



CHEM-A1230 – Orgaanisen kemian perusteet

Prof. Juha Siitonen
Aalto-yliopisto
Kevätlukukausi 2022

Kurssikello

1.

Molekyylin rakenne

2.

Additio karbonyyliin

3.

Substituutio karbonyyliin

4.

Enolaatti nukleofiilinä

Yksikkö 1.1:
Molekyylien esitystavat ja siististi piirtäminen

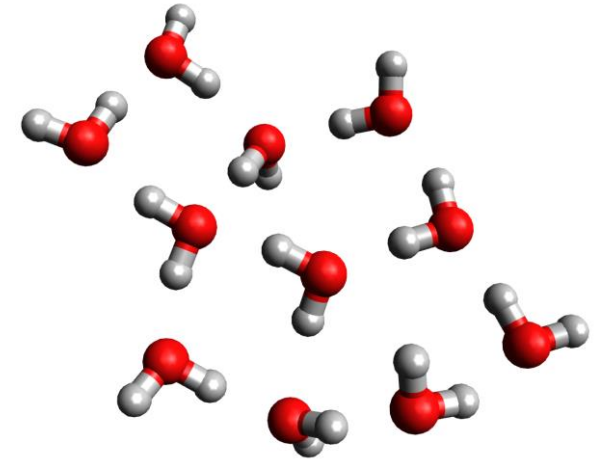
Clayden kappale 2
Harjoitustehtäväpaketti 1
Kotitehtävä 1

Näytös 1:

Malleista

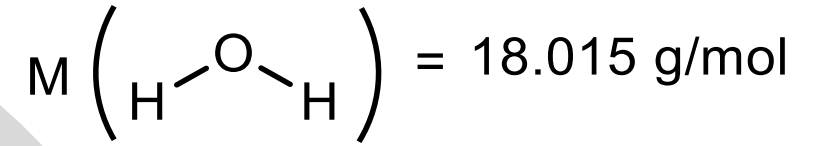
Mallien kanssa työskentely

- **Kysymys:** Mikä näistä on vettä?

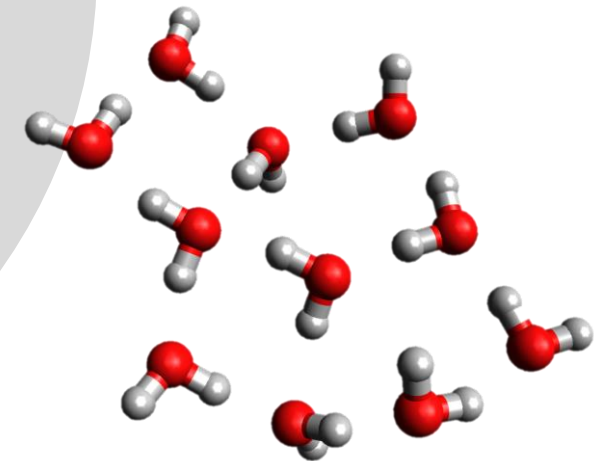


- **Kysymys:** Miksi me sitten käytetään malleja?

Miltä **malli** näyttää?



Symbolinen esitys
(Reaktioyhtälöt, matematiikka)



Nanotason esitys
Kokoelmia silmälle näkymättömiä
kappaleita



Makroskooppinen
Kokeet ja havainnot

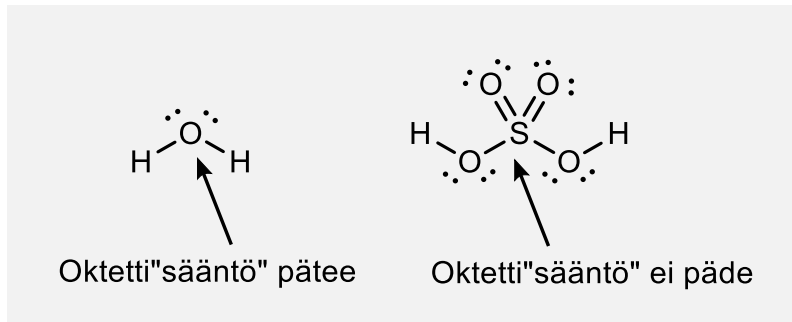
Empiirin taso

Konsepti
(*esim.*
reaktiivisuus,
tiheys ρ ,
happamuus K_a)

Mallin taso

Rikotaan malli!

- **Kysymys:** Piirrä veden (H_2O) ja rikkihapon (H_2SO_4) Lewis-rakenteet

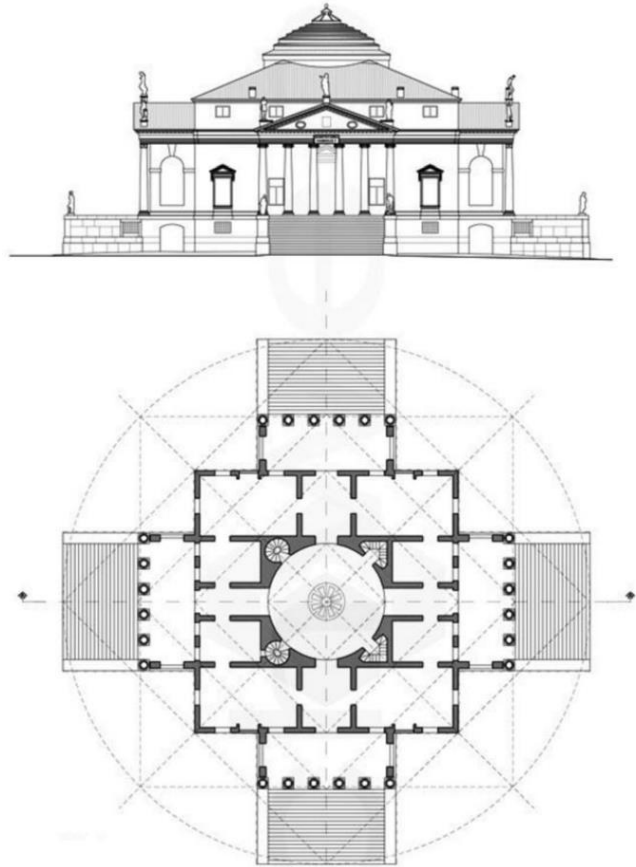


					18	
					2 He helium 4.0026	
	13	14	15	16	17	
	5 B boron 10.81 [10.806, 10.821]	6 C carbon 12.011 [12.009, 12.012]	7 N nitrogen 14.007 [14.006, 14.008]	8 O oxygen 15.999 [15.999, 16.000]	9 F fluorine 18.998	10 Ne neon 20.180
	13 Al aluminium 26.982	14 Si silicon 28.085 [28.084, 28.086]	15 P phosphorus 30.974	16 S sulfur 32.06 [32.059, 32.076]	17 Cl chlorine 35.45 [35.446, 35.457]	18 Ar argon 39.95 [39.792, 39.963]
12						
30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.723	32 Ge germanium 72.630(8)	33 As arsenic 74.922	34 Se selenium 78.971(8)	35 Br bromine 79.904 [79.901, 79.907]	36 Kr krypton 83.798(2)
48	49	50	51	52	53	54

Näytös 1:

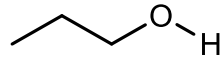
Kemian standardipiirtotekniikat

Esitystavalla on merkitystä

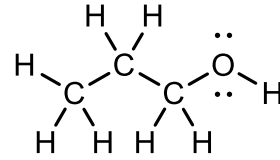


Andrea Palladion La Rotonda

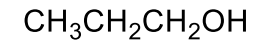
Moderni kemia käyttää viivakaavoja



moderni piirtotapa



vanhentunut piirtotapa



vanhentunut piirtotapa

Viivakaavojen piirtäminen:

- Hiiliketju muuttuu sik-sakiksi 120° kulmiin
 - Jokainen kulma on hiiliatomi
- Hiiliin kiinnittyneitä vetyjä ei piirretä

Miksi viivakaavat?

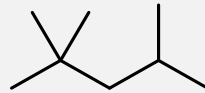
- Helppolukuinen
- Huomio kiinnittyy olennaiseen
- Nopeita ja helppoja piirtää

Suoraketjuiset, haaroittuneet ja rengasmaiset yhdisteet

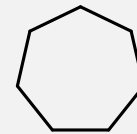
Suoraketjuinen



Haaroittunut



Rengasmainen

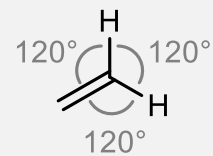


Yleisimmät Geometriat

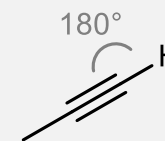
Yksöissidokset



Kaksoissidokset

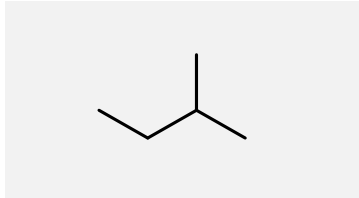


Kolmoissidokset

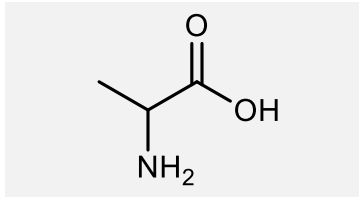
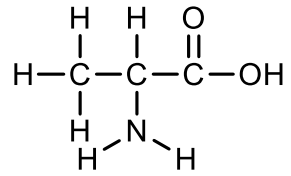


Viivakaavojen tulkintaa

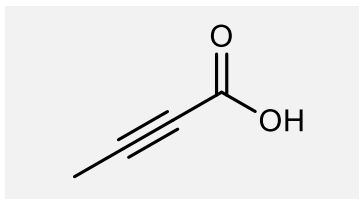
- **Tehtävä 1:** Muuta viivakaavaksi $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$



- **Tehtävä 2:** Muuta viivakaavaksi

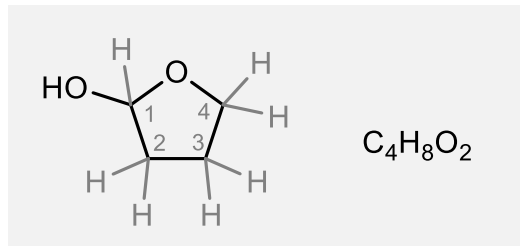
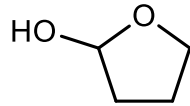


- **Tehtävä 3:** Muuta viivakaavaksi $\text{CH}_3\text{CCCO}_2\text{H}$

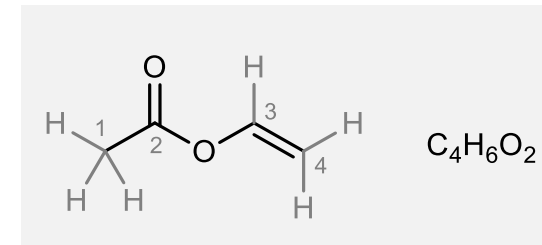
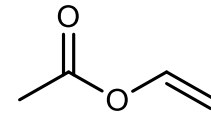


Viivakaavojen tulkintaa

- **Tehtävä 1:** Määritä yhdisteelle molekyylikaava ($C_nH_mO_l$)



- **Tehtävä 2:** Määritä yhdisteelle molekyylikaava ($C_nH_mO_l$)



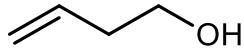
Isomeria: Samat atomit, eri rakenne

- Kaavalle C_4H_8O voidaan piirtää 48 isomeeriä!



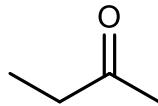
C_4H_8O

KP: 66 °C



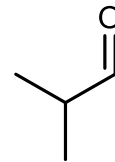
C_4H_8O

KP: 112 °C



C_4H_8O

KP: 80 °C



C_4H_8O

KP: 63 °C

Isomeeri (IUPAC)

One of several species (or molecular entities) that have the *same atomic composition* (molecular formula) *but different line formulae* or *different stereochemical formulae* and hence different physical and/or chemical properties.

<https://goldbook.iupac.org/terms/view/I03289>

Näytös 3:

Olisiko sinulla hetki aikaa puhua kemiasta?

Nimillä on merkitystä... mutta nimi ei ole kaikki kaikessa

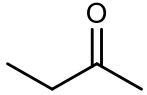


Yleisimpiä ruuvikantoja



Erithacus rubecula

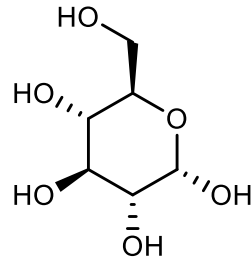
Molekyyleistä puhuminen: **IUPAC-nimet**



butan-2-oni

IUPAC-nimestä on hyötyä

Triviaalinimestä ei ole hyötyä

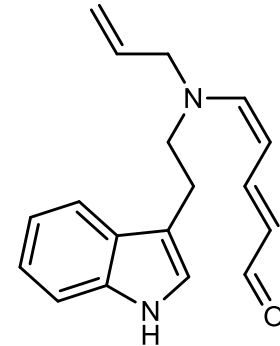


(2*S*,3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-6-(hydroxymethyl)tetrahydro-2*H*-pyran-2,3,4,5-tetraol

glukoosi

IUPAC-nimestä ei ole hyötyä

Triviaalinimestä on hyötyä

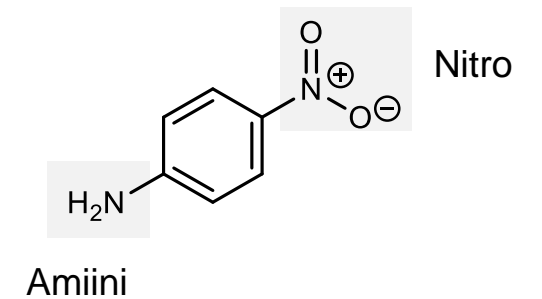
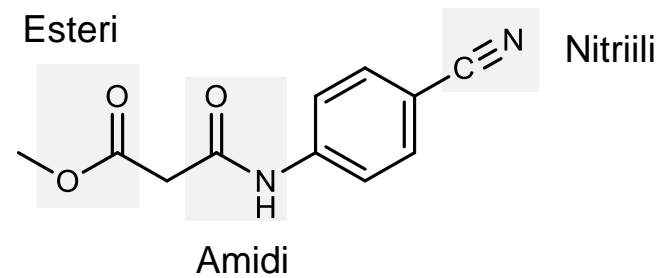
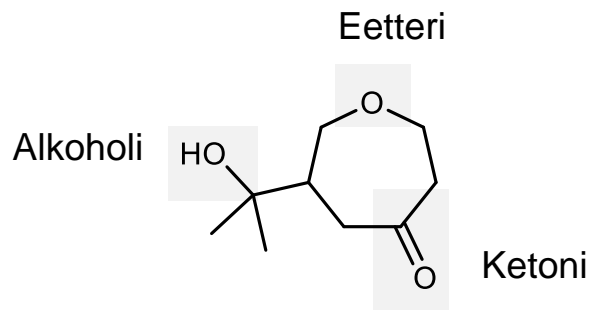
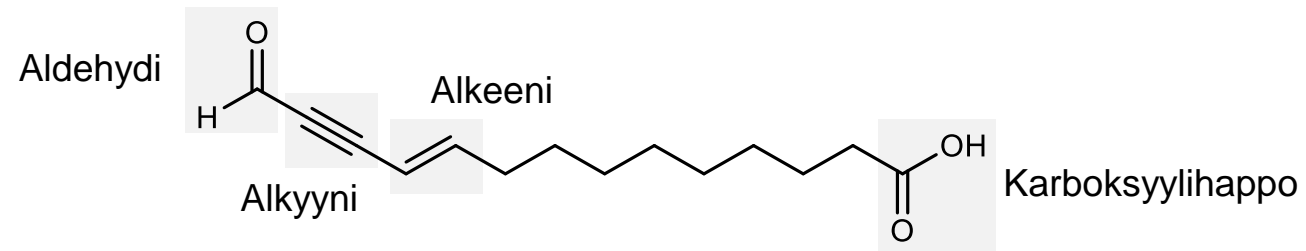


(2*E*,4*Z*)-5-((2-(1*H*-indol-3-yl)ethyl)(allyl)amino)penta-2,4-dienal

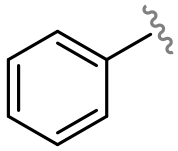
IUPAC-nimestä ei ole hyötyä

Triviaalinimestä ei ole hyötyä

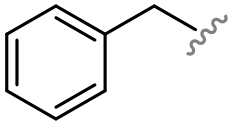
Molekyyleistä puhuminen: yleisimmät funktionaaliset ryhmät



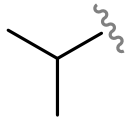
Molekyyleistä puhuminen: yleisimmät lyhenteet



Fenyyliryhmä, Ph



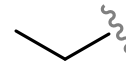
Bentsyyliryhmä, Bn



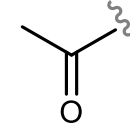
Isopropyyliryhmä, *i*-Pr




tert-butyyliryhmä, *t*-Bu



Etyyliryhmä, Et



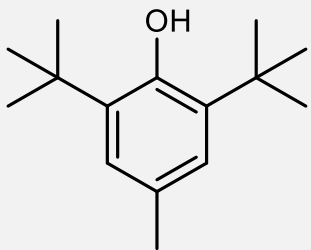
Asetaattiryhmä, Ac

Mikä on  ?

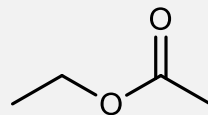
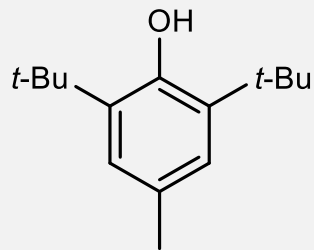
Koukuraviiva tarkoittaa

Kiinnittymispistettä

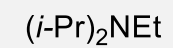
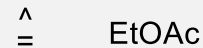
toiseen atomiin



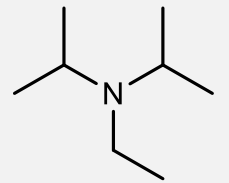
BTH (E321)



Etyyliasettaatti



Hüning's base

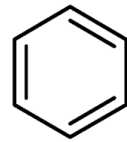


Näytös 4:

Hyvät, pahat ja rumat

Hyvät, pahat ja rumat

Kemiassa **piirtäminen on kommunikointia** – epäselvät piirrokset ovat epäselvää kommunikointia



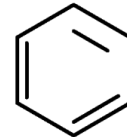
A



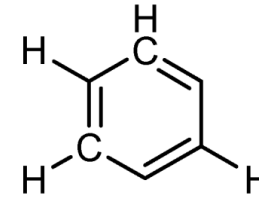
B



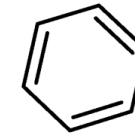
C



D



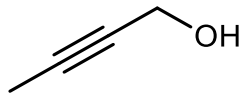
E



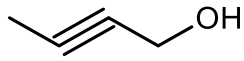
F

*Show most chemists a series of diagrams of something as simple as benzene, and there will be near-unanimity about which ones are “good” diagrams and which ones are “bad”. As Robert Pirsig writes in *Zen and the Art of Motorcycle Maintenance*, “But even though Quality cannot be defined, you know what Quality is!”*

Yleisimpiä piirtovirheitä 1/2

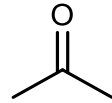


oikein

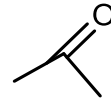


väärin

**Taittuneet
kolmoissidokset**

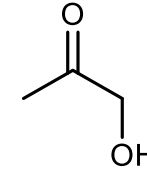


oikein

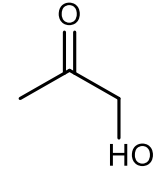


väärin

**Väärät
sidoskulmat**

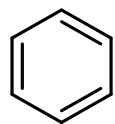


oikein

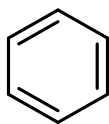


väärin

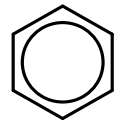
**Sidokset väärin
atomeihin**



oikein

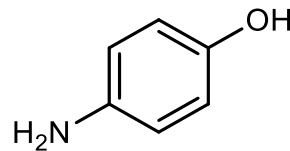


oikein

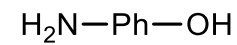


ei suositella

**Aromaattinen rengas
ympyränä**

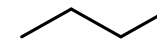


oikein



täysin väärin

**Lyhenteiden
väärinkäyttö, kytkeytyy
vain yhteen atomiin!**



oikein



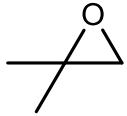
väärin



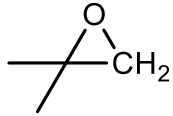
väärin

**Siksak ei ole 120°
kulmassa**

Yleisimpiä piirtovirheitä 2/2



oikein

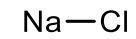


väärin

**Piirtotyylien
sekoittaminen**

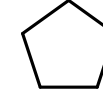


oikein

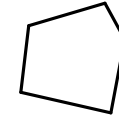


väärin

**Suoloihin ei piirretä
kovalenttista sidosta**

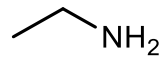


oikein

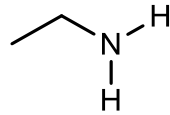


väärin

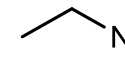
**Renkaat eivät ole
säännöllisiä
monikulmioita**



oikein



oikein



väärin

**Implisiittisten vetyjen
unohtaminen
heteroatomeista**