Auf einen Blick

Über den Autor ................................................................................................................. 7

Einführung ......................................................................................................................... 21

Teil I: Volle Kraft voraus: Die Chemie des Kohlenstoffs ................................................. 27
Kapitel 1: Die wundervolle Welt der organischen Chemie ............................................. 29
Kapitel 2: Sezieren von Atomen: Atombau und Bindung .............................................. 37
Kapitel 3: Bilder sagen mehr als Worte: Strukturzeichnungen ..................................... 57
Kapitel 4: Säuren und Basen ......................................................................................... 79
Kapitel 5: Reaktive Zentren: Funktionelle Gruppen ...................................................... 89
Kapitel 6: Durchblick in 3D: Stereochemie .................................................................. 105

Teil II: Kohlenwasserstoffe ............................................................................................ 121
Kapitel 7: Die Urväter der organischen Moleküle: Alkane ........................................... 123
Kapitel 8: Hilfe, ich sehe doppelt: Alkene .................................................................... 149
Kapitel 9: Alkene: Die Kohlenstoff-Kohlenstoff-Dreifachbindung ............................. 175

Teil III: Funktionelle Gruppen ....................................................................................... 183
Kapitel 10: Ersetzen und Entfernen: Substitutions- und Eliminierungsreaktionen ....... 185
Kapitel 11: Berauschend: Alkohole .............................................................................. 201
Kapitel 12: Seite an Seite: Konjugierte Alkene und die Diels-Alder-Reaktion ............ 209
Kapitel 13: Die Herrn der Ringe: Aromatische Verbindungen ..................................... 219

Teil IV: Spektroskopie und Strukturbestimmung .......................................................... 247
Kapitel 14: Massenspektrometrie .................................................................................. 249
Kapitel 15: IR-Spektroskopie ......................................................................................... 265
Kapitel 16: NMR-Spektroskopie: Halten Sie sich fest, jetzt geht's rund! ................... 275
Kapitel 17: Indizienbeweise: Strukturbestimmung mit NMR ...................................... 295

Teil V: Der Top-Ten-Teil ............................................................................................... 313
Kapitel 18: Zehn Websites für weites Lernen ............................................................... 315
Kapitel 19: Zehn umwerfende Entdeckungen der Organik .......................................... 319
Auf einen Blick

Teil VI: Anhänge ................................................................. 325
A: Mehrstufige Synthesen .................................................. 327
B: Reaktionsmechanismen erarbeiten .............................. 333
C: Lösungen der Übungsaufgaben ...................................... 341
Glossar .............................................................................. 357
Stichwortverzeichnis ......................................................... 365
Inhaltsverzeichnis

Über den Autor .............................................................................................................. 7

Einführung ...................................................................................................................... 21
Über dieses Buch ............................................................................................................. 22
Konventionen in diesem Buch .................................................................................... 23
Törichte Annahmen über den Leser ........................................................................... 23
Wie dieses Buch aufgebaut ist .................................................................................... 24
   Teil I: Es war einmal: Chemie des Kohlenstoffs ..................................................... 24
   Teil II: Kohlenwasserstoffe ...................................................................................... 24
   Teil III: Funktionelle Gruppen ................................................................................ 25
   Teil IV: Spektroskopie und Strukturbestimmung .................................................... 25
   Teil V: Der Top-Ten-Teil ....................................................................................... 25
   Teil VI: Anhänge ........................................................................................................ 25
Symbole, die in diesem Buch verwendet werden ......................................................... 26
Wie es weitergeht .......................................................................................................... 26

TEIL I
VOLLE KRAFT VORAUS: DIE CHEMIE DES KOHLENSTOFFS ........................................ 27

Kapitel 1
Die wundervolle Welt der organischen Chemie .......................................................... 29
   Sei willkommen, Du schöne organische Chemie ..................................................... 29
   Was genau sind eigentlich organische Moleküle? ................................................... 31
   Namen sind Schall und Rauch ................................................................................ 32
   Synthese-Chemiker ................................................................................................. 33
   Bioorganiker .......................................................................................................... 33
   Naturstoff-Chemiker ............................................................................................... 34
   Physiko-Organiker ................................................................................................. 34
   Organometall-Chemiker ....................................................................................... 35
   Computer-Chemiker ............................................................................................... 35
   Materialchemiker .................................................................................................... 35

Kapitel 2
Sezieren von Atomen: Atombau und Bindung ........................................................... 37
   Elektronen unter Hausarrest: Schalen und Orbitale .............................................. 38
   Im Wohnzimmer der Elektronen: Orbitale ............................................................. 38
   Bedienungsanleitung für Elektronen: Elektronenkonfiguration .............................. 41
   Drum prüfe, wer sich ewig bindet: Hochzeit der Elektronen ................................... 42
<table>
<thead>
<tr>
<th>Kapitel 3</th>
<th>Bilder sagen mehr als Worte: Strukturzeichnungen</th>
<th>57</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>Lasst Bilder sprechen: Lewis-Formeln</td>
<td>59</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Formalladungen</td>
<td>59</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Strukturformeln</td>
<td>61</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Atome kompakt: Kurzformeln</td>
<td>61</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Strukturerstenografie: Skelettformeln</td>
<td>62</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Umwandeln von Lewis-Formeln in Skelettformeln</td>
<td>63</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Die Zahl von Wasserstoffatomen in Skelettformeln bestimmen</td>
<td>65</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Mutterseelenallein: Freie Elektronenpaare</td>
<td>66</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Waffenarsenal: Pfeile in der Organik</td>
<td>66</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Dr. Jekyll und Mr. Hyde: Resonanzstrukturen</td>
<td>68</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Regeln für Resonanzstrukturen</td>
<td>69</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Die Qual der Wahl: Resonanzstrukturen zeichnen</td>
<td>70</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Schwindelerregend: Zeichnen von mehr als zwei Resonanzstrukturen</td>
<td>73</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Die Gewichtung von Resonanzstrukturen</td>
<td>74</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Aufgepasst: Häufige Fehler beim Zeichnen von Resonanzstrukturen</td>
<td>76</td>
<td></td>
</tr>
</tbody>
</table>

<table>
<thead>
<tr>
<th>Kapitel 4</th>
<th>Säuren und Basen</th>
<th>79</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>Definitionssache: Säuren und Basen</td>
<td>79</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Jetzt wird es nass: Säuren und Basen nach Arrhenius</td>
<td>80</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Schrei nach Protonen: Säuren und Basen nach Brønsted</td>
<td>80</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Elektronenliebhaber und -hasser: Säuren und Basen nach Lewis</td>
<td>81</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Vergleich der Säurestärke organischer Moleküle</td>
<td>83</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Der Einfluss der Atome</td>
<td>83</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Der Einfluss der Hybridisierung</td>
<td>84</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Der Einfluss der Elektronegativität</td>
<td>85</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Der Einfluss von Resonanzeffekten</td>
<td>86</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Die Definition des ( pK_a )-Werts: Eine quantitative Skala der Säurestärke</td>
<td>86</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Die Lage von Säure-Base-Gleichgewichten</td>
<td>87</td>
<td></td>
</tr>
</tbody>
</table>

<table>
<thead>
<tr>
<th>Kapitel 5</th>
<th>Reaktive Zentren: Funktionelle Gruppen</th>
<th>89</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>Kohlenwasserstoffe</td>
<td>90</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Doppelter Spaß: Die Alkane</td>
<td>90</td>
<td></td>
</tr>
</tbody>
</table>
14 Inhaltsverzeichnis

Wenn es mehr als einen gibt ................................................................. 127
Die Benennung komplexer Substituenten .............................................. 128
Einen Namen in eine Struktur umwandeln .............................................. 131
Zeichnen von Isomeren aus der Summenformel ........................................ 132
Schritt 1 ........................................................................................................ 132
Schritt 2 ........................................................................................................ 132
Schritt 3 ........................................................................................................ 133
Schritt 4 ........................................................................................................ 134
Schritt 5 ........................................................................................................ 134
Die Konformation geradkettiger Alkane .................................................. 135
Konformationsanalyse und Newman-Projektion ........................................ 136
Konformationen des Butans ................................................................. 138
Jetzt geht's rund: Cycloalkane .............................................................. 139
Stereochemie der Cycloalkane .............................................................. 139
Konformationen des Cyclohexans ......................................................... 140
Zeichnen der stabilsten Sessel-Konformation ........................................... 143
Reagierende Alkane: Halogenierung ......................................................... 144
Los geht's: Die Startreaktion ................................................................... 144
Wenn es läuft, läuft es: Kettenfortpflanzung ........................................... 145
... und raus bist Du: Kettenabbruch ......................................................... 145
Selektivität der Chlorierung und der Bromierung ....................................... 147

Kapitel 8
Hilfe, ich sehe doppelt: Alkene .............................................................. 149
Die Definition der Alkene ........................................................................ 149
Das Doppelbindungsäquivalent .............................................................. 150
Bestimmung des Doppelbindungsäquivalents aus einer Struktur ............. 152
Die Bestimmung des Doppelbindungsäquivalents aus einer Summenformel ......................................................................................... 153
Nomen est omen: Die Nomenklatur der Alkene ........................................ 153
Die Nummerierung der Stammkette ......................................................... 154
Benennung multiplier Doppelbindungen .................................................. 155
Trivialnamen von Alkenen ....................................................................... 155
Stereochemie der Alkene .......................................................................... 156
Gleiches oder anderes Ufer? cis und trans-Stereochemie .......................... 156
Ein doppeltes Spiel: E/Z-Stereochemie ...................................................... 156
Die Stabilität der Alkene .......................................................................... 158
Substitution bei Alkenen ......................................................................... 158
Die Stabilität von cis- und trans-Isomeren ................................................ 159
Darstellung der Alkene ........................................................................... 160
Eliminierung von Säure: Dehydrohalogenierung ..................................... 160
Wasserlassen: Dehydratisierung von Alkoholen ....................................... 160
Die Wittig-Reaktion .................................................................................. 161
Die Reaktionen der Alkene ...................................................................... 162
Die Addition von Halogenwasserstoff an Doppelbindungen ...................... 162
Ich bin positiv: Carbokationen ............................................................... 164
Anlagerung von Wasser an eine Doppelbindung ....................................... 167
Kapitel 9
Alkine: Die Kohlenstoff-Kohlenstoff-Dreifachbindung .......................... 175
   Wie soll es denn heißen? Das Alkin bekommt einen Namen .................. 175
   Die Orbitale der Alkine ........................................................................... 176
   Cyclische Alkine ....................................................................................... 177
   Darstellung der Alkine .............................................................................. 177
       Ballast abwerfen: Dehydrohalogenierung .......................................... 177
       Alkine verkuppeln: Chemie der Acetylide ........................................... 178
       Bromierung von Alkinen: Doppeltes Vergnügen .................................... 178
       Sättigung von Alkinen durch Wasserstoff .......................................... 179
       Addition eines Wasserstoffmoleküls an Alkine .................................... 179
       Oxymercurierung von Alkinen ............................................................... 180
       Die Hydroborierung von Alkinen ........................................................... 181

TEIL III
FUNKTIONELLE GRUPPEN ........................................................................... 183
Kapitel 10
Ersetzen und Entfernen: Substitutions- und Eliminierungsreaktionen .......... 185
   Partnertausch: Substitutionsreaktionen .................................................... 185
   Substitution zweiter Ordnung: $S_n$-Mechanismus .................................... 186
       Wie schnell? Die Reaktionsgeschwindigkeit einer $S_n$-Reaktion ............... 187
       Der Einfluss des Substrats auf eine $S_n$-Reaktion ................................... 188
       Die Rolle des Nucleophils in der $S_n$-Reaktion ...................................... 189
       $S_n$ in 3D: Stereochemie ......................................................................... 190
       Lösungsmittelwirkung auf $S_n$-Reaktionen ........................................... 191
       Ich will hier raus: Die Abgangsgruppe .................................................. 191
   Substitution erster Ordnung: Die $S_1$-Reaktion ........................................ 192
       Wie schnell? Die Geschwindigkeit einer $S_1$-Reaktion ............................ 193
       Gute $S_1$-Substrate erkennen ................................................................. 194
       Lösungsmittelwirkung auf $S_1$-Reaktionen ........................................... 194
       Stereochemie einer $S_1$-Reaktion .......................................................... 195
       Weitere Fakten über $S_1$-Reaktionen .................................................... 196
   Nur der Härteste überlebt: Eliminierungen ............................................. 196
       Eliminierungen zweiter Ordnung: Der E2-Mechanismus .......................... 197
       Eliminierungen erster Ordnung: Der E1-Mechanismus ............................ 197
       Hilfe! Substitution und Eliminierung unterscheiden .............................. 198
Kapitel 11
Berauschend: Alkohole ................................................. 201
  Klassifizierung der Alkohole ........................................ 201
  Sage mir, wie Du heißt, dann sage ich Dir, wer Du bist: Alkohole
  benennen ........................................................................ 202
  Darstellung von Alkoholen ............................................. 203
    Anlagerung von Wasser an Doppelbindungen ............... 203
    Reduktion von Carbonylverbindungen ....................... 204
    Die Grignard-Reaktion ............................................. 205
  Reaktionen der Alkohole ........................................... 207
    Abspaltung von Wasser: Dehydratation ...................... 207
    Darstellung von Ethern: Williamson-Ethersynthese ........ 207
    Die Oxidation von Alkoholen .................................... 207

Kapitel 12
Seite an Seite: Konjugierte Alkene und die
Diels-Alder-Reaktion .................................................. 209
  Manche mögen Abwechslung: Konjugierte Doppelbindungen 209
  Addition von Halogenwasserstoffsäuren an konjugierte Alkene 210
    Das Energieprofil einer Addition an konjugierte Alkene .... 211
    Kinetik und Thermodynamik der Addition an konjugierte
    Doppelbindungen: ein Vergleich .................................. 212
  Die Diels-Alder-Reaktion ........................................... 213
    Diene und Dienophile erkennen .................................. 213
    Stereochemie der Addition ........................................ 214
    Einmal im Kreis, zweimal im Kreis: Bicyclen ................ 214
  Übung: Produkte einer Diels-Alder-Reaktion bestimmen ........ 215

Kapitel 13
Die Herrn der Ringe: Aromatische Verbindungen .......... 219
  Was sind aromatische Verbindungen? ............................. 220
    Die Struktur von Benzol ......................................... 220
    Die Vielfalt aromatischer Verbindungen ..................... 221
    Aber was macht ein Molekül aromatisch? ..................... 222
    Die Hückel’sche (4n + 2)-Regel ................................ 222
  Aromatizität: Molekülorbital-Theorie ......................... 223
    Was zum Teufel ist die Molekülorbital-Theorie? ............ 223
    MO-Diagramme aufstellen ....................................... 223
    Der Frost-Kreis .................................................... 224
    Das MO-Diagramm von Benzol ................................... 224
    Molekülorbitale anschaulich ..................................... 225
    Das MO-Diagramm von Cyclobutadien ........................ 227
  Aromatizität entdecken .......................................... 227
  Säure- und Basenstärke ........................................... 230
    Vergleich der Säurestärken .................................... 231
    Vergleich der Basenstärke ..................................... 232
Benennung der Benzole und Aromaten ........................................ 232
Trivialnamen substituierter Benzole (Arene) .............................. 233
Die Namen häufiger Heteroaromaten ........................................ 234

Holt die Kanonen raus: Elektrophile aromatische Substitution des Benzols ..................................................... 234
Einführung von Alkylgruppen: Die Friedel-Crafts-Alkylierung ...... 235
Abkehr vom Bösen: Friedel-Crafts-Acylierung ............................ 236
Die Reduktion von Nitrogruppen ................................................... 237
Die Oxidation von Alkylenbenzolen ............................................. 237

Nimm zwei: Synthese disubstituierter Benzole ............................. 238
Elektronendonoren: ortho-para-dirigierend .................................. 239
Elektronenziehende Gruppen: meta-dirigierend ................................. 240

Die Synthese substituierter Benzole ............................................. 242
Synthese an Seitenkette oder Ring ............................................... 243
Nucleophiler Angriff! Die nucleophile aromatische Substitution .... 244

TEIL IV
SPEKTROSKOPIE UND STRUKTURBESTIMMUNG .................. 247

Kapitel 14
Massenspektrometrie ................................................................. 249
Die Definition der Massenspektrometrie ................................. 250
Ein Massenspektrometer zerlegen ............................................. 250
Der Einlass ............................................................................. 250
Elektronionisation: Der Zertrümmerer ........................................ 250
Der Sortierer und die Waage ..................................................... 251
Detektor und Spektrum ............................................................. 252
Das Massenspektrum ................................................................. 253
Die Empfindlichkeit der Massenspektrometrie ......................... 254
Geht's noch genauer? Die Auflösung .......................................... 254
Massenveränderung: Isotope ..................................................... 255
Die Stickstoff-Regel ................................................................. 256
Erkennen häufiger Fragmentierungsmuster .................................. 257
Alkane zertrümmern ................................................................. 257
Bruch neben einem Heteroatom: α-Spaltung .............................. 258
Wasserverlust: Alkohole ............................................................. 259
Umlagerung bei Carbonylen: McLafferty-Umlagerung ................ 259
Spaltung an Benzolringen und Doppelbindungen ...................... 260
Übung: Ran an den Speck ......................................................... 261
Zündende Ideen ........................................................................ 262

Kapitel 15
IR-Spektroskopie ................................................................. 265
Gymnastik für Bindungen: Infrarotabsorption ......................... 266
Das Hookesche Gesetz in Molekülen .............................................. 266
Molekülsschwingungen und Lichtabsorption ............................ 267
Absorptionsintensitäten ................................................................. 268
IR-inaktive Schwingungen ................................. 268
Ein IR-Spektrum verstehen ................................ 268
Wiedersehen macht Freude: Funktionelle Gruppen identifizieren .......... 269
Butter bei die Fische: Ein echtes Spektrum ...................... 270
Funktionelle Gruppen erkennen ................................ 271
Was links von C–H möglich ist ............................... 271
Groß und breit: Alkohole........................................ 271
Amine ............................................................... 271
Was rechts von C–H möglich ist .............................. 272
Groß und stark: Carbonylgruppen ......................... 272
Alkene, Alkine und Aromaten .............................. 273

Kapitel 16
NMR-Spektroskopie: Halten Sie sich fest, jetzt geht’s rund! ........... 275
Warum NMR? ...................................................... 275
Wie NMR funktioniert ......................................... 276
Riesenmagneten und Moleküle: Theorie der NMR ............ 277
Ziehen Sie sich warm an: Abschirmung durch Elektronen .... 279
Das NMR-Spektrum .............................................. 280
Chemische Verschiebung ........................................ 280
Gleich und gleich gesellt sich gern: Symmetrie
und chemische Äquivalenz .................................... 281
Gebrauchsanleitung für ein NMR-Spektrum: Die Bestandteile .... 282
Die chemische Verschiebung .................................... 283
Einbeziehung der Integration .................................... 285
Kopplung .......................................................... 286
Kohlenstoff-NMR ...................................................... 291
Das Puzzle zusammensetzen .................................... 293

Kapitel 17
Indizienbeweise: Strukturbestimmung mit NMR ....................... 295
Folgen Sie den Hinweisen ....................................... 296
Schritt 1: Bestimmen Sie das Doppelbindungsäquivalent ....... 296
Schritt 2: Bestimmen Sie die funktionellen Gruppen
aus dem IR-Spektrum .......................................... 297
Schritt 3: Vermessen Sie die Integrationskurve ................. 297
Schritt 4: Weisen Sie den NMR-Peaks Fragmenten zu ....... 299
Schritt 5: Kombinieren Sie die Fragmente so, dass die Struktur mit dem
Doppelbindungsäquivalent übereinstimmt ...................... 300
Schritt 6: Kontrollieren Sie Ihre Struktur ....................... 301
Aufgaben lösen .................................................... 302
Beispiel 1: Eine Strukturaufklärung aus der Summenformel
und dem NMR-Spektrum ....................................... 302
Beispiel 2: Eine Strukturaufklärung aus der Summenformel, dem IR-
und dem NMR-Spektrum ....................................... 307