

# ÜS 0 - ACOC I → ACOC II

ACOC II ist diejenige OC die die meisten von euch nach ACOC I sehnsüchtig erwarten, nämlich Reaktions-OC. Die Themen in ACOC II sind grundsätzlich zweigeteilt; zuerst machen wir Grundlagen wie reaktive Intermediate und elektronische Substitutionseffekte um dann mit diesen Tools die fünf grundlegenden Reaktionen der OC zu verstehen

- Radikalische Substitution
- Elektrophile Substitution an Aromaten ( $S_E$ -Ar)
- Nukleophile Substitution ( $S_N1$  und  $S_N2$ )
- Elektrophile Addition an  $C=C$  ( $A_E$ )
- Eliminierung (E1, E2 und E1<sub>cB</sub>)

ACOC II ist damit euer erstes Reaktions-OC Fundament, auf welches dann alle kommenden OCs aufbauen werden. Ich kann euch deswegen sehr empfehlen euch ein solides Fundament zu bilden, gerade bei der Herangehensweise an OC-Begründungen.

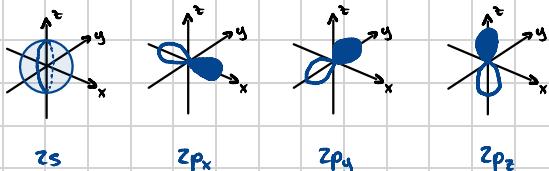
## OC an der ETH

ACOC I	Grundlagen in Nomenklatur, klassischer Strukturlehre, organischer Quantenchemie, Konformationsanalyse, Thermochemie und Kinetik
ACOC II	Reaktive Zwischenprodukte, Elektronische Substitutionseffekte, Elektrophile aromatische Substitution, Nukleophile Substitution, Eliminierung, Elektrophile Addition Carbonylchemie (Prof. Wennemers)
OC I	Moderne Synthesechemie (Prof. Morandi)
OC II	Introduction to Asymmetric Synthesis (Prof. Carreira)
OC III	Physical Organic Chemistry (Prof. Chem)
OC IV	Methods and Strategies in Total Synthesis (Prof. Carreira)
OC V	Selectivity in Organic Chemistry (Prof. Bode)
OC VI	Supramolecular Chemistry (Prof. Yamakoshi)
OC VII	Transition Metal Catalysis (Prof. Morandi)

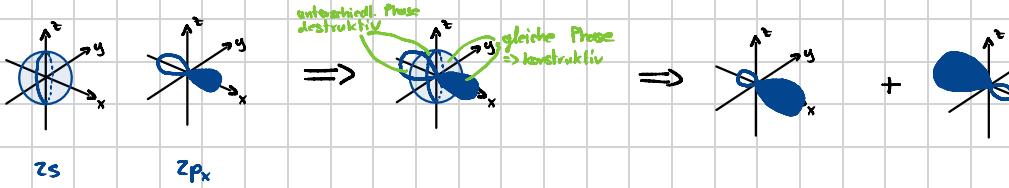
## Hybridisierung

Hybridisierung ist ein sehr gutes Konzept, um Reaktivitäten und Molekülgometrie in OC zu erklären, aber es ist wichtig im Hinterkopf zu behalten, dass es nur ein Modell ist und diese Hybridorbitale nicht existieren. Es funktioniert für OC deswegen so gut, da wir vorrangig Elemente der ersten beiden Perioden betrachten und dort Geometrie und elektronische Struktur entsprechend eingeschränkt sind.

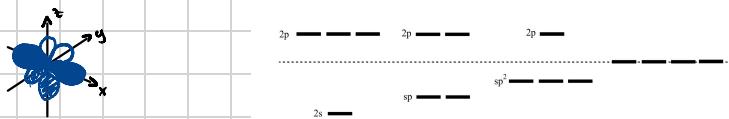
In der 2. Periode haben wir 4 Orbitale:  
(s ist lieber in Energie als p)



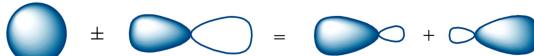
Der Einfachheit halber, wollen wir, dass alle Orbitale dieselbe Energie (entartet) haben.  $\Rightarrow$  "Wir kombinieren jedes p mit  $\frac{1}{3}$  s"



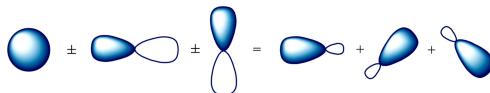
Gesamt:



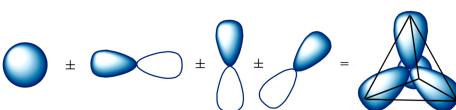
sp



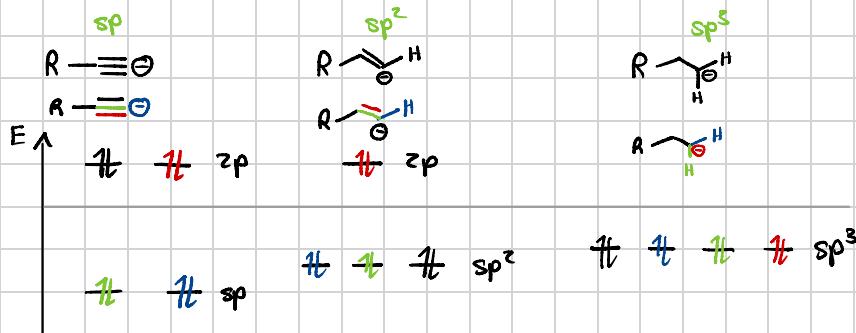
sp<sup>2</sup>



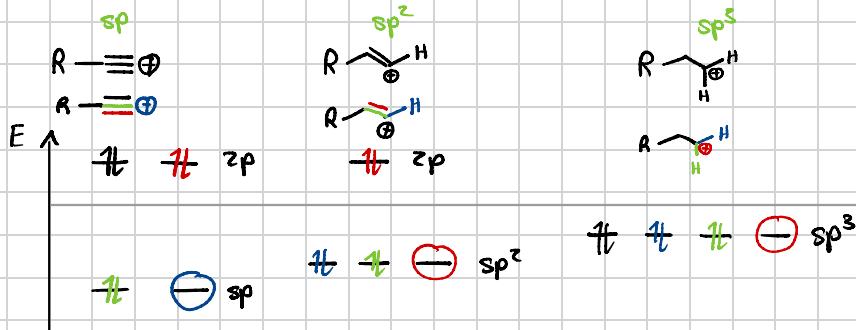
sp<sup>3</sup>



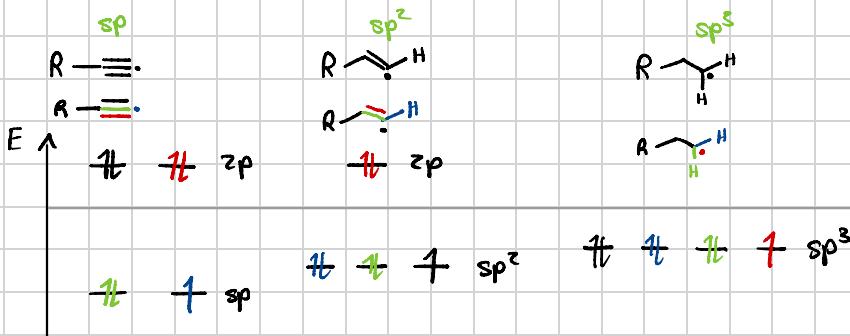
In  $\text{ACOC}_2$  nutzen wir Hybridisierung, um die Stabilität von geladenen Zentren zu beurteilen:



Freies Elektronenpaar soll möglichst tief liegen.



"Wir verschwenden keine tiefliegenden Orbitale!"



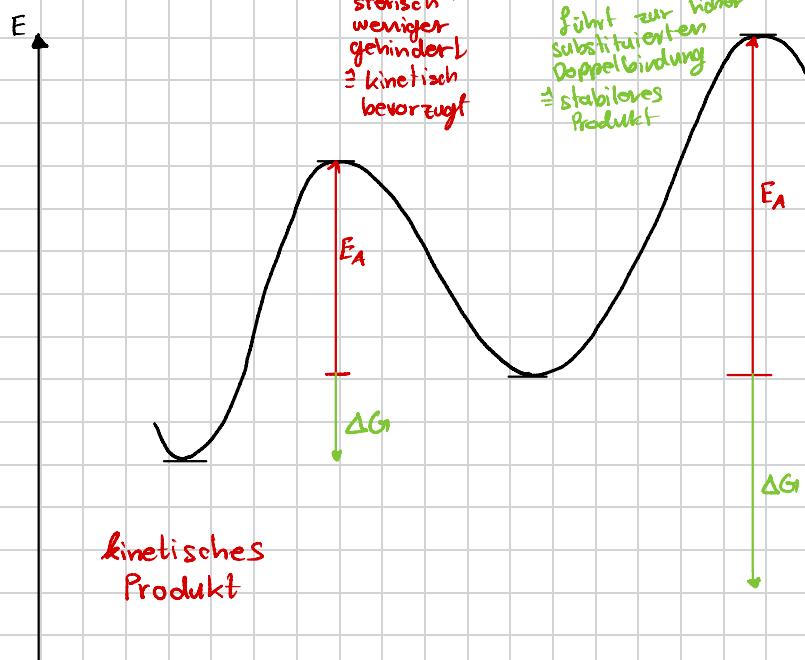
# Thermodynamik vs. Kinetik

Grundsätzlich lassen sich chemische Reaktionen physikalisch über zwei Disziplinen beschreiben, der Thermodynamik (Beschreibung des Gleichgewichtszustands anhand der Stabilität von Reaktanden und Produkten) und der Reaktionskinetik (Beschreibung von Reaktionsgeschwindigkeiten und den Weg in den Gleichgewichtszustand anhand der Stabilität des Übergangszustands).

Thermodynamik: Energieänderung Anfangs- und Endzustand  
Kinetik: Weg zwischen Anfangs- und Endzustand

Beide Konzepte müssen nicht immer konform sein. So kann eine Reaktion grundsätzlich thermodynamisch sehr günstig sein, jedoch kinetisch so gehemmt, dass sie nicht stattfindet.

Bsp.: Enolatbildung:



statisch weniger gehindert  
= kinetisch bevorzugt

führt zur höheren Substitution  
= stabiles Produkt

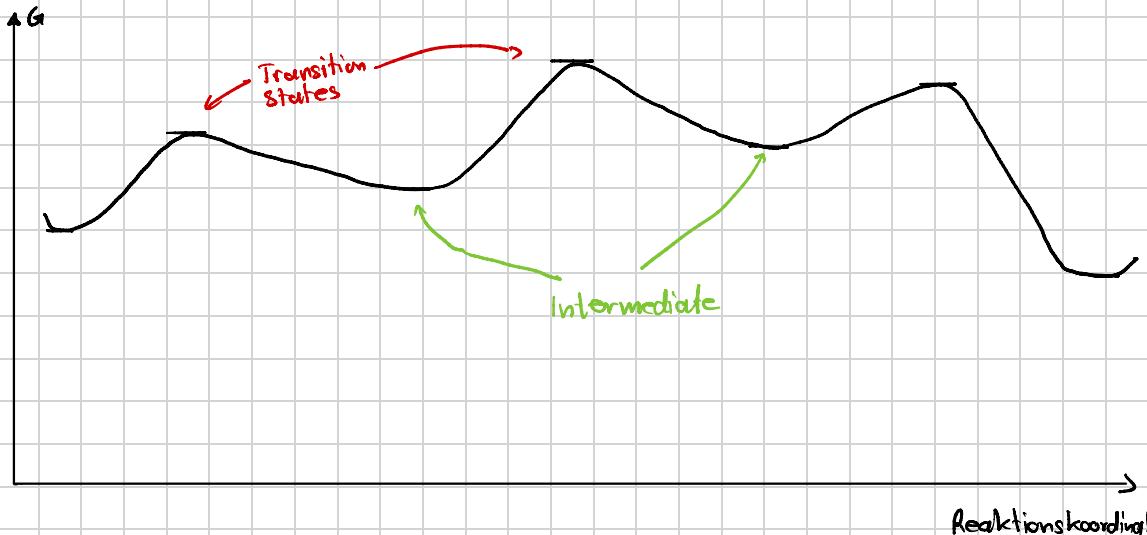
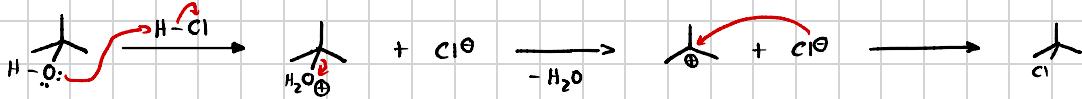
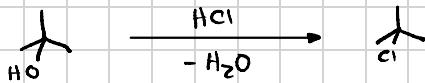
$\Delta G$

$E_A$

$E_1$

## Reaktionsmechanismen

Ein Reaktionsmechanismus ist ein vorgeschlagener Verlauf einer chemischen Reaktion über reaktive Zwischenstufen (Intermediate) und Übergangszuständen (Transition States). Man kann Mechanismen nie vollkommen zweifelsfrei beweisen, aber man kann gute Indizien liefern, indem man die Intermediate mit NMR, EPR etc. nachweist.



Die komplizierten OC-Mechanismen kann man bis zu einem gewissen Grad auch herleiten, da häufig gefragt ist einen sinnvollen Mechanismus vorzuschlagen.

Bsp.: Robinson Annelierung

