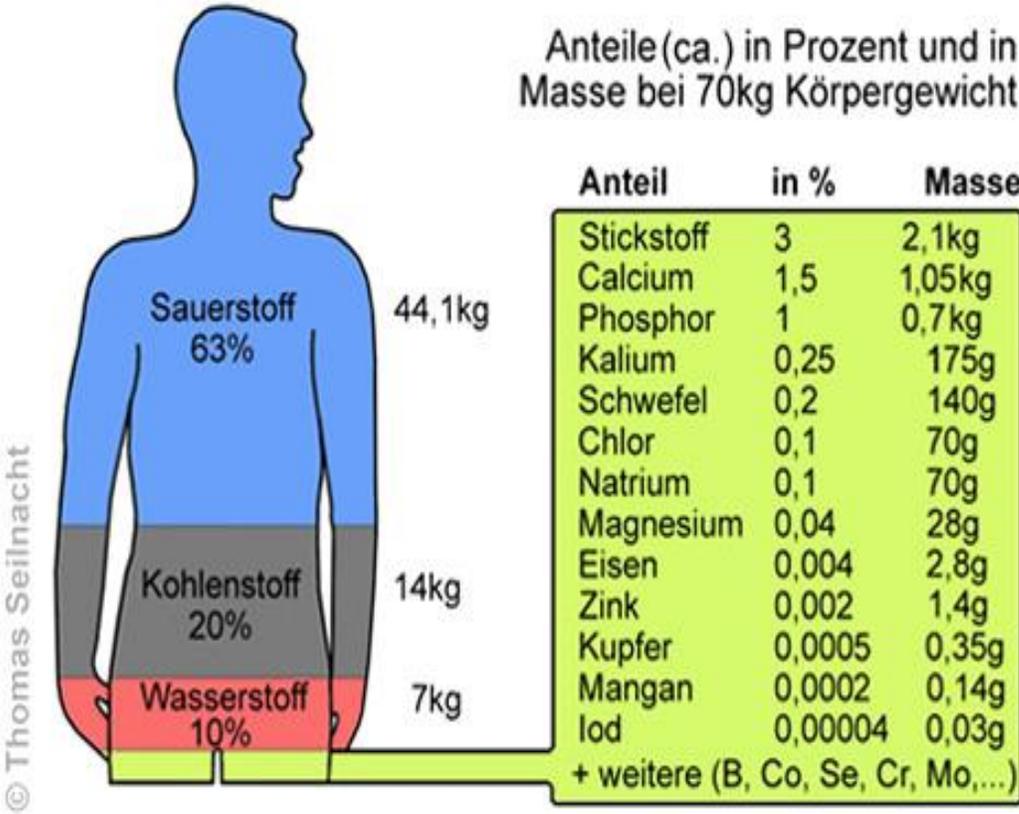
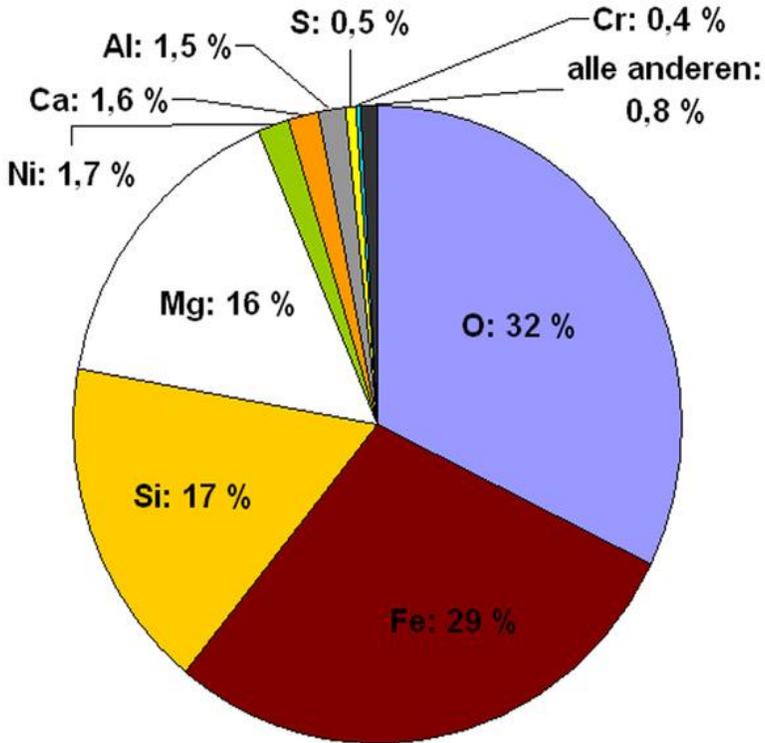


Belousov-Zhabotinsky-Reaktion

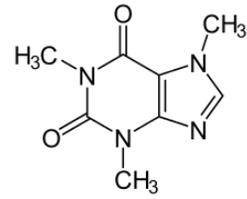


Was ist besonders am Kohlenstoff?

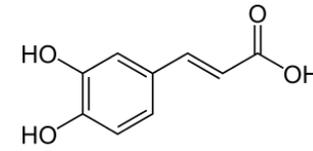
Häufigkeit der Elemente (Erde)



Kaffee



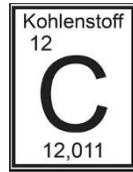
Coffein



Kaffeensäure

Caffeine	4-Methylbutanoic
Trigonelline	4-Hydroxy-2,5-dimethyl-4(2H)-furanone (furanol)
Chlorogenic acids	2-Ethyl-furanol
Cafestol	4-Hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanone (sotolon)
Kahweol	5-Ethyl-4-hydroxy-4-methyl-2(5H)-furanone (abexona)
Carbohydartes	2-Ethyl-4-hydroxy-5-methyl-4(5H)-furanone
Lipids	2-Methoxyphenol Phenolic/
2,3-Butanedione	4-Methoxyphenol Phenolic
2,3-Pentanedione	4-Ethyl-2-methoxyphenol Phenolic
1-Octen-3-one	4-Vinyl-2-methoxyphenol
2-Hydroxy-3-methyl-2-ciclopentene-1-	4-Ethenyl-2-methoxyphenol
Propanal	3-Methylindole
2-Methylpropanal	Vanilline
3-Methylpropanal	2,3-Dimethylpyrazine
2-Methylbutanal	2,5-Dimethylpyrazine
4-Methylbutanal	2-Ethylpyrazine
Hexanal	2-Ethyl-6-methylpyrazine
(E)-2-Nonenal	2,3-Diethyl-5-methylpyrazine
Methional	2-Ethyl-3,5-dimethylpyrazine
Methanethiol	3-Ethyl-2,5-dimethylpyrazine
4-Methyl-2-buten-1-thiol	3-Isopropyl-2-methoxypyrazine
2-Methyl-4-furanthiol	3-Isobutyl-2-methoxypyrazine
5-Dimethyl-trisulfide	2-Ethenyl-3,5-dimethylpyrazine
2-Furfurylthiol	2-Ethenyl-3-ethyl-5-methylpyrazine
2-Furanmethanethiol	6,7-Dihydro-5H-ciclopentapyrazine
2-(Methylthiol)propanal	6,7-Dihydro-5-methyl-5H-ciclopentapyrazine
2-(Methylthio-methyl)furan	3-Mercapto-3-methylbutyl formate
3,5-Dihydro-4(2H)-thiophenone	3-Mercapto-3-methylbutanol
2-Acetyl-2-tyazoline	

Kohlenstoff



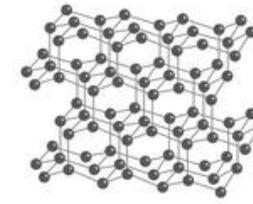
Entdeckung als Element: A.L. Lavoisier 1775
carboneum = Kohle

Konfigurationen:

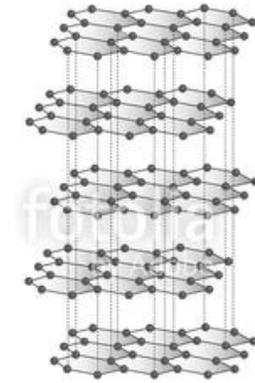
Graphit ρ 2,3 g/cm³



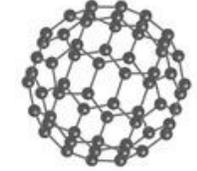
Diamant ρ 3,5 g/cm³



Diamant
kubisch flächenzentrierter
Kristall



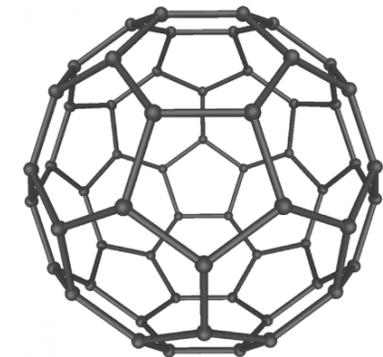
Graphit
hexagonaler Kristall
Schichtabstand : 335 pm



Fulleren
Durchmesser von C₆₀: 700 pm

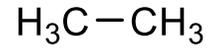
#95883949

Fulleren C₆₀ ρ 1,7 g/cm³

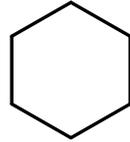


Was ist besonders am Kohlenstoff?

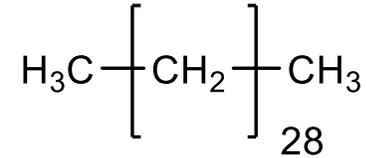
1. Kohlenstoff kann mit sich selbst Verbindungen eingehen



Ethan

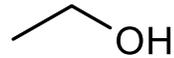


Cyclohexan

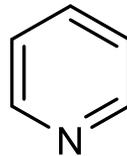


Triacontan $\text{C}_{30}\text{H}_{62}$
4.111.846.763 Isomere

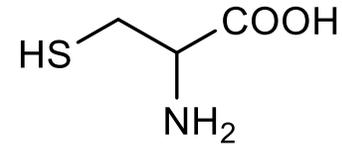
2. Kohlenstoff geht mit vielen anderen Elementen Verbindungen ein (SCHNOP)



Ethanol

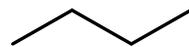


Pyridin

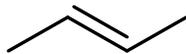


Cystein

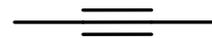
3. Kohlenstoff kann Einfach-, Doppel- und Dreifachbindungen bilden



n-Butan



trans-Buten



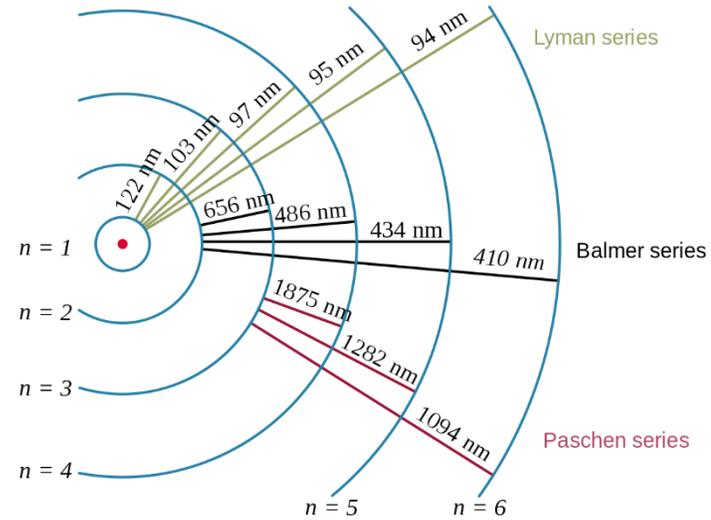
2-Butin
(Dimethylacetylen)

Was ist besonders am Kohlenstoff?

Bohrsches Atommodell (1913)



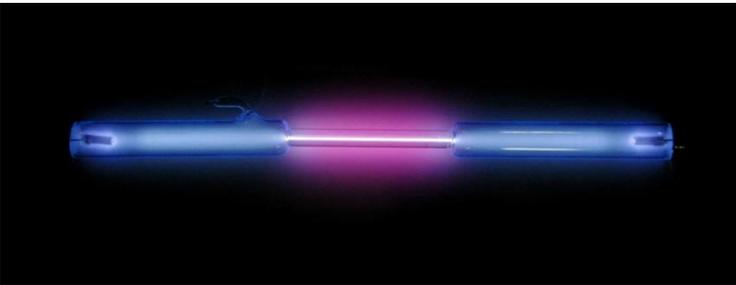
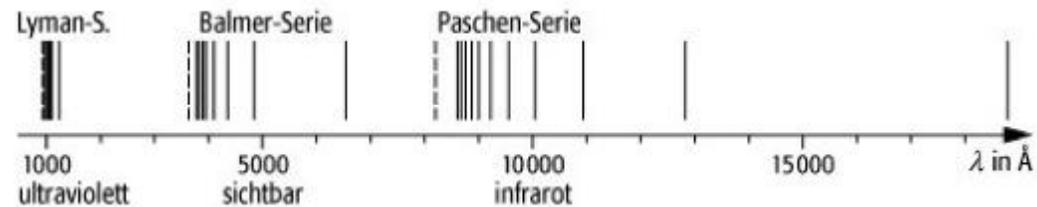
Nils Bohr (1885-1962)
Nobelpreis 1922



Bedingungen für ein Elektron im Feld eines Protons:

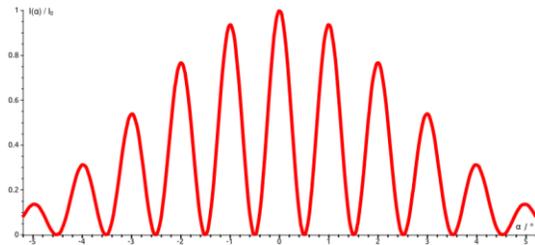
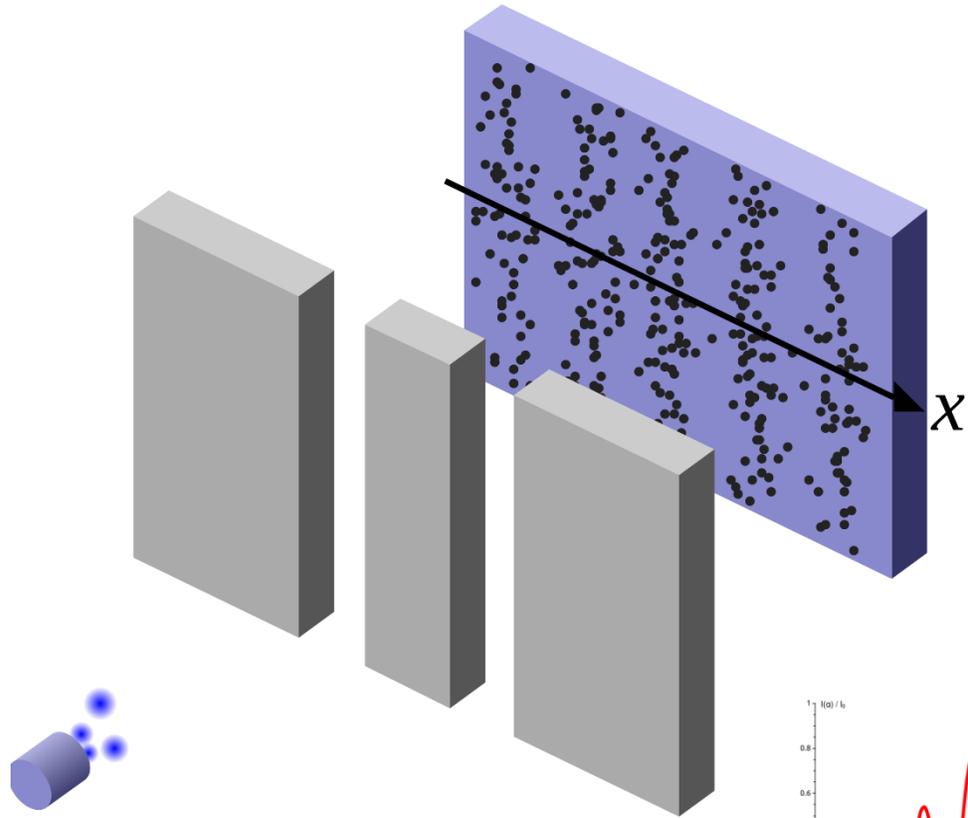
1. Elektron kann sich nur auf bestimmten Bahnen befinden (Hauptquantenzahl n)
2. Das Elektron kann von einem zu einem anderen Zustand springen
3. Die Frequenz der absorbierten oder abgestrahlten Energie entspricht der Umlauffrequenz

Emissionsspektrum des Wasserstoffs



Gasentladung H_2

Doppelspaltexperiment (Thomas Young 1802)



Anzahl der
Elektronen

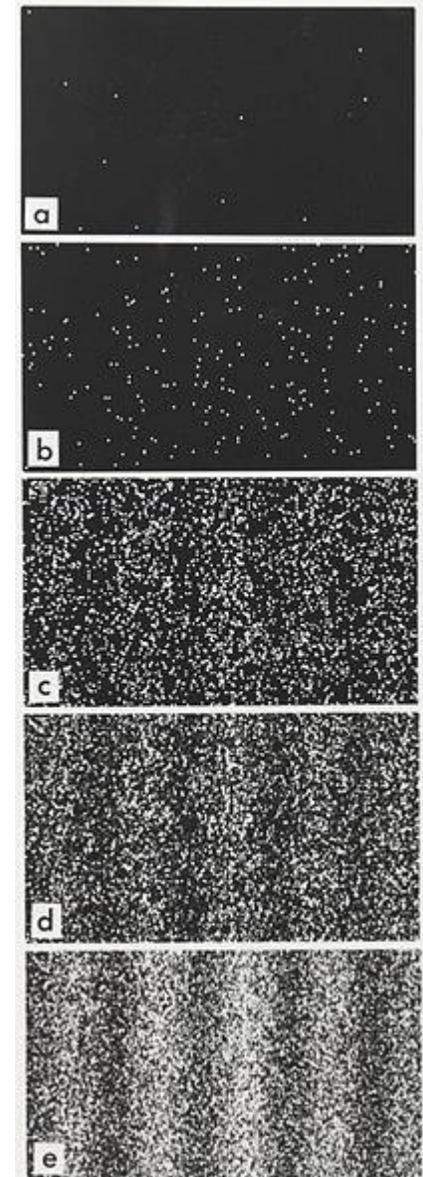
11

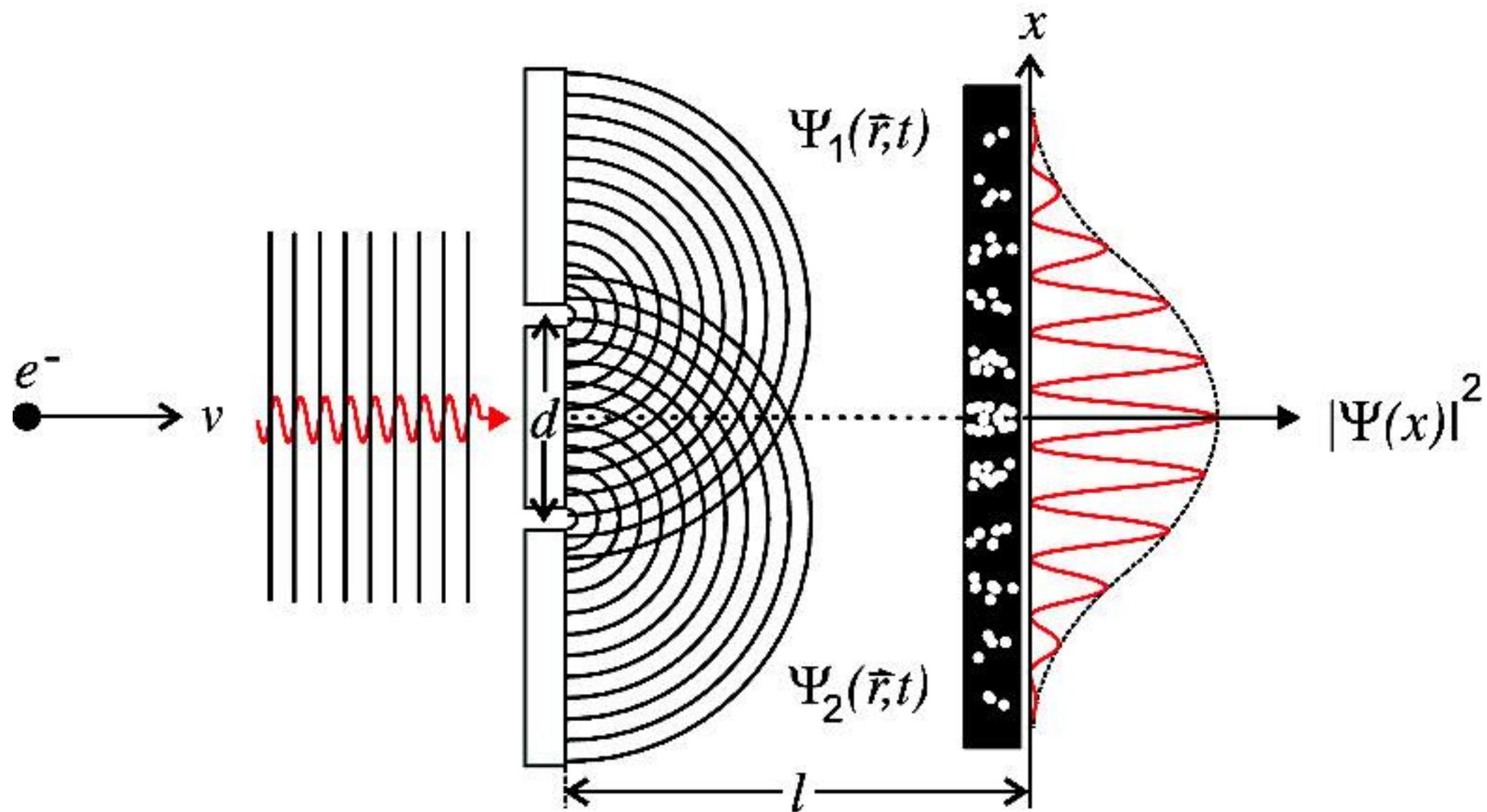
200

6.000

40.000

140.000





Quantenmechanik



Max Planck
1858-1947
Nobelpreis 1918

Planck-Konstante
(Wirkungsquantum)

$$h = 6.62607015 \times 10^{-34} \text{ Js}$$



Werner Heisenberg
1901-1976
Nobelpreis 1932

Unschärferelation

$$\Delta x \cdot \Delta p > \frac{h}{4\pi}$$



Erwin Schrödinger
1887-1933
Nobelpreis 1933

Schrödinger-Gleichung
(Wellengleichung)

$$H(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle$$

Größenordnung:

L
Plancklänge
 $1,6 \cdot 10^{-35} \text{ m}$



quark
 $\sim 1 \text{ am}$
($1 \text{ am} = 10^{-18} \text{ m}$)



Proton Elektron
1,7-2,8 fm
($1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$)

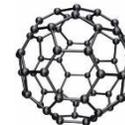
Atome / Moleküle

H-Atom: 20 pm
H₂-Molekül 74 pm
($1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$)

Bindungslängen

ca. 50-200 pm
C-C 154 pm
C=C 134 pm
C≡C 120 pm

Fulleren C₆₀



700 pm

Nanopartikel

1-100 nm
($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$)

Zellen

$\sim 100 \mu\text{m}$
($1 \mu\text{m} = 10^{-6} \text{ m}$)

Die **SCHRÖDINGER-GLEICHUNG** beschreibt das Verhalten von Elektronen im Feld von Atomkernen:

Schrödinger-Gleichung $H\Psi = \varepsilon\Psi$

H Hamiltonoperator (Energieoperator)

$\Psi(t, \mathbf{x})$ Wellenfunktion

ε diskrete Energieniveaus

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein Wasserstoffatom ergibt die möglichen **ATOMORBITALE** und deren geometrische Form als räumliche Bereiche, in denen das Elektron „vorzugsweise“ aufgefunden werden kann. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons in einem bestimmten Raumabschnitt wird dabei als Quadrat der Wellenfunktion ausgedrückt.

Ψ^2 Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons

Orbital Raumbereich, in dem das Elektron am wahrscheinlichsten angetroffen wird.

Orbitale gleicher Energie (gleiche Haupt- und Nebenquantenzahl) heißen **ENTARTET**

Orbitalmodell des Atoms

Elektron als stehende Welle: Wellenfunktion $\psi(x,t)$

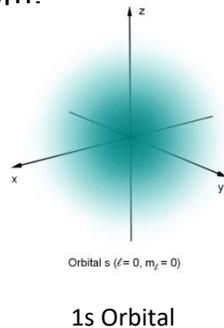
Aufenthaltswahrscheinlichkeit: ψ^2 (Orbital: Bereich in dem das Elektron am wahrscheinlichsten gefunden wird)

Energieniveaus: $\hat{H}\psi = \varepsilon\psi$ (Eigenwertproblem/viele Lösungen: $\psi_1 \varepsilon_1, \psi_2 \varepsilon_2, \psi_3 \varepsilon_3, \dots$)

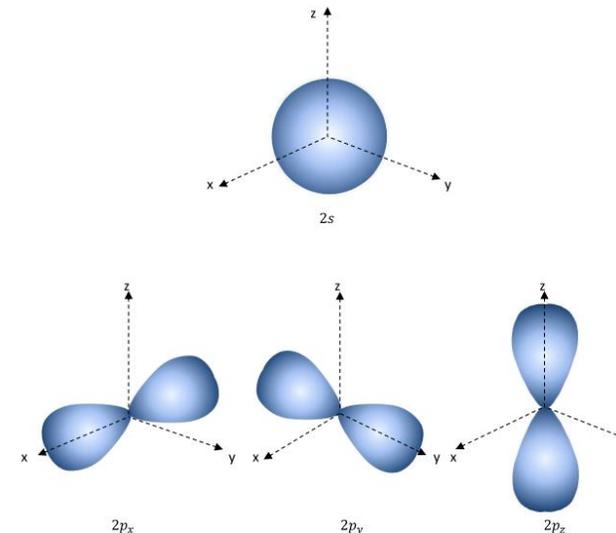
4 Quantenzahlen: Hauptquantenzahl (Schale): $n = 1, 2, 3, \dots$ (K, L, M)
Nebenquantenzahl (Bahndrehimpuls): $l = 0, 1, 2, \dots (n-1)$, (s, p, d, f) ←
Magnetquantenzahl (Neigung des Drehimpulses): $m = -l, \dots, 0, \dots, +l$
Spinquantenzahl (Drehimpuls des Elektrons): $m_s = \pm \frac{1}{2}$

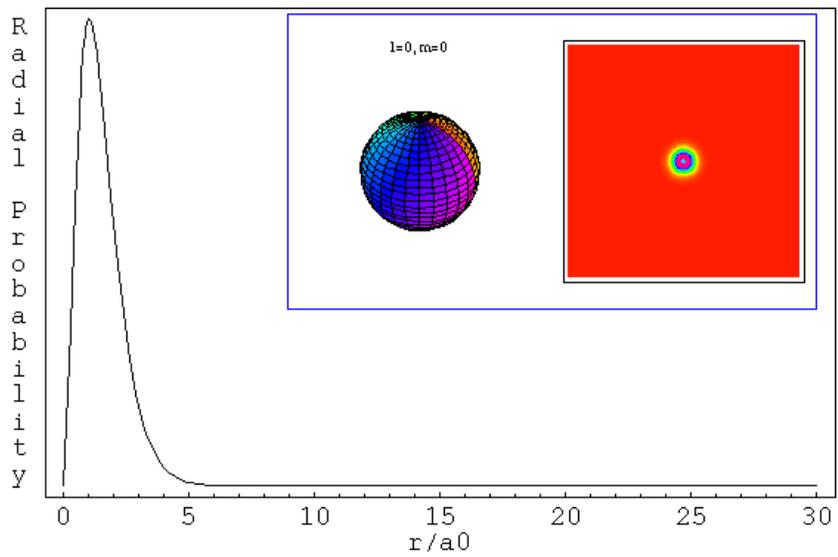
z.B. Wasserstoffatom:

$n=1$
 $l=0$ (s)
 $m=0$
 $m_s = \pm \frac{1}{2}$

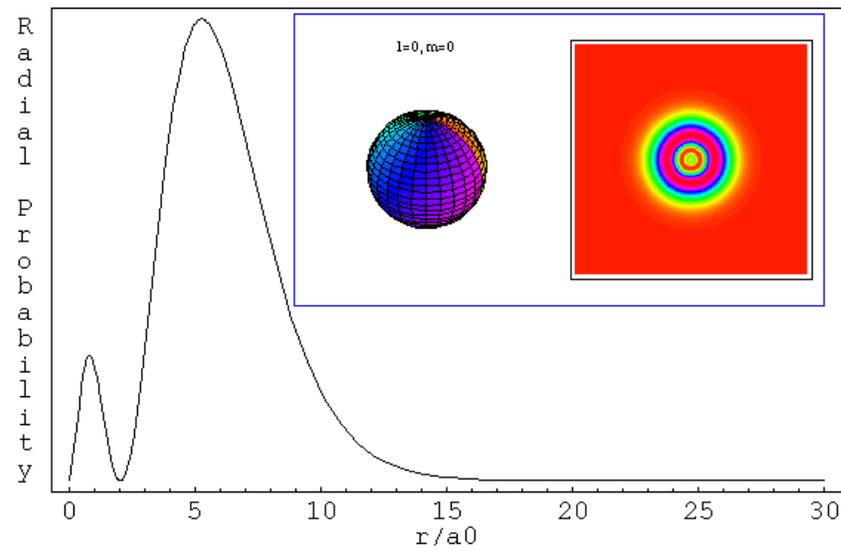


$n=2$
 $l=0$ (s), 1 (p)
 $m=-1(x), 0(y), +1(z)$
 $m_s = \pm \frac{1}{2}$

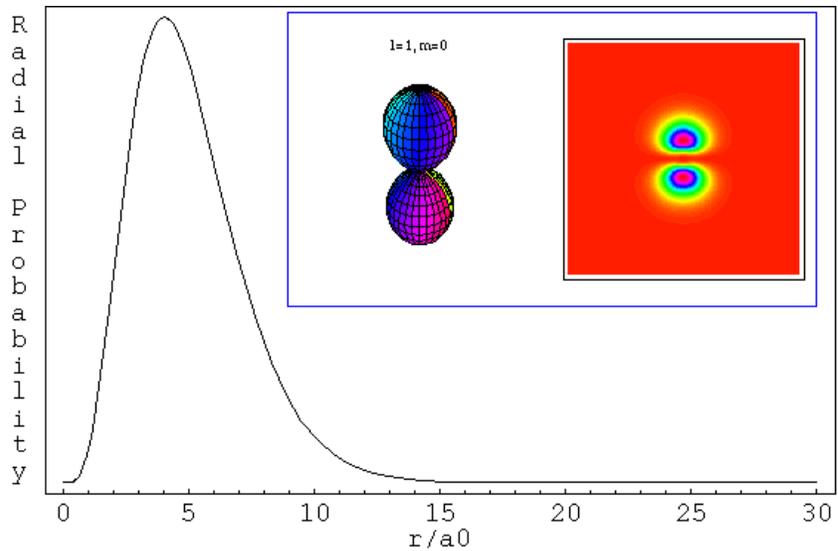




1s Orbital ($n=1, l=0$)



2s Orbital ($n=2, l=0$)



2p Orbital ($n=2, l=1, m=-1, 0, +1$; $\rightarrow 2p_x, 2p_y, 2p_z$)

Pauli-Prinzip

höchstens 2 Elektronen mit antiparallelem Spin können ein Orbital besetzen

Valenzelektronen

sind diejenigen Elektronen eines Atoms, die mit der höchsten Hauptquantenzahl charakterisiert sind (Elektronen der „äußeren Schale“).

Elektronenkonfigurationen

Konfiguration des Kohlenstoff im Grundzustand: ${}^6\text{C}$ 6 Elektronen

$n=1, l=0, m=0, s=\pm 1/2$

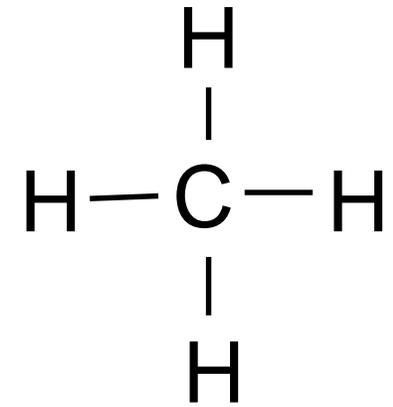
1s-Orbital mit 2 Elektronen

$n=2, l=0, m=0, s=\pm 1/2$

2s-Orbital mit 2 Elektronen

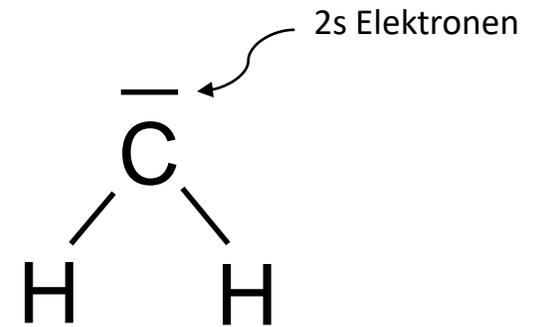
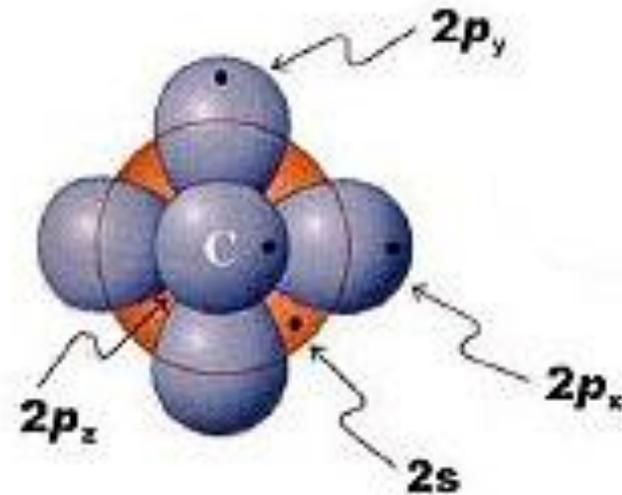
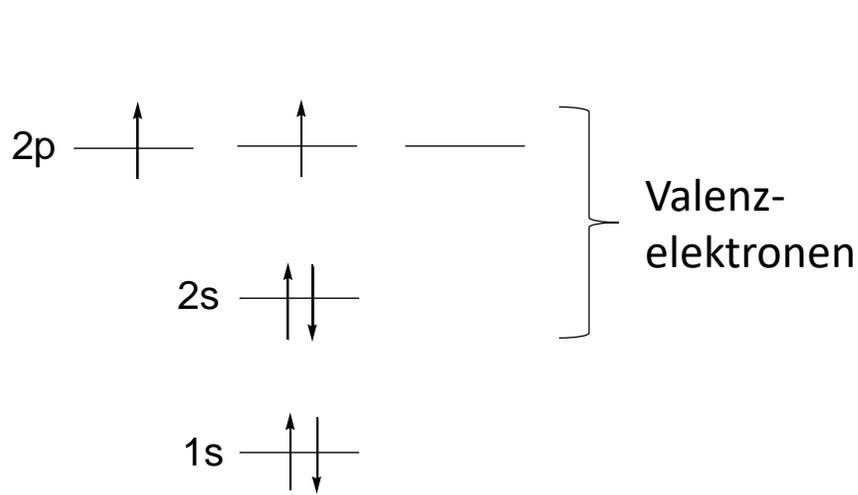
$n=2, l=1, m=-1,0,+1, s=+1/2$

2p-Orbitale mit 2 Elektronen



Methan

Energie



Methylen
(ein Carben)

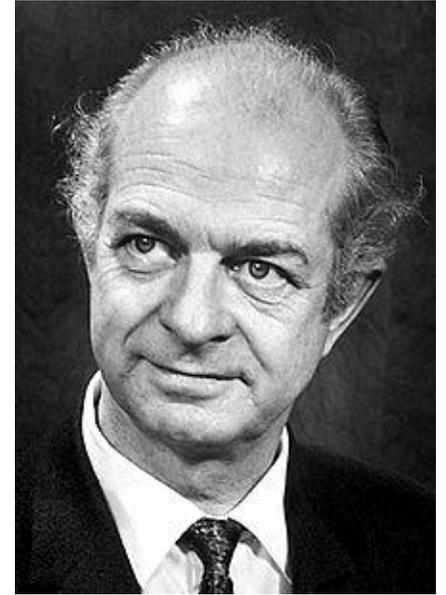
Elektronenkonfiguration des Kohlenstoffatoms: $1s^2 2s^2 2p$

Hybridisierung

Unter **HYBRIDISIERUNG** versteht man die mathematische Kombination von x Atomorbitalen mit gleicher Hauptquantenzahl zu x entarteten Hybridorbitalen (L. Pauling 1931). Mit der Hybridisierung ist meist ein Energiegewinn verbunden.

Die Hybridisierung ist notwendig, da die „Formen“ der berechneten AO meist nicht mit den aus den chemischen Eigenschaften abgeleiteten „Formen“ übereinstimmen.

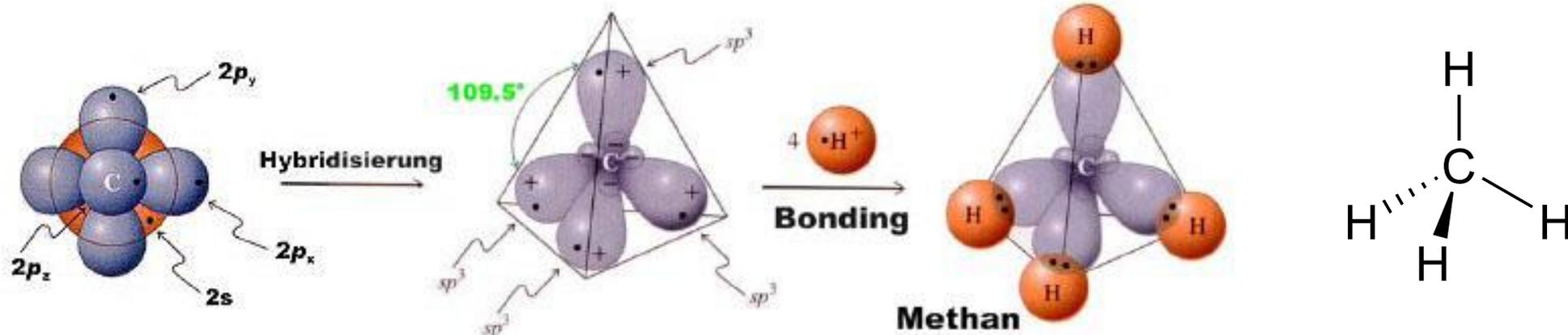
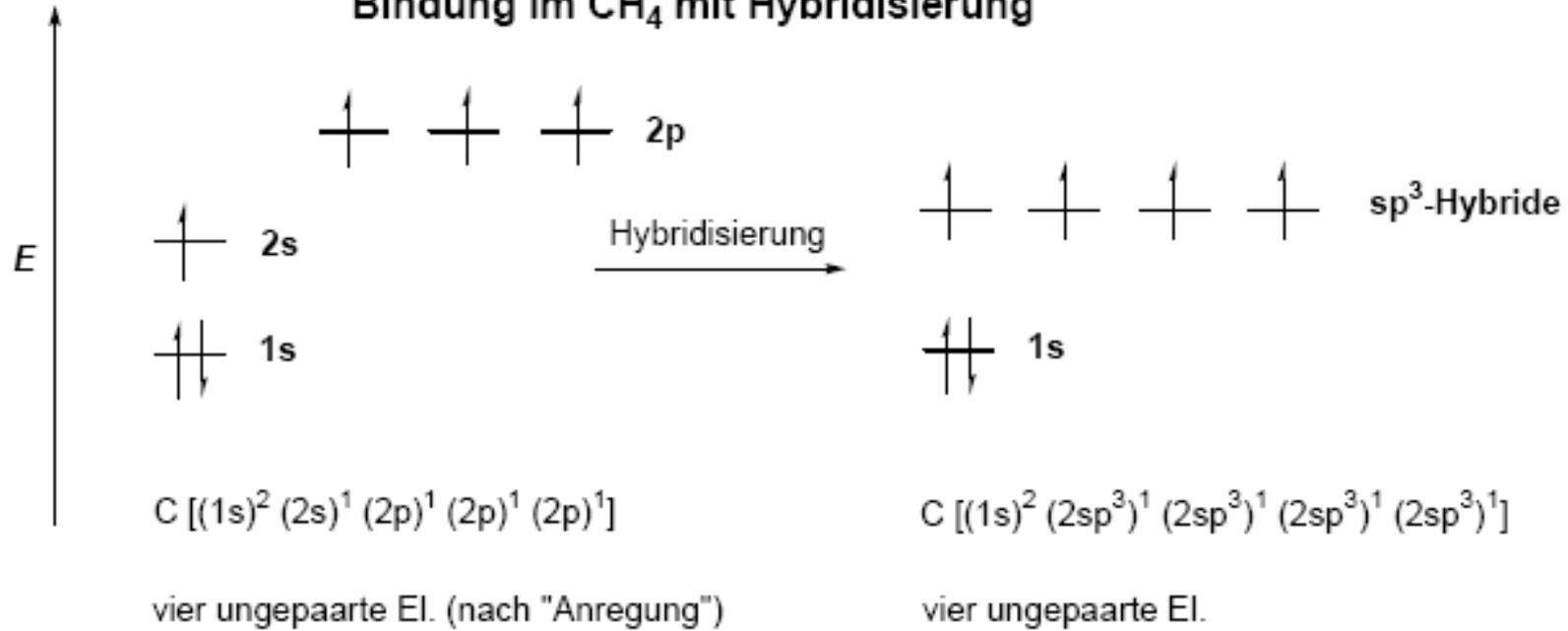
BEISPIEL: Methan CH_4 müßte zwei unterschiedliche CH-Bindungen haben. Jedoch sind alle CH-Bindungen im Methan gleich.



Linus Carl Pauling
([1901-1994](#))

Nobelpreis Chemie 1954
Friedensnobelpreis 1963

Bindung im CH₄ mit Hybridisierung



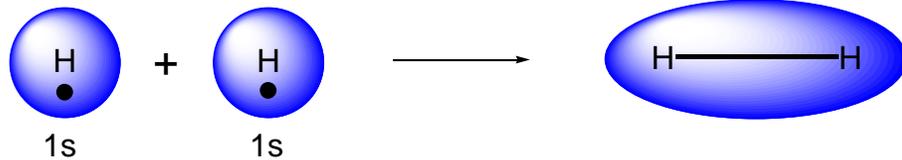
Molekülorbitale

Eine chemische Bindung zwischen zwei Atomen wird als Austausch zweier Elektronen zwischen den Atomen aufgefasst. Ein Bindungsstrich in einer chemischen Formel bedeutet immer ein Elektronenpaar!

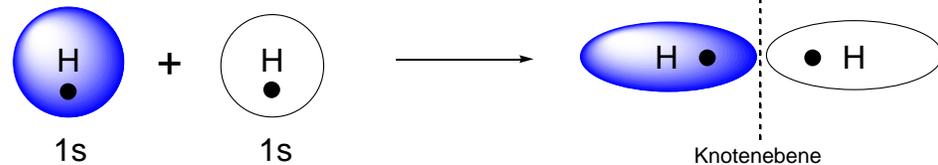
Aus den Atomorbitalen werden durch Überlappung neue **Molekülorbitale** gebildet. Mathematisch bedeutet dies, dass Molekülorbitale (**MO**) als Linearkombination von Atomorbitalen (AO) aufgefasst werden können. Die Wellenfunktion für ein MO setzt sich damit aus der Summe der gewichteten AO zusammen.

Beispiel: Wasserstoff-Molekül H_2

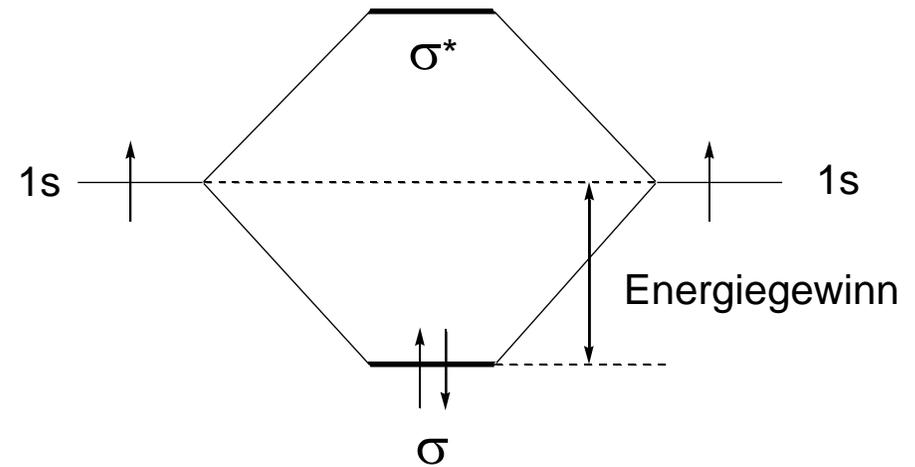
In-Phase Überlappung



Außer-Phase Überlappung



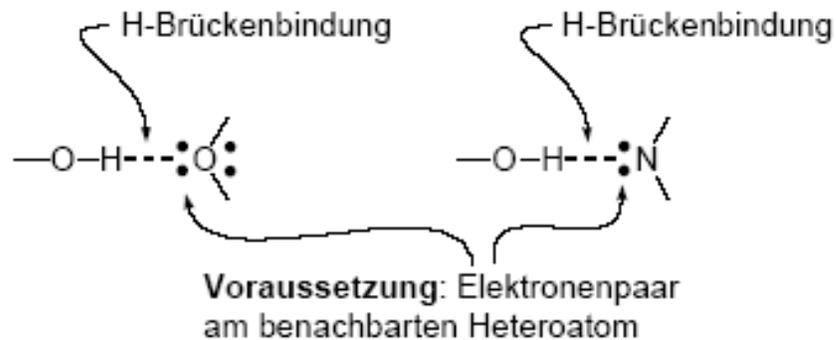
Energie



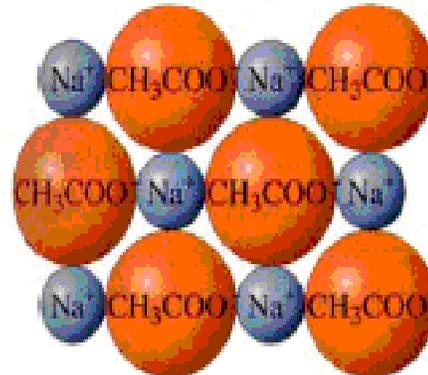
MO im H_2 Molekül: σ = bindendes, σ^* = antibindendes MO

Chemische Bindung

- Die **KOVALENTE BINDUNG** oder **ATOMBINDUNG** wird durch ein Elektronenpaar vermittelt. Das Bindungselektronenpaar besetzt dabei ein Molekülorbital, das durch Überlappung entsprechender AO gebildet wird
- Die **WASSERSTOFFBRÜCKENBINDUNG** entsteht durch „Vermittlung“ der Bindung durch ein PROTON (Wasserstoffkern). Sie spielt v.a. bei biochemischen Molekülen eine wichtige Rolle. Eine H-Brückenbindung bildet sich, wenn eine OH, NH, oder SH-Gruppe nahe genug zu einem anderen Heteroatom, normalerweise O oder N zu liegen kommt. Dadurch ergibt sich eine Anziehung zwischen dem Elektronenpaar am Heteroatom und dem Kern des H-Atoms. Optimal ist eine lineare Anordnung der 3 Atome.
- Die **IONENBINDUNG** entsteht durch starke Coulomb-Kräfte zwischen geladenen Teilchen (Ionen).
- Die **DIPOL-DIPOL-WECHSELWIRKUNG** entsteht zwischen Molekülen mit **POLARISIERTEN KOVALENTEN BINDUNGEN**.
- Die **VAN-DER-WAALS-BINDUNG** entsteht durch **INDUZIERTE DIPOLE** (Londonsche Kräfte).



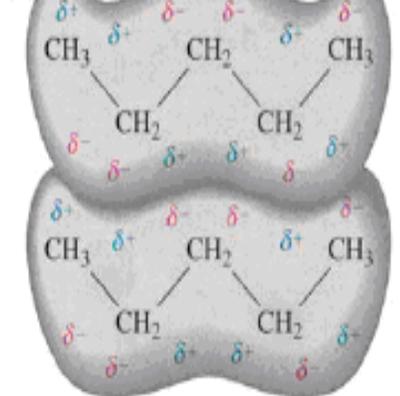
Coulomb Anziehung im Natriumacetat



Dipol-Dipol-WW in festem CH_2Cl_2

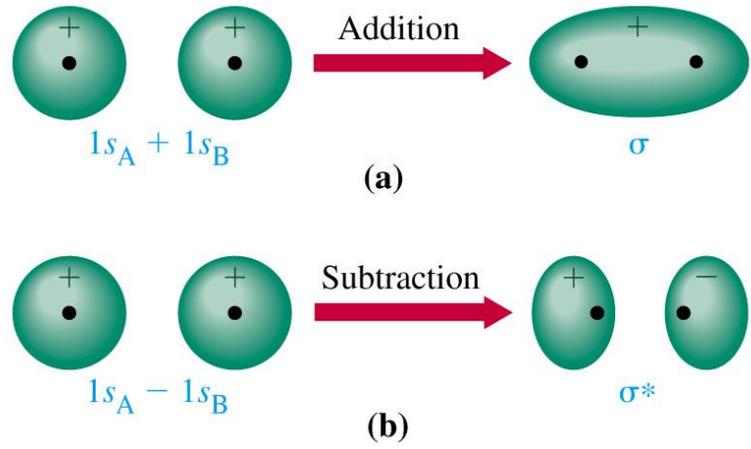


London-Kräfte in festem Pentan

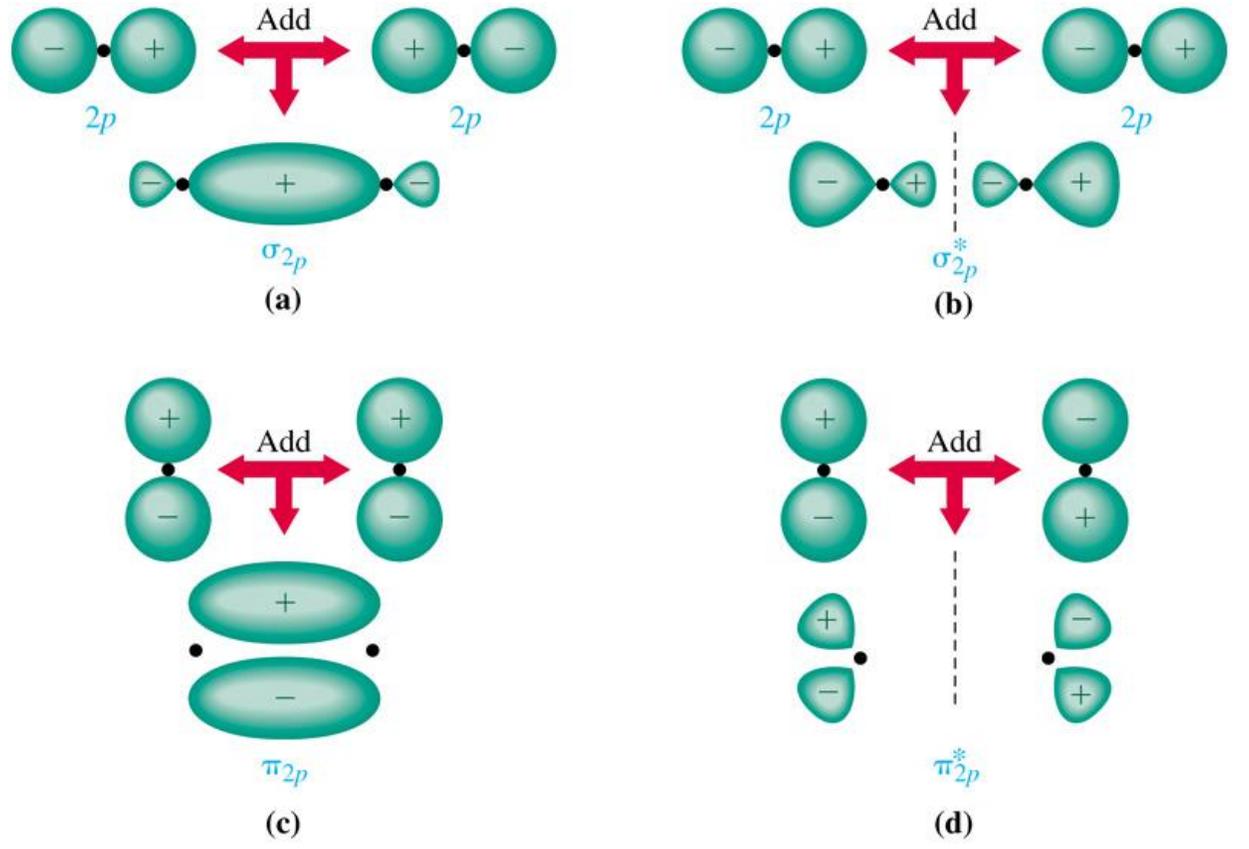


Überlappung von Orbitalen – Molekülorbitale (MO)

AO können auf zwei unterschiedliche Art und Weise miteinander zu MO überlappen: s-Bindungen und p-Bindungen



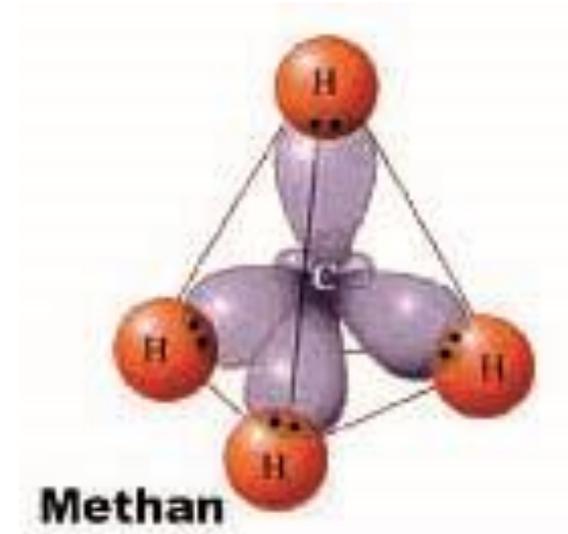
Überlappung von zwei s-AO zu einem bindenden σ -MO (a) und einem antibindenden σ^* -MO (b)



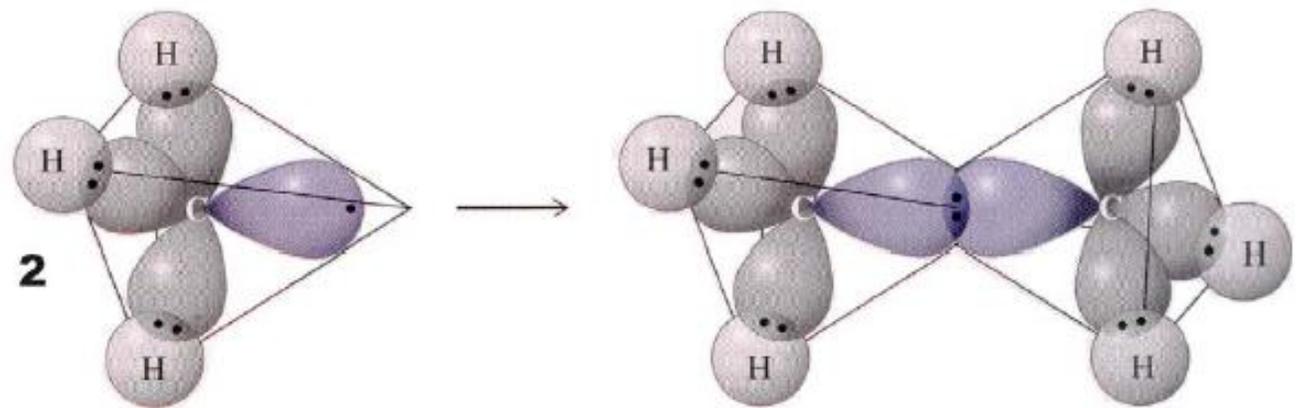
Überlappung von zwei p-AO zu einem bindenden s-MO (a) und einem antibindenden s*-MO (b) oder zu einem bindenden π -MO (c) und einem antibindenden π^* -MO (d)

Bindungstypen

CH-BINDUNGEN sind immer σ -Bindungen; der Kohlenstoff ist sp^3 hybridisiert.
z.B. Methan CH_4

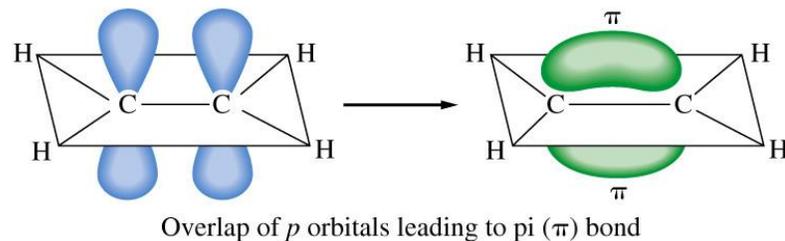
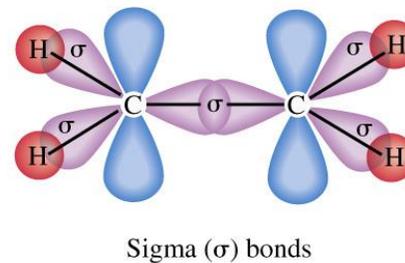
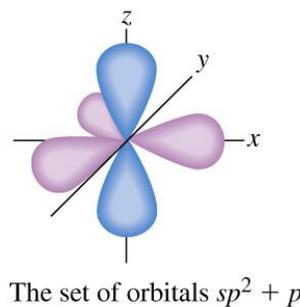
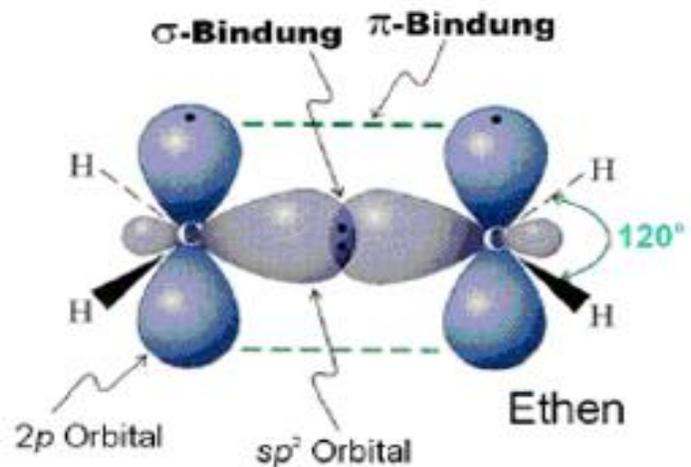


CC-EINFACHBINDUNGEN sind immer σ -Bindungen; der Kohlenstoff ist sp^3 hybridisiert
z.B. Ethan C_2H_6



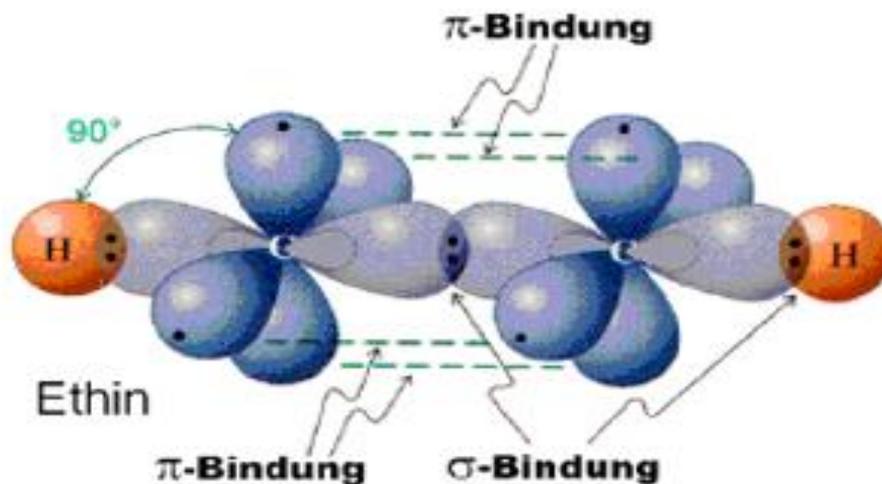
CC-DOPPELBINDUNGEN sind immer aus einer σ -Bindung und einer π -Bindung aufgebaut; der Kohlenstoff ist sp^2 hybridisiert

z.B. Ethen C_2H_4 (auch: Ethylen) $H_2C=CH_2$



CC-DREIFACHBINDUNGEN sind immer aus einer σ -Bindung und zwei π -Bindungen aufgebaut; der Kohlenstoff ist sp hybridisiert

z.B. Ethin C_2H_2 (auch: Acetylen) $H-C\equiv C-H$



Typische Bindungslängen in pm (10^{-12} m)

C–H	Länge in pm	C–C	Länge in pm	Mehrfachbindungen	Länge in pm
sp ³ –H	110	sp ³ –sp ³	154	Benzol	140
sp ² –H	109	sp ³ –sp ²	150	Alken (C=C)	134
sp–H	108	sp ² –sp ²	147	Alkin (C≡C)	120
		sp ³ –sp	146		
		sp ² –sp	143		
		sp–sp	137		

Alte Bindungslängen in Å (10^{-10} m)