

ÜS 0 - ACOC I → ACOC II

ACOC II ist diejenige OC die die meisten von euch nach ACOC I sehenswürdig 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 am Aromaten (S_E -Ar)
- Nucleophile Substitution (S_N1 und S_N2)
- Elektrophile Addition an $C=C$ (A_E)
- Eliminierung ($E1$, $E2$ und $E1_{cb}$)

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.

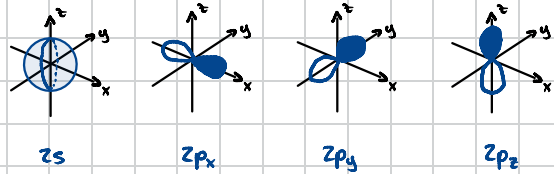
OC an der ETH

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

Hybridisierung

Hybridisierung ist ein sehr gutes Konzept, um Reaktivitäten und Molekülgeometrie 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.

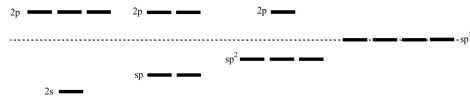
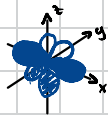
In der 2. Periode haben wir 4 Orbitale: (s ist tiefer in Energie als p)



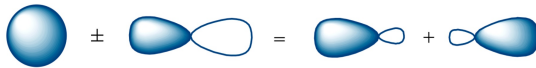
Der Einfachheit halber, wollen wir, dass alle Orbitale dieselbe Energie (entartet) haben. \Rightarrow "Wir kombinieren jedes p mit $\frac{1}{3}s$ "



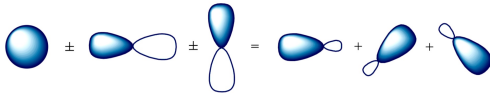
Gesamt:



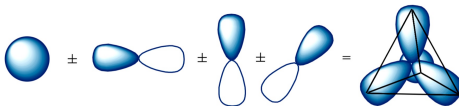
sp



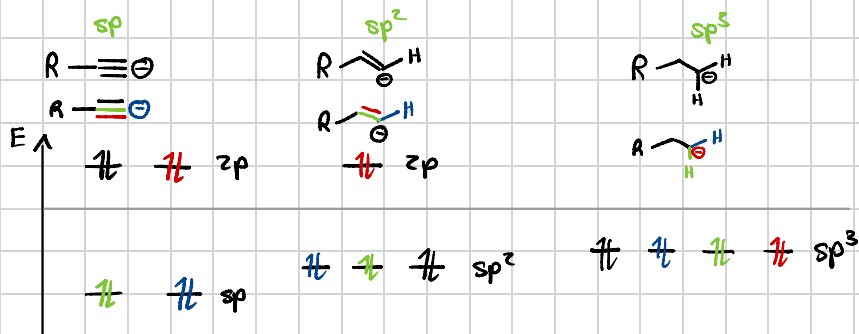
sp^2



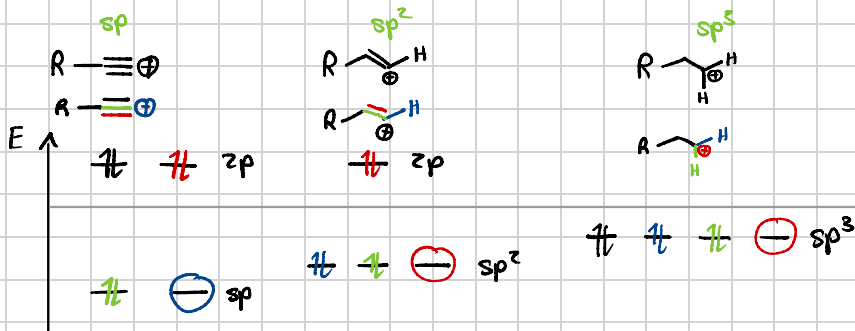
sp^3



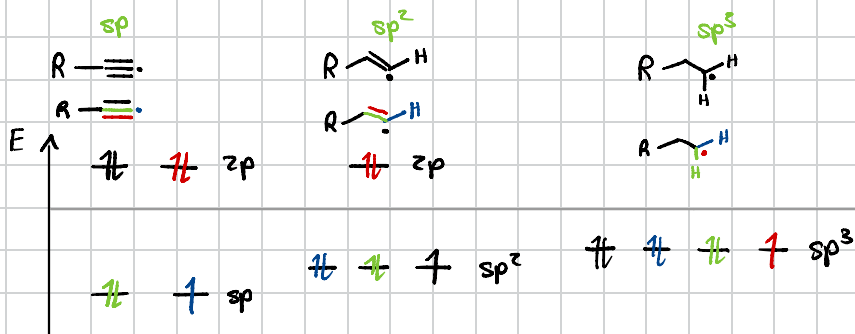
In ACOC II nutzen wir Hybridisierung, um die Stabilität von geladenen Zentren zu beurteilen:



Freies Elektronenpaar soll möglichst tief liegen.



"Wir verschwenden keine tiefliegenden Orbitale!"



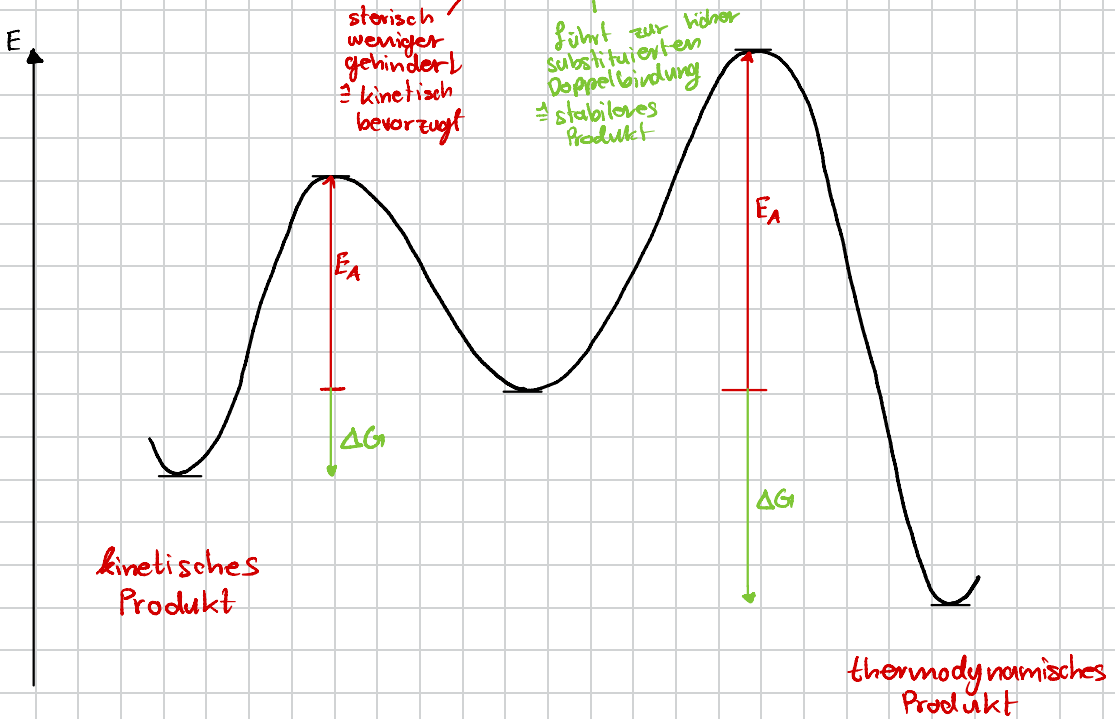
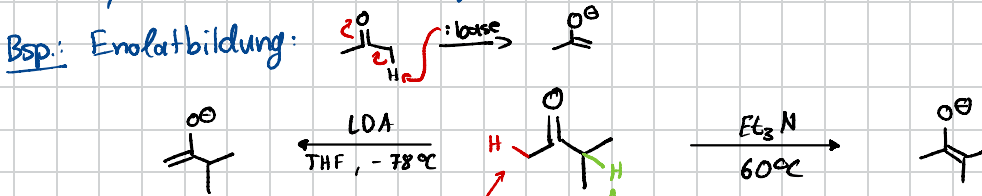
Thermodynamik vs. Kinetik

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

Thermodynamik: Energieänderung Anfangs- und Endzustand

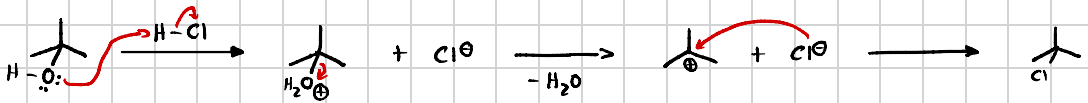
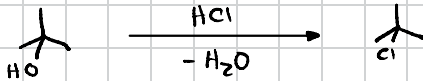
Kinetik: Weg zwischen Anfangs- und Endzustand

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



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

Bsp.: Robinson Annelierung

