

Vorlesung Organische Chemie II „Reaktionsmechanismen“ (3. Sem.)

Gliederung

- Grundlagen der physikalisch-organischen Chemie
- Radikalreaktionen
- Nukleophile und elektrophile Substitution am gesättigten C-Atom (S_N - und S_E -Typ)
- Eliminierungsreaktion: Herstellung ungesättigter Verbindungen
- Elektrophile und nukleophile Additionsreaktionen an C=C Doppelbindungen
- Elektrophile aromatische Substitution
- Nukleophile aromatische Substitution
- Carbonylreaktionen: a) Nukleophile Addition an C=O Doppelbindungen
b) Reaktionen der Derivate der Carbonsäure
- Umlagerungsreaktionen
- Redoxreaktionen
- **K. P. C. Vollhardt, N. E. Schore**, Organische Chemie, VCH, Weinheim.
- **P. Sykes**, Reaktionsmechanismen der Organischen Chemie, Eine Einführung, VCH, Weinheim.

<http://www-oc.chemie.uni-regensburg.de/daub/lehre.html>

Grundlagen der physikalisch organischen Chemie

- ❖ Klassifizierung organischer Substanzklassen
 - ❖ Molekulare Struktur, Elektronenstruktur, Stereochemie, Symmetrie
 - ❖ Klassifizierung chemischer Reaktionen
 - Reaktionstyp, Zwischenstufen, Substanzklassen
 - ❖ Reversible Reaktion, chemisches Gleichgewicht, Thermodynamik
 - ❖ Reaktionsgeschwindigkeit, Aktivierungsenergie, Kinetik, Katalyse
 - ❖ Übergangszustand, reaktive Zwischenstufe
 - ❖ Reaktionsmechanismus, Reaktionskoordinate-Energie-Diagramm
- **P. Atkins**, The Elements of Physical Chemistry, Third Edition ed., Oxford University Press, Oxford, **2001**.

Gliederung der einzelnen Kapitel

Physikalische Grundlagen, Struktur (Handwerkzeug)
Reaktionsgleichung, Reaktionsmechanismus
Beispiele und Anwendung
Übungen

Klassifizierung organischer Stoffklassen

Acyclische Verbindungen
kettenförmige Atomanordnung

Cyclische Verbindungen
ringförmige Atomanordnung

Gesättigte
Kohlenwasserstoffe
Alkane

Ungesättigte
Kohlenwasserstoffe
Alkene, Alkine

Carbocyclen

Heterocyclen

Alicyclen

gesättigt

ungesättigt

Aromaten

aromatisch

Klassifizierung chemischer Reaktionen

Nach Reaktionstyp

Substitution
Addition
Eliminierung
Umlagerung

Nach Zwischenstufen

Radikale
Radikationen
Carbokationen
Carbanionen
Carbene (Nitrene)

Nach Substanzklassen

Alkane/Alkene/Alkine
Aromaten/Heteroaromaten
Carbocyclen/Heterocyclen
Stickstoff(Phosphor)verbindungen
Sauerstoff(Schwefel)verbindungen
Halogenderivate
Elementorganische Verbindungen
Metallorganische Verbindungen
Naturstoffe
Polymere
Materialien

Chemische Reaktionen: Physikalisch-chemische Grundlagen

Thermodynamik

Chemische Gleichgewichte



Gleichgewichtskonstante K

Gibb'sche freie Standard-Reaktionsenthalpie „standard free energy“

(ΔG° in kJ/mol oder kcal/mol; 1 kcal/mol entspricht 4.18 kJ/mol)

endergonische ($0 < \Delta G^\circ$) und exergonische Prozesse ($0 > \Delta G^\circ$)

Enthalpie (ΔH° in kJ/mol) und Entropie (ΔS° in J/K·mol)

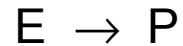
$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$$

endotherme ($0 < \Delta H^\circ$) und exotherme ($0 > \Delta H^\circ$) Prozesse

Chemische Reaktionen: Physikalisch-chemische Grundlagen

Kinetik

Geschwindigkeit chemischer Reaktionen:



freie Aktivierungsenergie $\Delta G^\ddagger = \Delta H^\ddagger - T \Delta S^\ddagger$ (Eyring)

Experimentelle Aktivierungsenergie (Arrhenius):

$$E_a = \Delta H^\ddagger + RT; k = A e^{-E_a/RT}, \log k = \log A - E_a/2.303RT$$

Chemische Reaktionen: Physikalisch-chemische Grundlagen

Reaktionskoordinatendiagramm

gibt den Zusammenhang von Reaktionsablauf und Energie an:

Kernkoordinaten werden gegen die elektronische Energie aufgetragen.

Begriffe, die den Reaktionsablauf beschreiben: (a) Ordnung der Reaktion, b) Geschwindigkeitskonstante, c) Aktivierungsenergie, Aktivierungsentropie d) endotherme (endergonische) bzw. exotherme (exergonische) Reaktion, e) geschwindigkeitsbestimmender Schritt, f) Übergangszustand, Zwischenstufe

Chemische Reaktionen: Physikalisch-chemische Grundlagen

Reaktionsmechanismus

stellt den Verlauf einer chemischen Reaktion als Änderung der elektronischen Energie in Abhängigkeit der Atomkernkoordinaten dar.

Die Strukturachse definiert

Ausgangsverbindung, Übergangszustand, Zwischenstufe, Endverbindung.

Die Aktivierungsenergie und die Reaktionsenthalpie werden auf der Energieachse abgelesen.