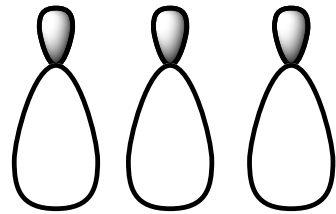


# sp<sup>2</sup>-Hybridisierung

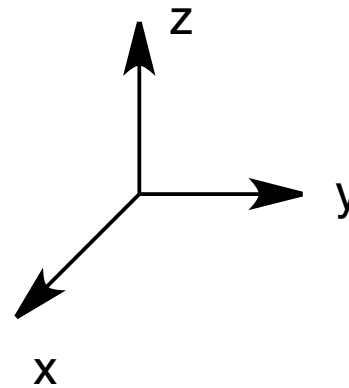
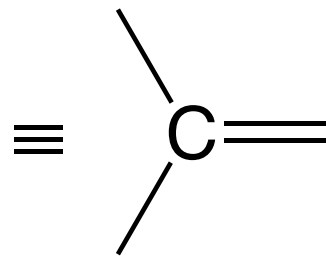
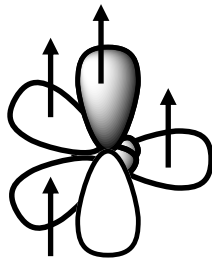
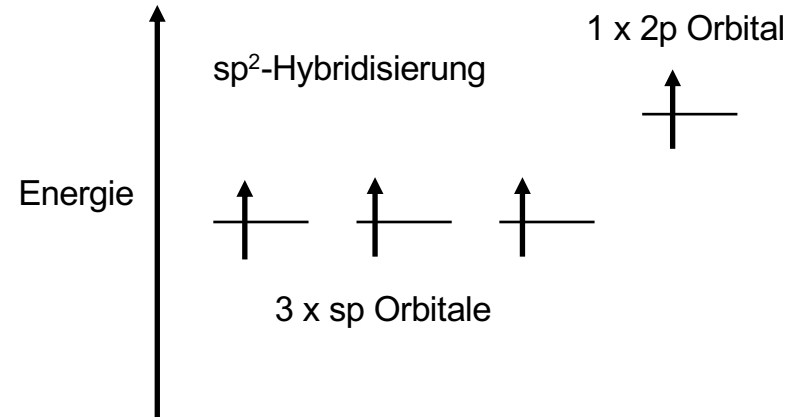
## sp<sup>2</sup>-Hybridisierung



3 x sp-Orbital

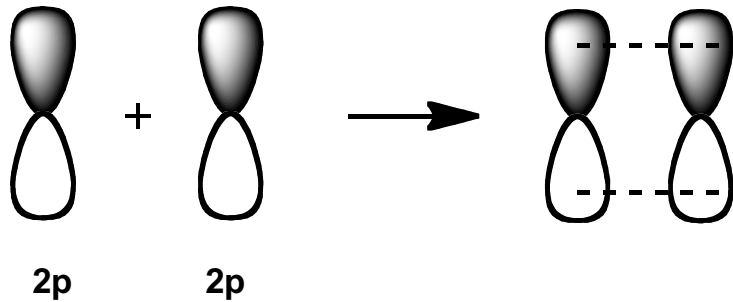


1 x 2p-Orbital



planare Anordnung in sp<sup>2</sup>-hybridisierten C-Atomen:  
Alle 4 (3  $\sigma$ - und 1  $\pi$ -) Bindungen liegen in z/y-Ebene

# Die $\pi$ -Bindung



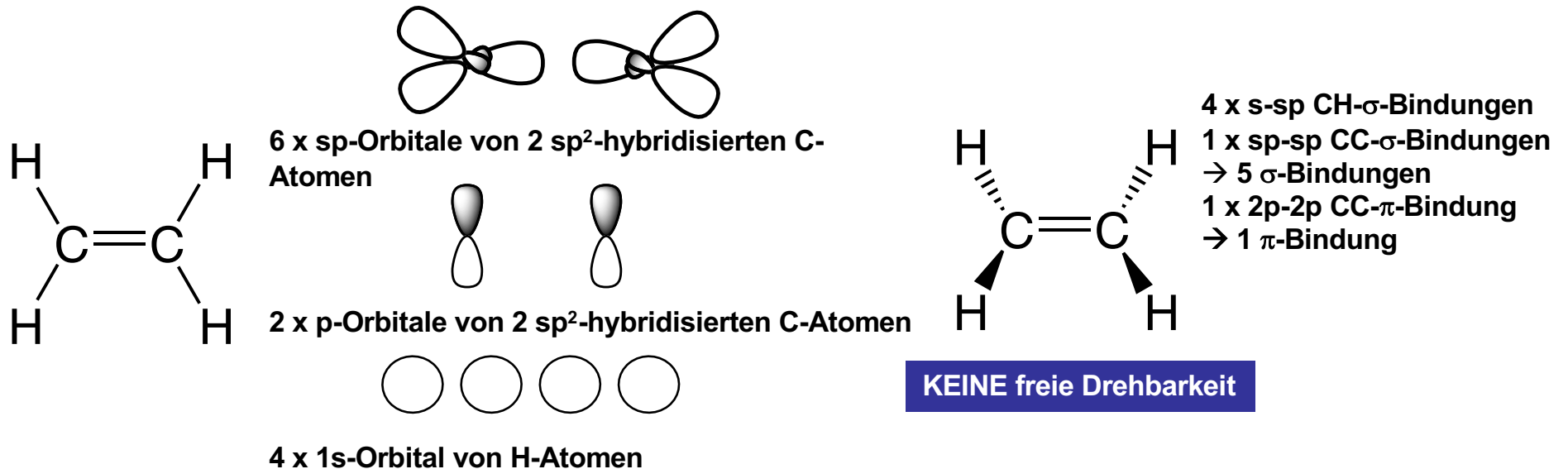
Beispiel: in C-C-Doppelbindung    Darstellung: C=C

→ verbindungen mit Mehrfachbindungen nennt man **ungesättigte Verbindungen**.

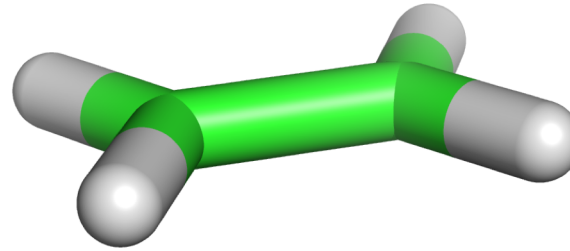
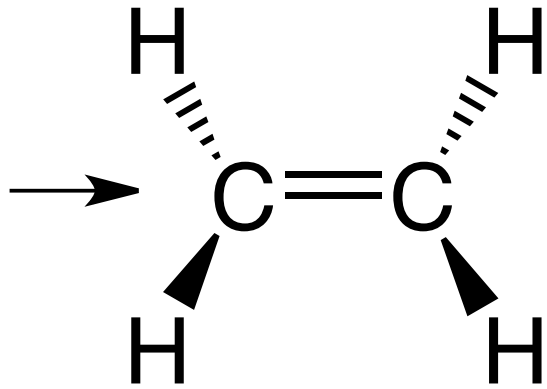
→ wichtige Eigenschaft von  $\pi$ -Bindungen:

Sie sind **NICHT frei rotierbar** entlang der Bindung (aufgrund Vorzeichenwechsel in p-Orbital).

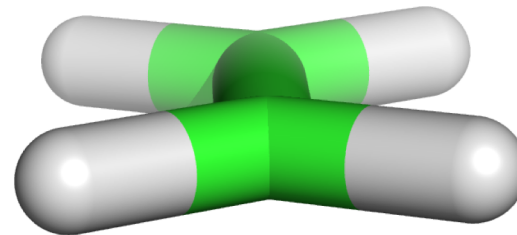
Beispiel: Ethen  $C_2H_4$



# Ethen $C_2H_4$



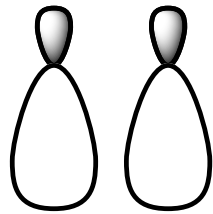
**Seitenansicht**



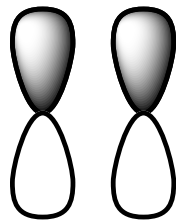
**Frontansicht  
(s. Pfeil)**

# Die sp-Hybridisierung

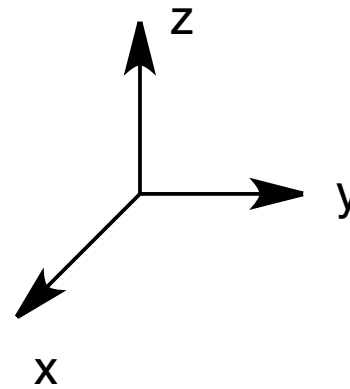
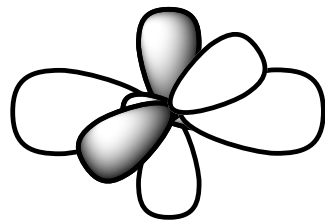
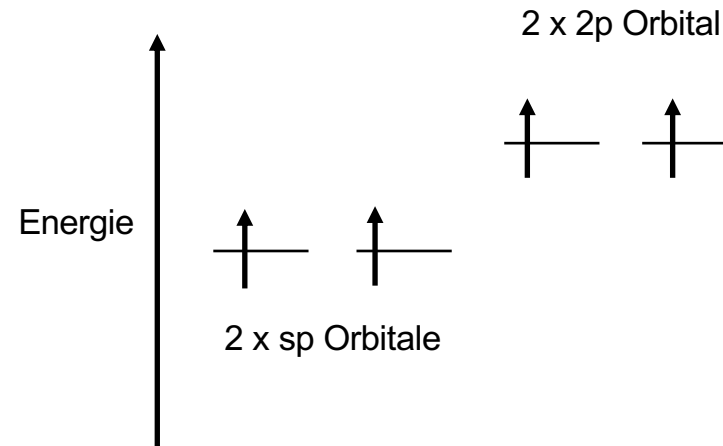
## sp-Hybridisierung



2 x sp-Orbital



2 x 2p-Orbital

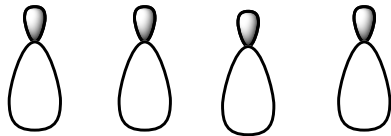


lineare Anordnung in sp-hybridisierten C-Atomen aus 2  $\sigma$ - und 2  $\pi$ -Bindungen

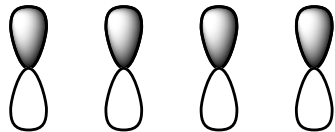
# Die sp-Hybridisierung am Beispiel Ethin C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>



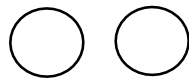
2 x s-sp CH- $\sigma$ -Bindungen  
1 x sp-sp CC- $\sigma$ -Bindungen  
 $\rightarrow$  3  $\sigma$ -Bindungen  
2 x p-p CC- $\pi$ -Bindungen  
 $\rightarrow$  2  $\pi$ -Bindungen



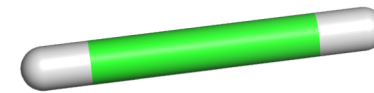
4 x sp-Orbitale von 2 sp-hybridisierten C-Atomen



4 x p-Orbitale von 2 sp-hybridisierten C-Atomen



2 x 1s-Orbital von H-Atomen



Seitenansicht



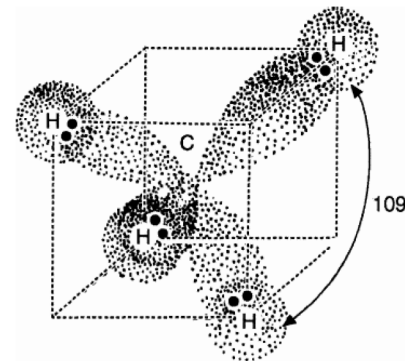
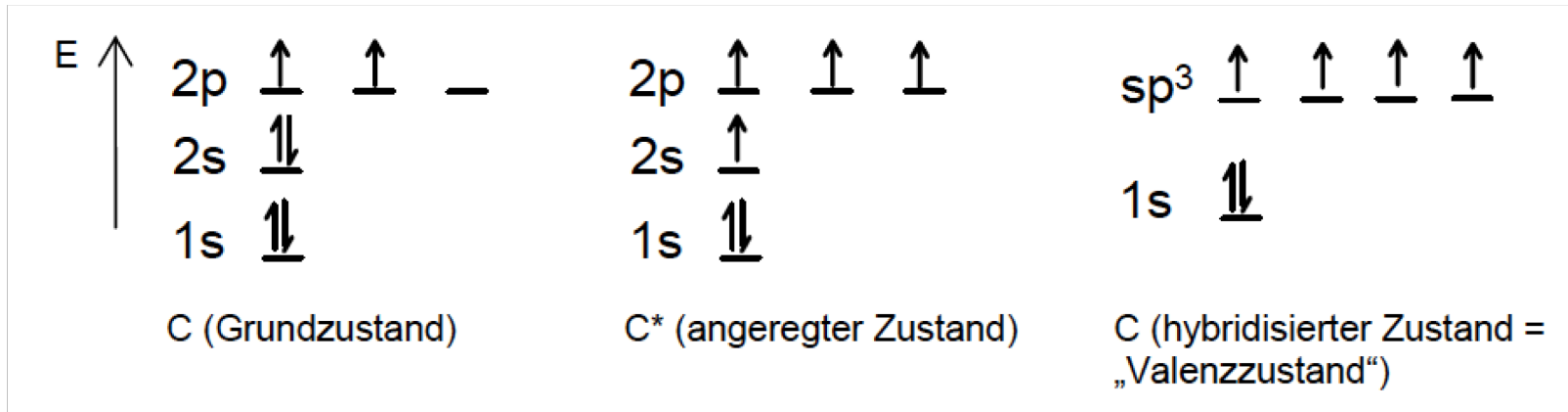
Frontansicht

# Kovalente Bindungen in organischen Verbindungen – $sp^3$

## $sp^3$ -Hybridisierung

aus 2s-Orbital und 3 2p-Orbitalen entstehen 4  $sp^3$ -Orbitale.

→ **gesättigter Kohlenstoff**: bildet rotationssymmetrische  $\sigma$ -Bindung aus – z.B.  $CH_4$ ,  $C_2H_6$ ,  $C_3H_8$



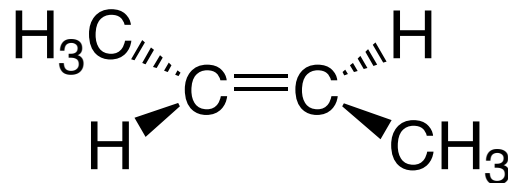
**Abb. 5-17.** VB-Struktur von  $CH_4$ . In dieser und allen weiteren Darstellungen sind die Orbitale vereinfacht gezeichnet

# Kovalente Bindungen in organischen Verbindungen – $sp^2$

## $sp^2$ -Hybridisierung

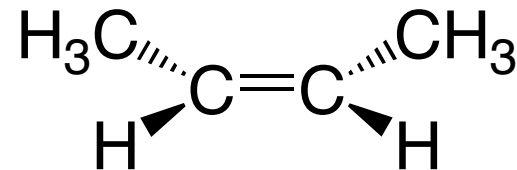
aus 1 x 2s-Orbital und 2 x 2p-Orbitalen entstehen 3  $sp^2$ -Orbitale und ein 2p-Orbital bleibt übrig.

→ **ungesättigter Kohlenstoff**: bildet 3  $\sigma$ -Bindungen und eine  $\pi$ -Bindung, d.h. wir erhalten eine Doppelbindung zu einem Bindungspartner – z.B. Ethen  $C_2H_4$ . Durch die Doppelbindung wird die Rotationsfreiheit um die Mehrfachbindungsachse aufgehoben.



E-But-2-en

*nicht gleich*



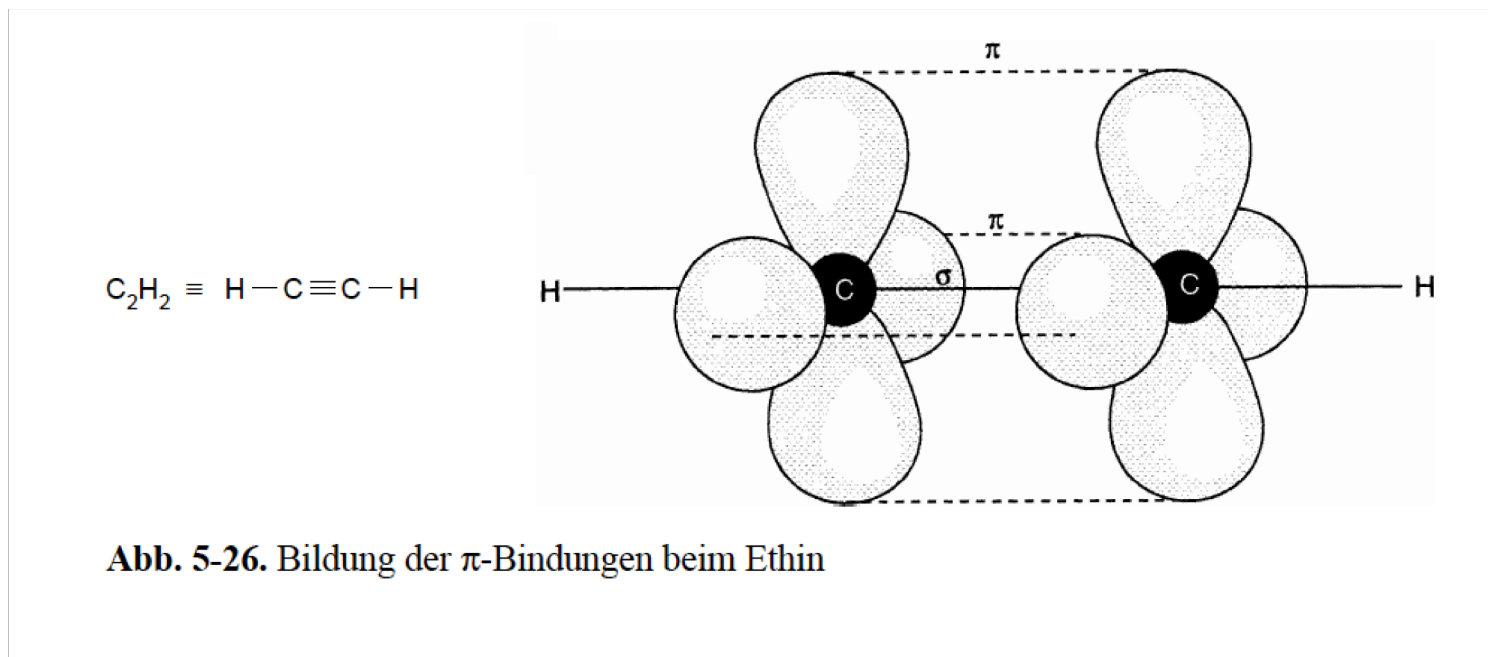
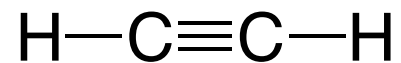
Z-But-2-en

# Kovalente Bindungen in organischen Verbindungen - sp

## sp-Hybridisierung

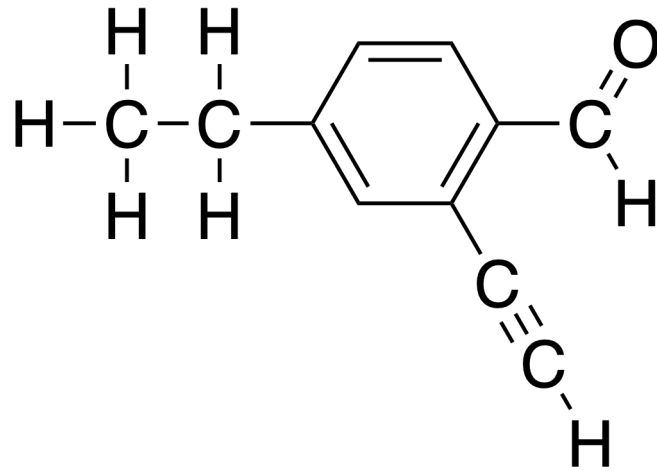
aus 1 x 2s-Orbital und 1 x 2p-Orbital entstehen 2 sp-Orbitale und zwei 2p-Orbitale bleiben übrig.

→ **ungesättigter Kohlenstoff**: bildet 2  $\sigma$ -Bindungen und 2  $\pi$ -Bindung, d.h. wir erhalten eine Dreifachbindung zu einem Bindungspartner – z.B. Ethin  $C_2H_2$ .





Übungsbeispiel: Wie sind die Kohlenstoffe im folgenden Molekül hybridisiert?



# Mesomerie

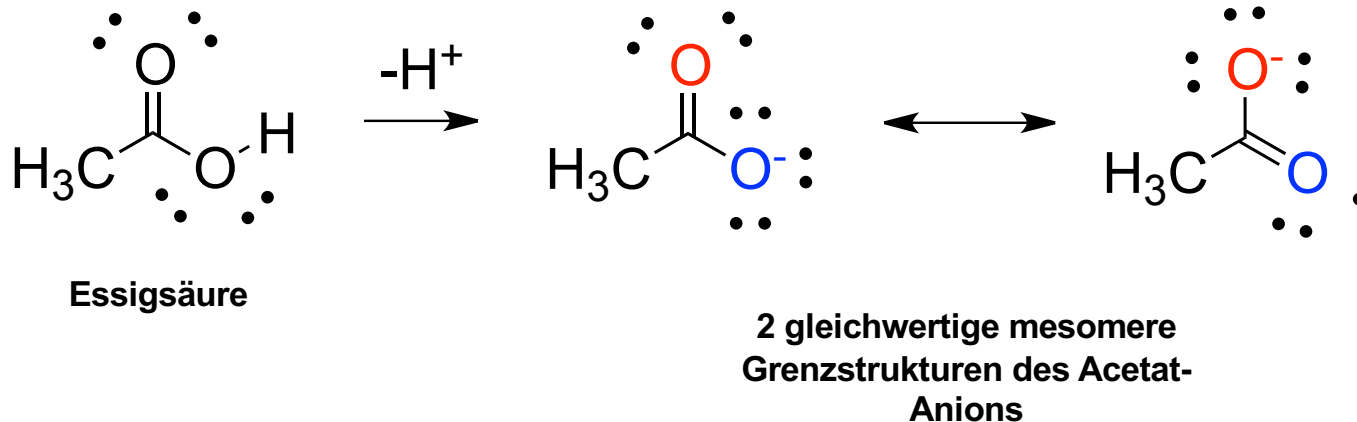
## Bisher:

$sp^3$ ,  $sp^2$  und  $sp$  Hybridisierung  $\rightarrow$  Einfach-, Doppel- und Dreifachbindungen  $\rightarrow$  **kovalente Bindungen**.

## Kovalente Bindungen:

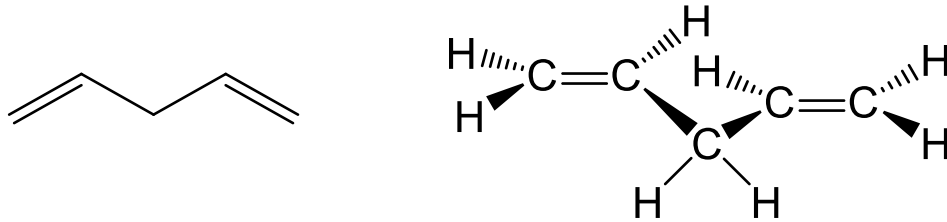
sind Elektronenpaarbindungen (aus *Valenzelektronen*), wobei jeweils ein Elektron von einem der Bindungspartner zur Verfügung gestellt wird (Bindung wird als Strich zwischen Atomen dargestellt)  $\rightarrow$  **Valenzstruktur**.

Bisher konnten wir die Bindungsverhältnisse eines Moleküls durch **EINE** Valenzstruktur angeben. Es gibt aber Fälle bei denen sich **MEHRERE** Valenzstrukturen für ein Molekül (mesomere Grenzstrukturen) formulieren lassen  $\rightarrow$  **MESOMERIE**.

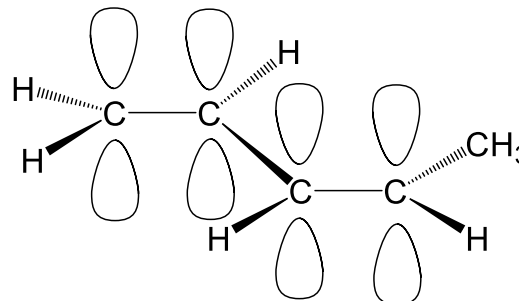
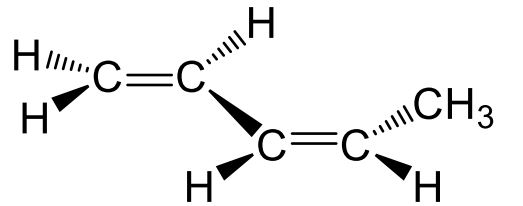


# Moleküle mit mehreren Doppelbindungen

1. **Isolierte Doppelbindungen:** mehr als eine Einfachbindung Abstand



2. **Konjugierte Doppelbindungen:** Doppelbindung durch eine 'Einfachbindung' verbunden



4 x  $sp^2$  hybridisierte C-Atome  
Elektronen sind delokalisiert

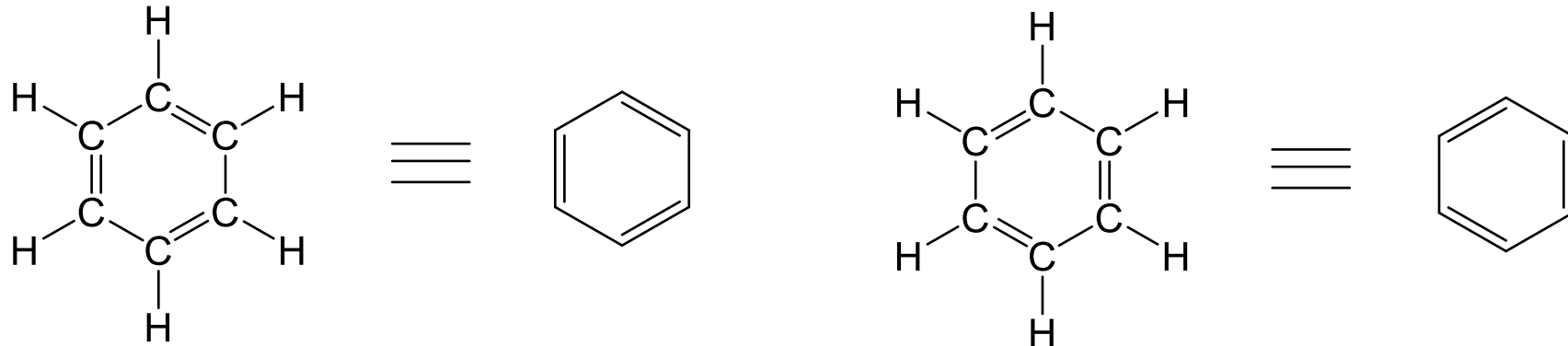
# Aromatizität

## Besonderer Fall:

cyclisch-konjugierte, planare  $\pi$ -Systeme mit  $4n+2$   $\pi$  Elektronen

bekanntester Vertreter: Benzol  $C_6H_6$

hypothetisch 2 Formen möglich – mit unterschiedlichen Bindungslängen (Einfach- und Doppelbindungen)



→ **ABER:**

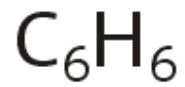
## Experimenteller Befunde:

- ① **Alle Bindungen in Benzol sind gleichwertig und zeigen einen Abstand von 1.39 Å** (vgl.  $r(C-C) = 1.54$  Å und  $r(C=C) = 1.34$  Å).
- ② **Alle C-Atome sind  $sp^2$ -hybridisiert.**
- ③ **Bindungswinkel betragen  $120^\circ$ .**

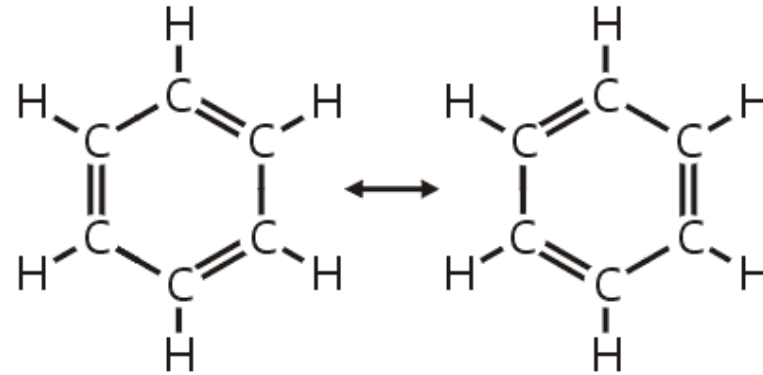
→ **alle zwölf Atome ( $C_6H_6$ ) bilden eine Ebene, die p-Orbitale aller 6  $sp^2$ -hybridisierten C-Atome überlappen und sind somit ober- und unterhalb der Ringebene delokalisiert !**

→ **Benzol zeichnet sich durch eine erhöhte Stabilität aus und ist in Reaktionen träger als Alkene.**

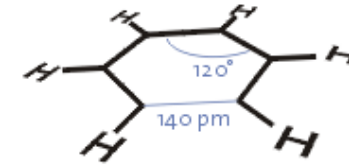
# Benzol



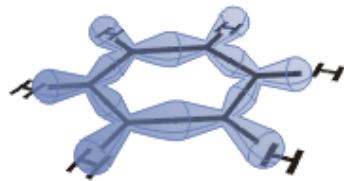
Benzol  
Summenformel



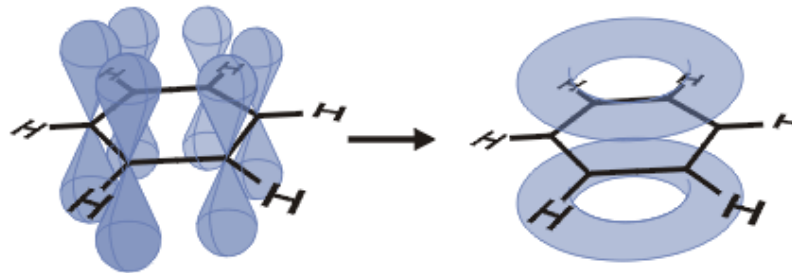
Benzol  
Kekulé-Strukturformel  
(Mesomerie)



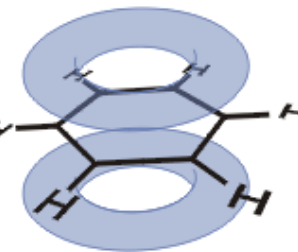
Benzol  
planares Hexagon  
Kantenlänge 140 pm



Benzol  
 $\sigma$ -Bindungen mit hybridisierten  $sp^2$ -Orbitalen



Benzol  
6  $p_z$ -Orbitale



Benzol  
delokalisierte  
 $\pi$ -Orbitalwolke



Benzolring,  
vereinfachte  
Darstellung

# Die Hückel-Regel

**Nach Hückel gilt:**

eine Verbindung ist aromatisch, wenn sie in einem **cyclischen System  $(4n+2)$   $\pi$ -Elektronen** aufweist !

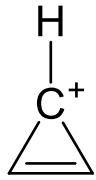
$n = 0$ : 2  $\pi$ -Elektronen

$n = 1$ : 6  $\pi$ -Elektronen

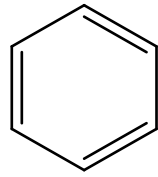
$n = 2$ : 10  $\pi$ -Elektronen

$n = 3$ : 14  $\pi$ -Elektronen

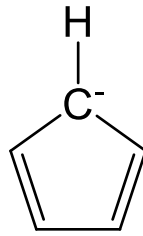
...



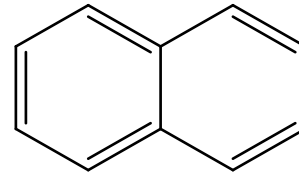
**Cyclopropenyl-  
Kation**



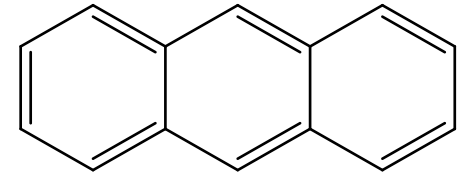
**Benzol**



**Cyclopentadienyl-  
Anion**



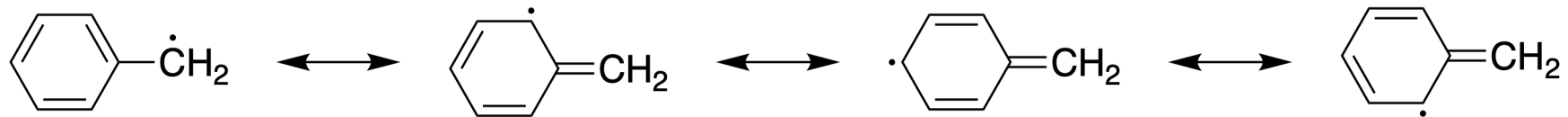
**Naphtalin**



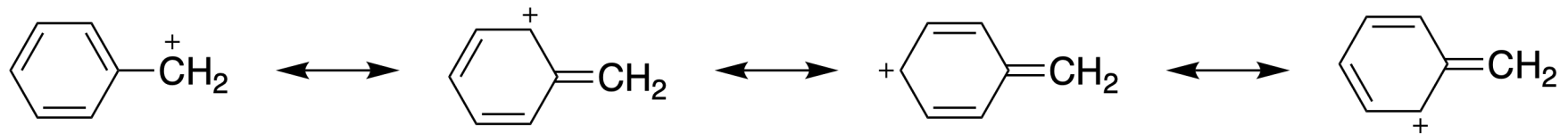
**Anthracen**

# Mesomerie in aromatischen Systemen

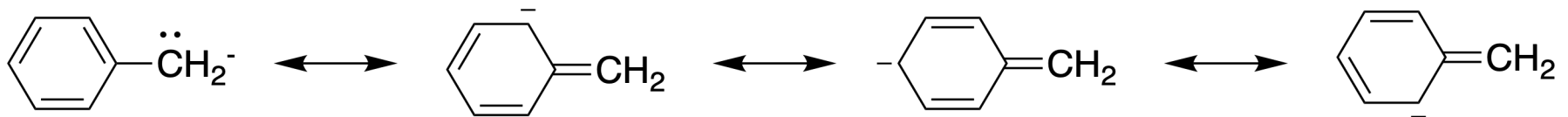
## Das Benzyl-Radikal



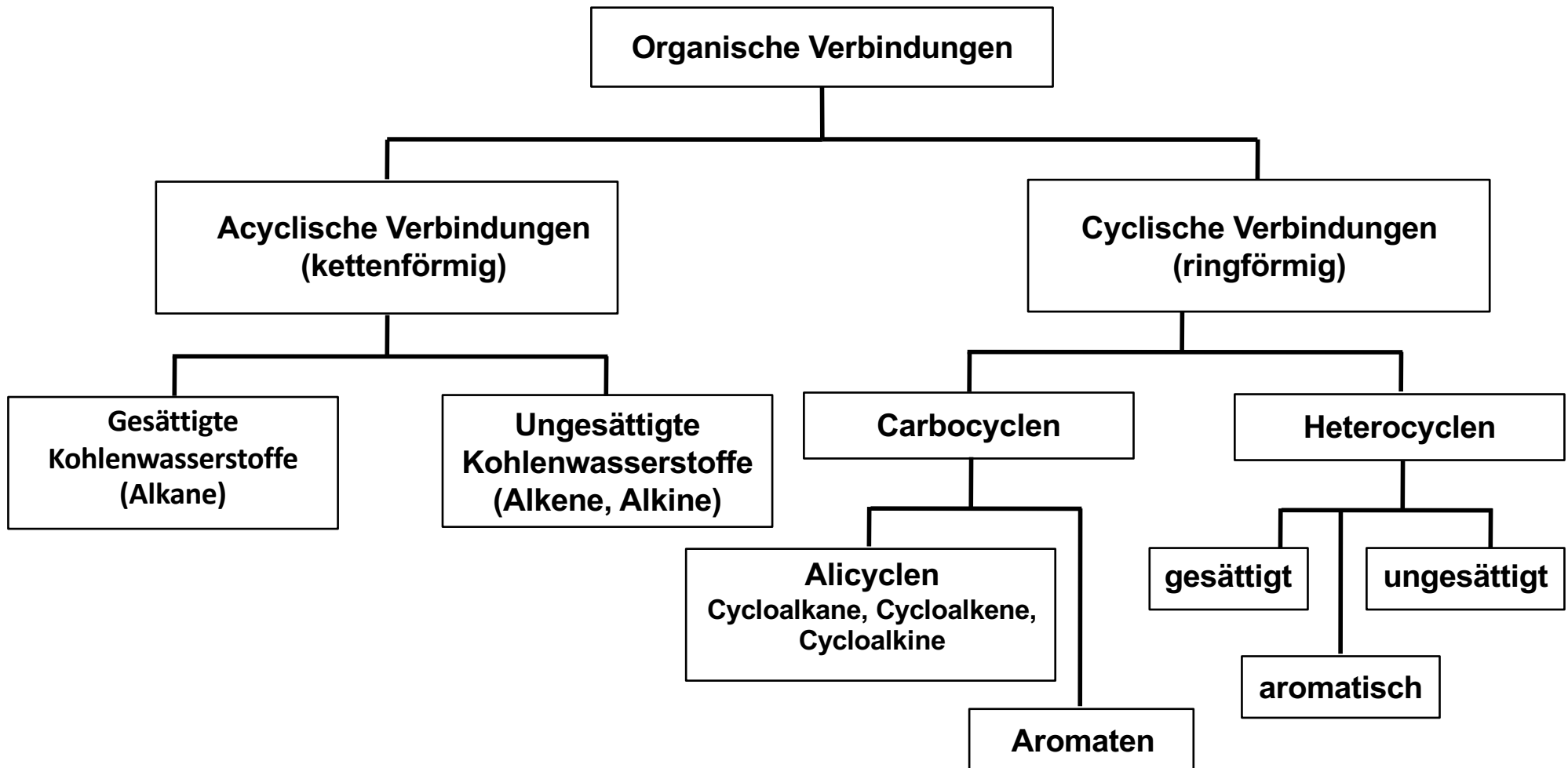
## Das Benzyl-Kation



## Das Benzyl-Anion



# Systematik organischer Verbindungen





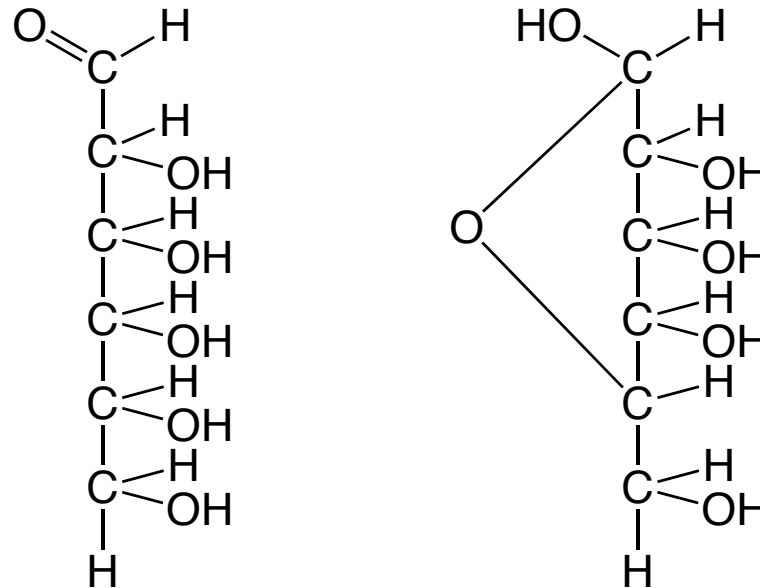
# Chemische Formelsprache 1

Beispiel: **D-Glucose**

$(\text{CH}_2\text{O})_n$  **Verhältnisformel:** gibt kleinstmögliches Verhältnis der Elemente einer organischen Verbindung

$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$  **Summenformel:** Anzahl der einzelnen Elemente in organischer Verbindung

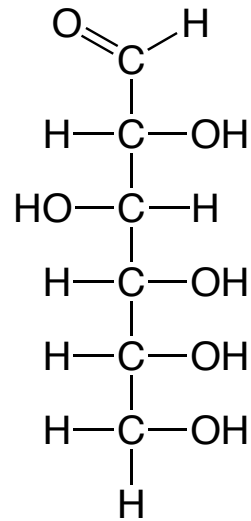
**Konstitutionsformel:** Welche Atome über welche Bindung miteinander verknüpft sind, keine Information über die räumliche Anordnung.



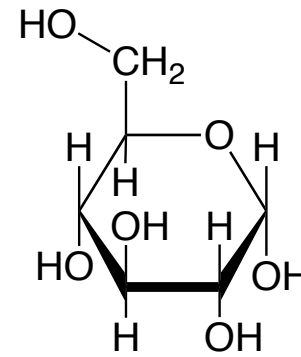
# Chemische Formelsprache 2

Beispiel: **D-Glucose**

**Konfigurationsformel:** Räumliche Anordnung der Atome in einem Molekül mit bekannter Konstitution.

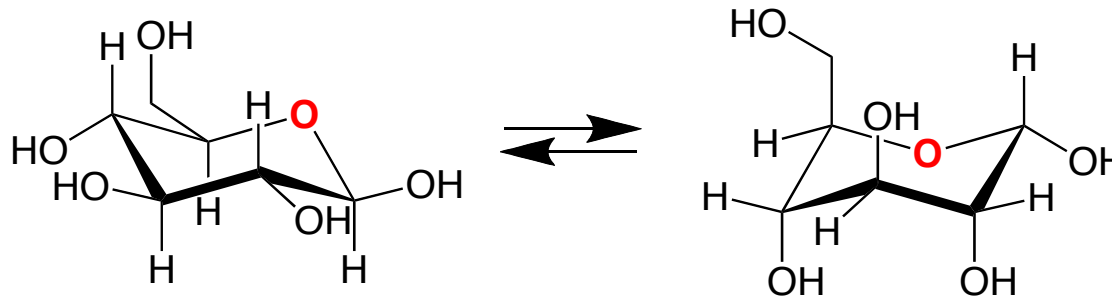


Fischer-Projektion



Haworth-Ringformel

**Konformationsformel:** Räumliche Anordnung der Atome in einem Molekül mit bekannter Konstitution *unter Berücksichtigung von Rotationen um Einfachbindungen.*



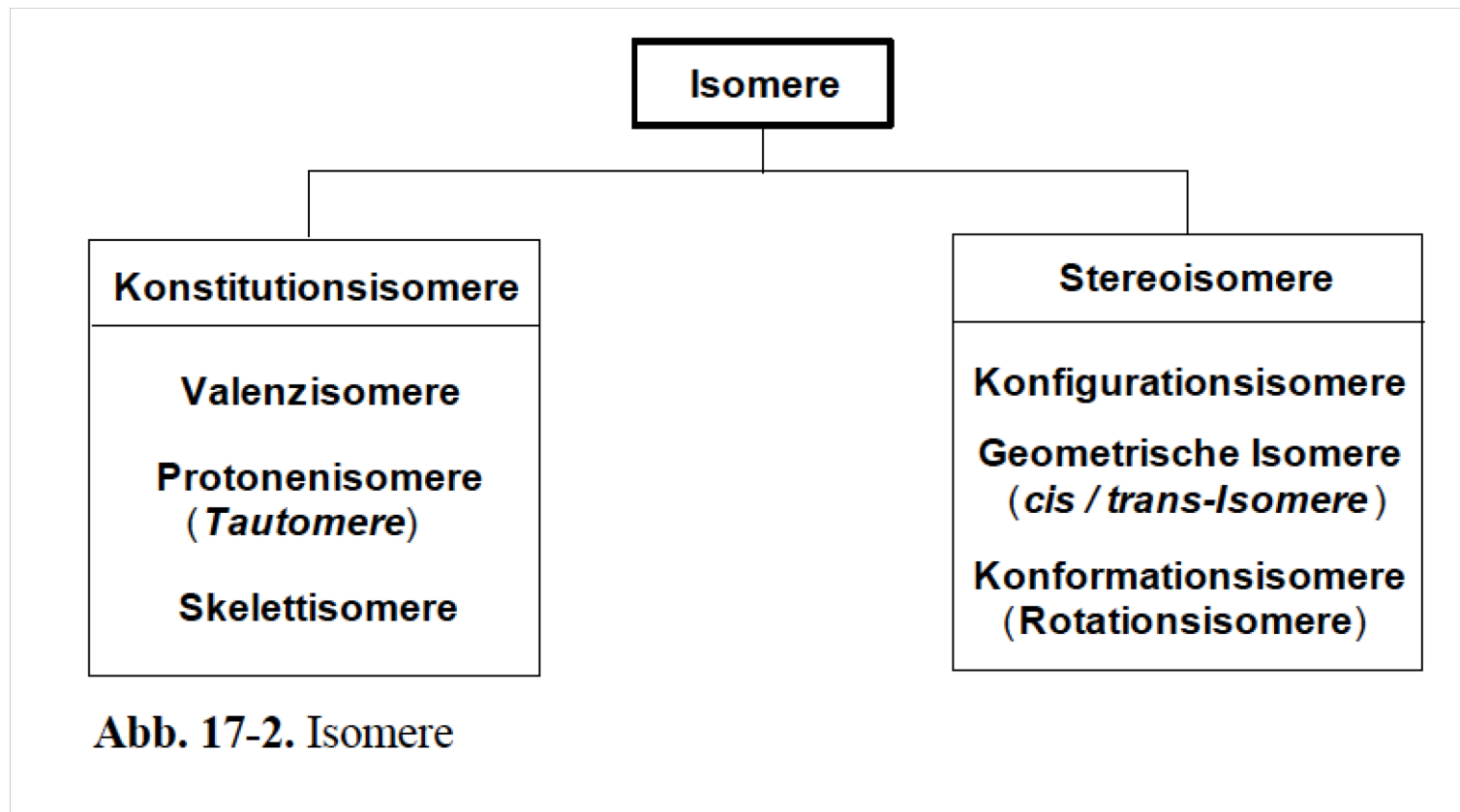
Sessel 1

Sessel 2

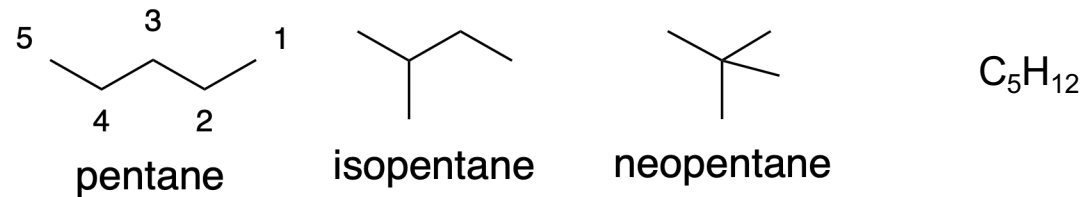
# Isomerie

## Definition:

Als **Isomere** bezeichnet man Moleküle mit gleicher Summenformel, die sich jedoch in der Sequenz der Atome (**Konstitutionsisomere**) oder deren räumlichen Anordnung (**Stereoisomere**) unterscheiden.

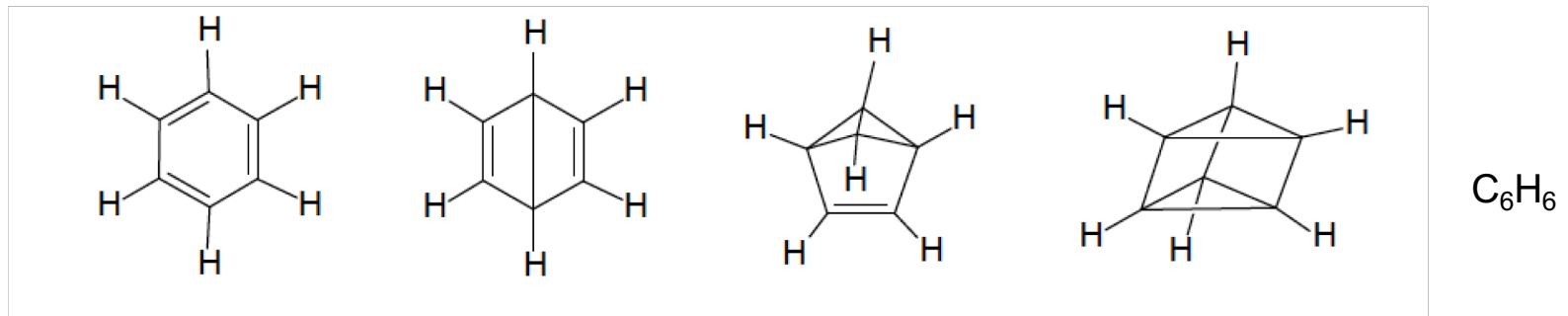


# Skelettisomere



**Skelettisomere:** Unterscheiden sich im Aufbau des Kohlenstoffgerüsts bei gleicher Summenformel

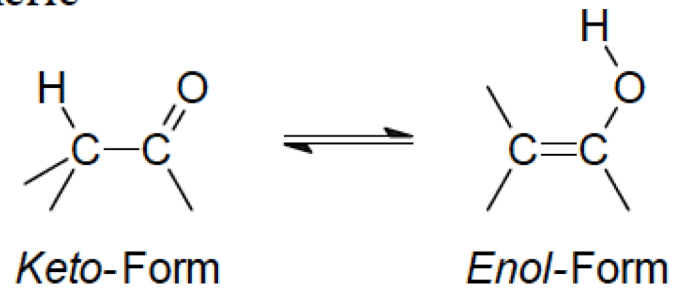
# Valenzisomere



**Valenzisomere:** Unterscheiden sich in der Anzahl der  $\pi$ - und  $\sigma$ -Bindungen bei gleicher Summenformel

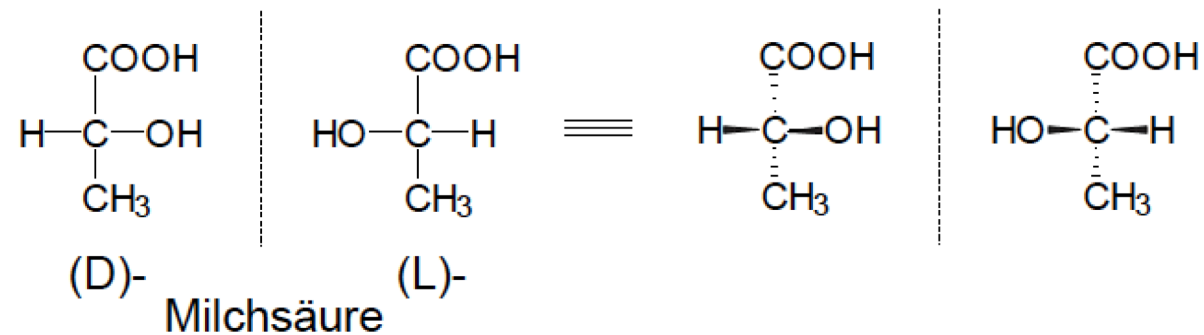
# Protonenisomere (Tautomerie)

**Beispiel:** Keto-Enol-Tautomerie

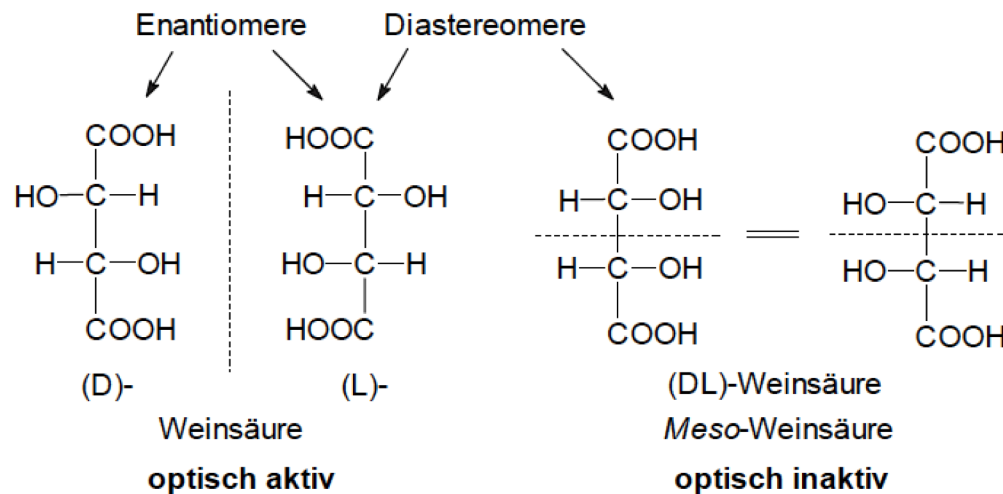


# Konfigurationsisomere

## Beispiel: Milchsäure (Fischer Projektion)

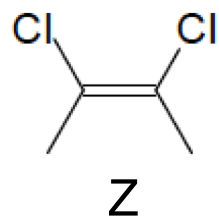


## Beispiel: Weinsäure (2 Zentren $\rightarrow 2^2 = 4$ Stereoisomere)

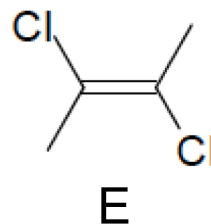


# Geometrische Isomere (E/Z)

## Beispiel: 1,2-Dichlorethen



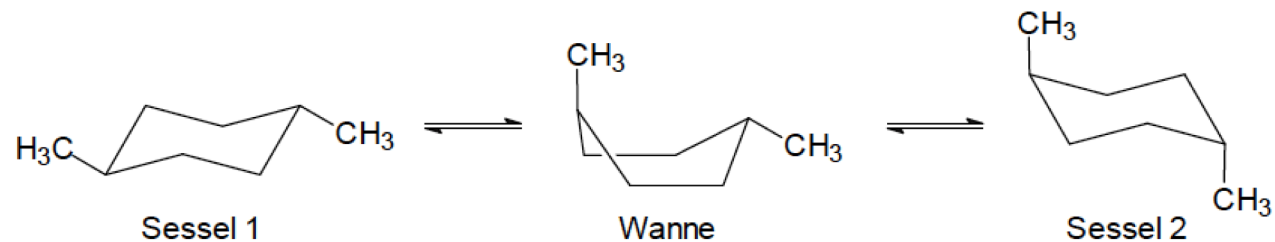
Sdp. 60 °C  
 $\mu = 1.85 \text{ D}$



Sdp. 48 °C  
 $\mu = 0 \text{ D}$

# Konformationsisomere

## Beispiel: 1,4-Dimethylcyclohexan



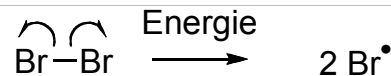
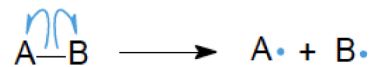
## 2. Grundbegriffe organisch chemischer Reaktionen



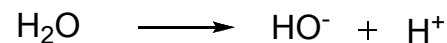
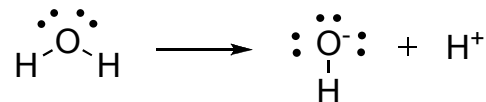
# Reaktionen von Substanzen mit kovalenter Bindung

**Voraussetzung:** Brechen und Neuausbilden von kovalenten Bindungen

1. Bei dieser **homolytischen Spaltung** erhält jedes Atom ein Elektron. Dies wird durch einen „halben Pfeil“ ( $\frown$ ) angedeutet. Es entstehen sehr reaktionsfähige Bruchstücke, die ihre Reaktivität dem ungepaarten Elektron verdanken und die **Radikale** heißen.



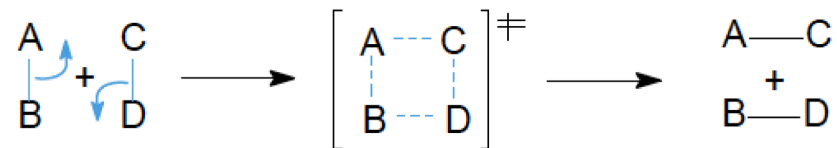
2. Bei der **heterolytischen Spaltung** entstehen ein positives Ion (**Kation**) und ein negatives Ion (**Anion**).  $\text{A}^-$  bzw.  $\text{B}^-$  haben ein freies Elektronenpaar und reagieren als **Nucleophile** („kernsuchende“ Teilchen).  $\text{A}^+$  bzw.  $\text{B}^+$  haben Elektronenmangel und werden **Elektrophile** („elektronensuchend“) genannt. Die heterolytische Spaltung ist ein Grenzfall. Meist treten nämlich keine isolierten (isolierbaren) Ionen auf, sondern die Bindungen sind nur mehr oder weniger stark polarisiert, d.h. die Bindungspartner haben eine mehr oder minder große Partiaalladung.



ein positives Ion = KATION  
ein negatives Ion = ANION

# Reaktionen von Substanzen mit kovalenter Bindung

3. Bei den **elektrocyclischen Reaktionen**, die **intramolekular** (= innerhalb desselben Moleküls) oder **intermolekular** (= zwischen zwei oder mehreren Molekülen) ablaufen können, werden **Bindungen gleichzeitig gespalten** und neu ausgebildet. Man kann sich diese Reaktionen als cyclische Elektronenverlagerungen vorstellen, bei denen gleichzeitig mehrere Bindungen verschoben werden:



# Reaktionen von Substanzen mit kovalenter Bindung

## Zusammenfassung der Begriffe mit Beispielen

**Kation:** positiv geladenes Ion;  $\text{Ion}^+$

**Anion:** negativ geladenes Ion;  $\text{Ion}^-$

**Elektrophil:** Ion oder Molekül mit einer Elektronenlücke (sucht Elektronen), wie Säuren, Kationen, Halogene, z.B.  $\text{H}^+$ ,  $\text{NO}_2^+$ ,  $\text{NO}^+$ ,  $\text{BF}_3$ ,  $\text{AlCl}_3$ ,  $\text{FeCl}_3$ ,  $\text{Br}_2$  (als  $\text{Br}^+$ ), nicht aber  $\text{NH}_4^+$ !

**Nucleophil:** Ion oder Molekül mit Elektronen-, „Überschuss“ (sucht Kern), wie Basen, Anionen, Verbindungen mit mindestens einem freien Elektronenpaar, z.B.  $\text{HO}^-$ ,  $\text{RO}^-$ ,  $\text{RS}^-$ ,  $\text{Hal}^-$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{R}_2\text{O}$ ,  $\text{R}_3\text{N}$ ,  $\text{R}_2\text{S}$ , aber auch Alkene und Aromaten mit ihrem  $\pi$ -Elektronensystem:  $\text{R}_2\text{C}=\text{CR}_2$

**Radikal:** Atom oder Molekül mit einem oder mehreren ungepaarten Elektronen wie  $\text{Cl}\cdot$ ,  $\text{Br}\cdot$ ,  $\text{I}\cdot$ ,  $\text{R}-\dot{\text{O}}$ ,  $\text{O}_2$  (Diradikal).

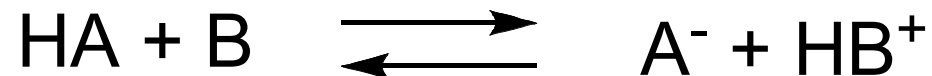
# Säuren und Basen

Definition nach **Brønsted**:

**Eine Säure ist ein Protonen-Donor, eine Base ein Protonen-Akzeptor!**

Die **Tendenz ein Proton abzuspalten (Säure) bzw. aufzunehmen (Base) bezeichnet man als Säure- bzw. Basenstärke.**

Die Säure gibt ein Proton (= H<sup>+</sup>) ab und das Proton wird dann von einer Base aufgenommen, d.h. es handelt sich um eine Protonentransferreaktion. Die Protonenaufnahme bzw. -abgabe sind reversibel → **Säure-Base-Gleichgewicht.**



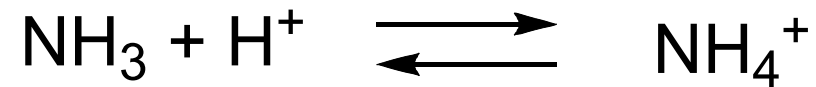
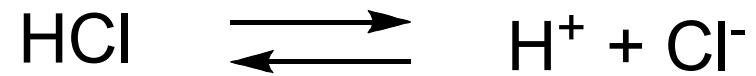
HA	Säure
A <sup>-</sup>	korrespondierende Base zu Säure A
B	Base
HB <sup>+</sup>	korrespondierende Säure zu Base B

**Es gilt:**

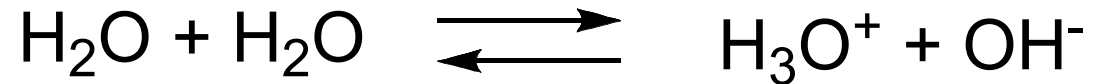
Je stärker eine Säure ist, desto schwächer ist die korrespondierende Base!

zB HCl → starke Säure, Cl<sup>-</sup> → schwache Base

# Säuren und Basen



## *Autoprotolyse des Wassers*



*AMPHOLYTE* sind Verbindungen, die  $\text{H}^+$  sowohl abgeben bzw. aufnehmen können.