



ACOC I Übungsstunde: Aromatizität und Recap Orbitale

Dominik Götz

13.11.2023



Outline

1. Organisatorisches

2. Theorie

Aromatisch, Antiaromatisch und Nichtaromatisch
Säure und Basen Stärke

3. Nachbesprechung Serie 7

Recap: Orbitale
Hybridisierung
Hybridisierung

4. Tipps Serie 8

5. Feedback

6. Mental Health

Outline

1. Organisatorisches

2. Theorie

Aromatisch, Antiaromatisch und Nichtaromatisch
Säure und Basen Stärke

3. Nachbesprechung Serie 7

Recap: Orbitale
Hybridisierung
Hybridisierung

4. Tipps Serie 8

5. Feedback

6. Mental Health

Organisatorisches

- Wenn ihr Serien zusammen macht, könnt ihr sie auch gerne zusammen abgeben. Also schreibt einfach Eure Namen in den Titel der Abgabe. Dass muss ich es nur einmal Korrigieren und ihr bekommt alle die gleiche Korrektur.

Outline

1. Organisatorisches

2. Theorie

Aromatisch, Antiaromatisch und Nichtaromatisch
Säure und Basen Stärke

3. Nachbesprechung Serie 7

Recap: Orbitale
Hybridisierung
Hybridisierung

4. Tipps Serie 8

5. Feedback

6. Mental Health

Definitionen

Aromatizität hat drei Kriterien die alle erfüllt sein müssen:

- Zyklisch konjugiert: der Ring muss an jedem Atom, durch den ihr das aromatische System legt ein p-Orbital haben, das Parallel zum restlichen System ist
- Hückel-Regel: Es braucht $4n+2 \pi$ -Elektronen. n ist eine beliebige natürliche Zahl (also 1,2,3,...)
- Planarität: Das Molekül muss planar sein, so dass alle P Orbitale zueinander parallel sein können.

Antiaromatisch:

- Zyklisch konjugiert
- planar
- Nicht erfüllte Hückel-Regel: also $4n \pi$ -Elektronen.

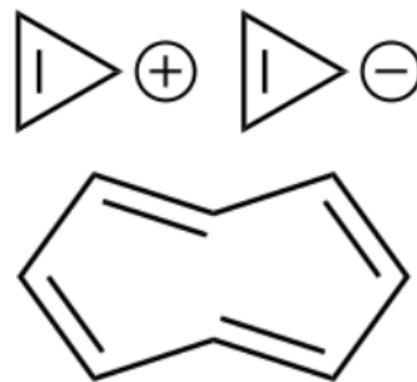
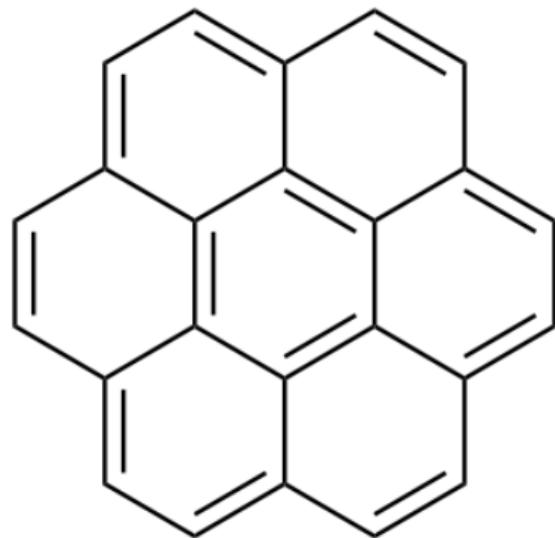
Nicharomatisch:

- alles was weder aromatisch noch antiaromatisch ist.
- also z.B. sind nicht planare Moleküle zyklisch konjugierte Systeme immer sofort nicht aromatisch.
- es macht **keinen** Sinn, diese Begriffe für lineare Moleküle zu verwenden, also please don't :)

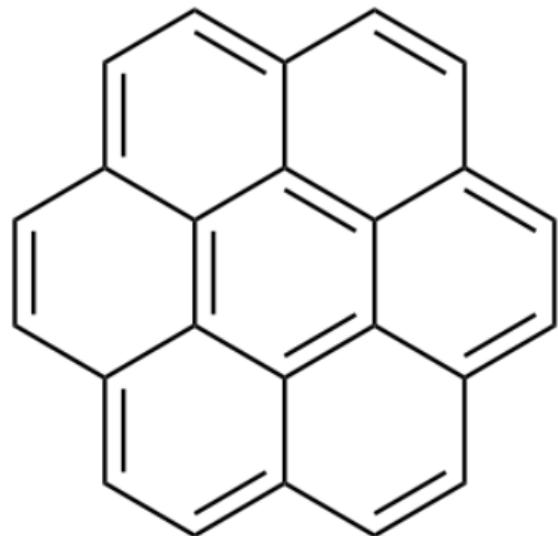
Warum ist es wichtig?

Weil aromatisch zu sein sehr stabil für ein Molekül ist. Das heisst wenn wir später reaktionen haben und durch das abspalten eines Wasserstoffs zum aromaten werden, wird das wahrscheinlich passieren. Also kann Aromatizität eine Treibkraft für Reaktionen sein. Antiaromatisch ist das gegenteil, es ist ei sehr ungünstiger zustand und das Molekül will diesen alos vermeiden. Wenn ein Molekül antiaromatisch ist, und es sich drehen kann so das es nicht mehr planar ist, wird es das machen, damit es nicht mehr diesen ungünstigen Zustand der Antiaromatizität hat.

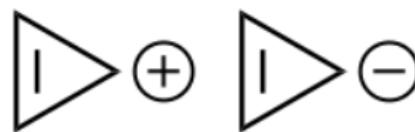
Beispiele zu Aromaten



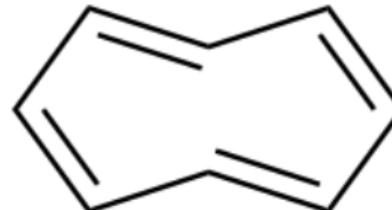
Beispiele zu Aromaten



Hat 18 π -Elektronen im äusseren Ring. Ist also aromatisch im weiteren Sinn. Diese formale Einteilung sagt nicht über die physikalische aus



aromatisch, nichtaromatisch



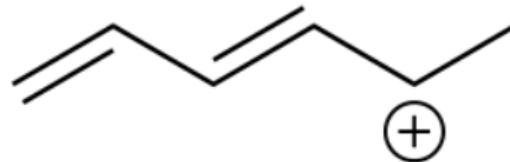
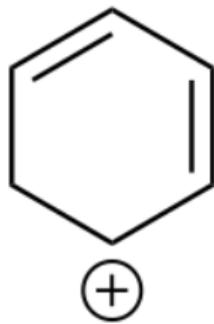
nichtaromatisch

Säure und Basen Stärke

Base: Eine Base ist umso stärker, desto besser das Kation, was danach entsteht stabilisiert ist. Säure: Eine Säure ist umso stärker, desto besser das Anion stabilisiert ist. Kriterien für Ionen Stabilität:

- Anzahl CH_n Bindungspartner: Kationen sind stabiler auf tertiären C. Anionen sind stabiler auf primären C
- Konjugation: eine Ladung ist immer stabiler, wenn sie kojugiert werden kann
- Hybridisierung: Anionen sind stabiler auf sp als auf sp^2 und sp^3 , da dann negative Ladung näher am Kern(positiv) ist. Kation gibt es eigentlich nur für sp^2 .
- Entsteht ein Aromat, ist das natürlich sehr günstig :)

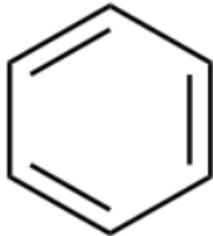
Beispiele, Säure Base Stärke



Was ist die besser Säure?

Beispiele, Säure Base Stärke

Nach Protonierung ist das linke ein Aromat, gut!



Outline

1. Organisatorisches

2. Theorie

Aromatisch, Antiaromatisch und Nichtaromatisch
Säure und Basen Stärke

3. Nachbesprechung Serie 7

Recap: Orbitale
Hybridisierung
Hybridisierung

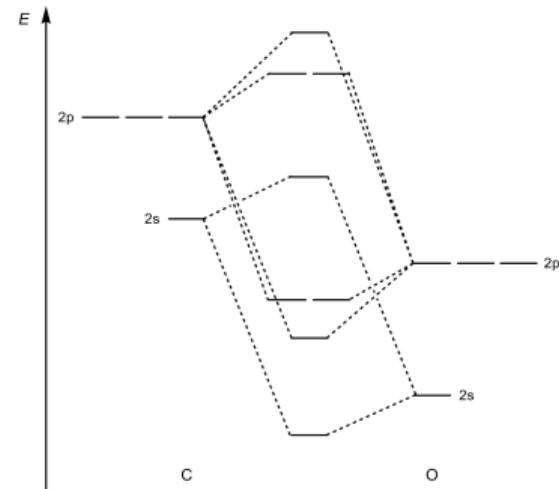
4. Tipps Serie 8

5. Feedback

6. Mental Health

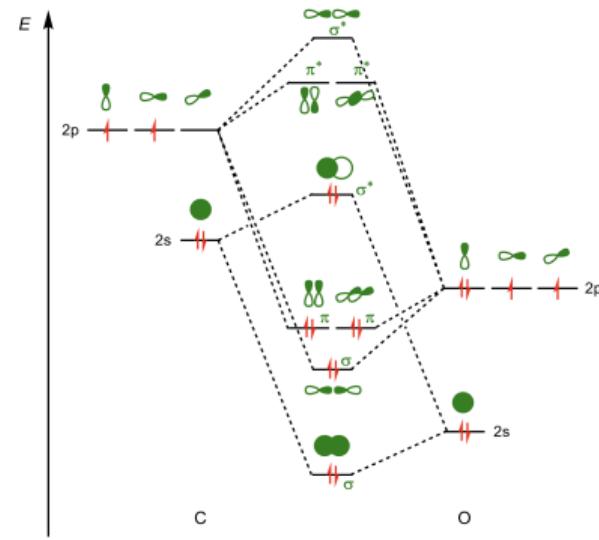
LCAO mit Aufgabe 2

1. Geben Sie die Elektronenkonfiguration von C und O an.
2. Zeichnen Sie die Atomorbitale (AO) für C und O in das Diagramm (unten) ein.
3. Zeichnen Sie die MO (Molekülorbitale) für das CO-Molekül im Diagramm ein und benennen Sie diese.
4. Füllen Sie die Elektronen zunächst in die jeweiligen Atomorbitale ein und anschliessend auch in die Molekülorbitale.
5. Berechnen Sie die Bindungsordnung für CO-Molekül.

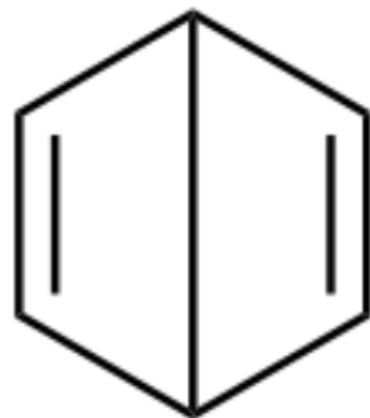


LCAO mit Aufgabe 2: Lösung

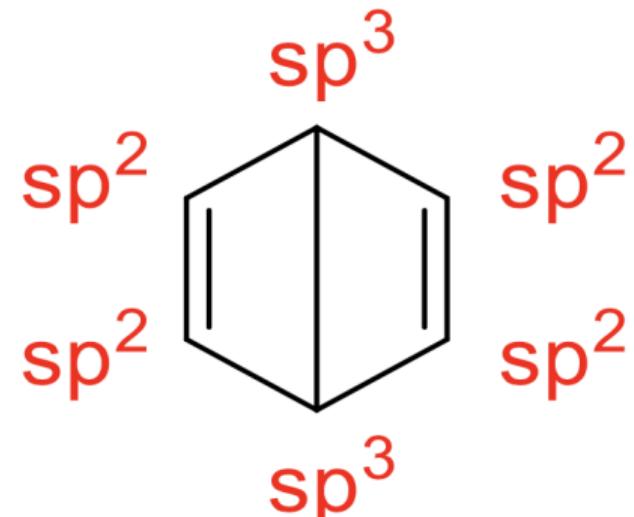
1. C- $1s^2 2s^2 2p^2$, O- $1s^2 2s^2 2p^4$
2. siehe Bild
3. siehe Bild
4. siehe Bild
5. $BO = \frac{8-2}{2} = 3$



Hybridisierung Aufgabe 1



Hybridisierung Aufgabe 1: Lösung



Dewar

Outline

1. Organisatorisches

2. Theorie

Aromatisch, Antiaromatisch und Nichtaromatisch
Säure und Basen Stärke

3. Nachbesprechung Serie 7

Recap: Orbitale
Hybridisierung
Hybridisierung

4. Tipps Serie 8

5. Feedback

6. Mental Health

Priorität Serie 8

1. 2.2
2. 1.2
3. 2.1
4. 1.3
5. 1.5
6. 2.4
7. 1.6
8. 2.3
9. 1.1
10. 1.5

Tipps Serie 3

- 1.2: Vergesst die H's nicht. Absossung zwischen H's kann dazu führen, das ein Molekül nicht planar ist.
- 1.3: Hab auch hier wieder Sterik im Kopf
- 1.4: Resonanz
- 2.1: Wo liegen die Orbitale im Raum?
- 2.4: Wie unterscheiden sich P und N, sind sie gleich gross?

Outline

1. Organisatorisches

2. Theorie

Aromatisch, Antiaromatisch und Nichtaromatisch
Säure und Basen Stärke

3. Nachbesprechung Serie 7

Recap: Orbitale
Hybridisierung
Hybridisierung

4. Tipps Serie 8

5. Feedback

6. Mental Health

Feedback

- Bitte füllt wieder das Feedback  aus damit ich euch besser Unterrichten kann :)

Outline

1. Organisatorisches
2. Theorie
 - Aromatisch, Antiaromatisch und Nichtaromatisch
 - Säure und Basen Stärke
3. Nachbesprechung Serie 7
 - Recap: Orbitale
 - Hybridisierung
 - Hybridisierung
4. Tipps Serie 8
5. Feedback
6. Mental Health

Mental Health

- Unter diesem Link  findet ihr Hilfe, falls es euch nicht gut geht.

**Vielen Dank für eure
Aufmerksamkeit!**

Dominik Götz
dgoetz@ethz.ch