



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

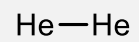
Yksikkö 1.2:
Molekyyli kvanttimekaanisena kappaleena

Clayden kappale 2
Harjoitustehtäväpaketti 2

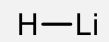
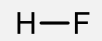
Näytös 3:

Monimutkaisempia molekyylejä

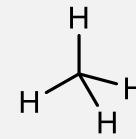
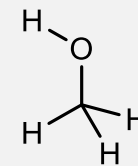
Kohti kemiaa



Kaksi samaa atomia

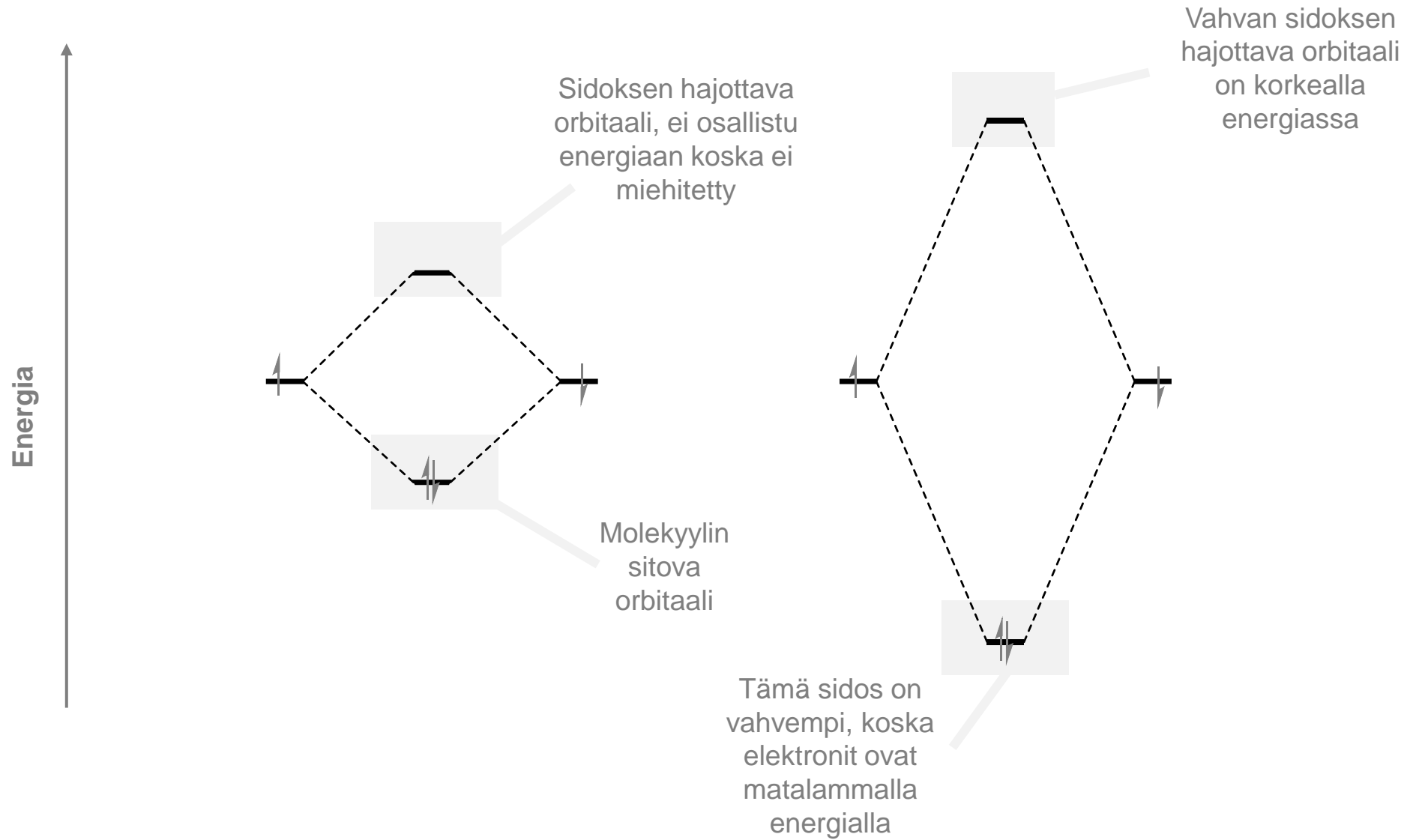


Kaksi eri atomia

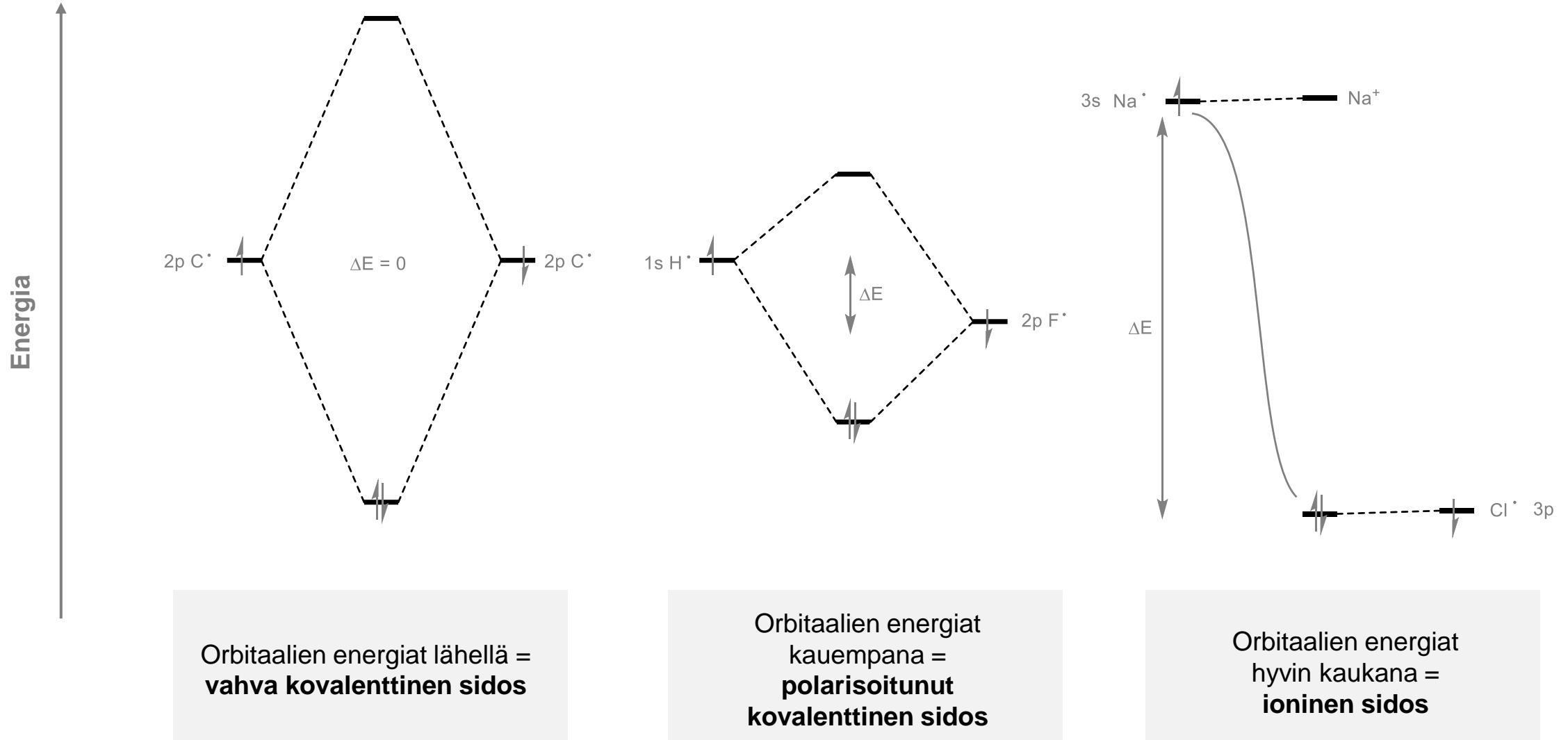


Useita eri atomeita

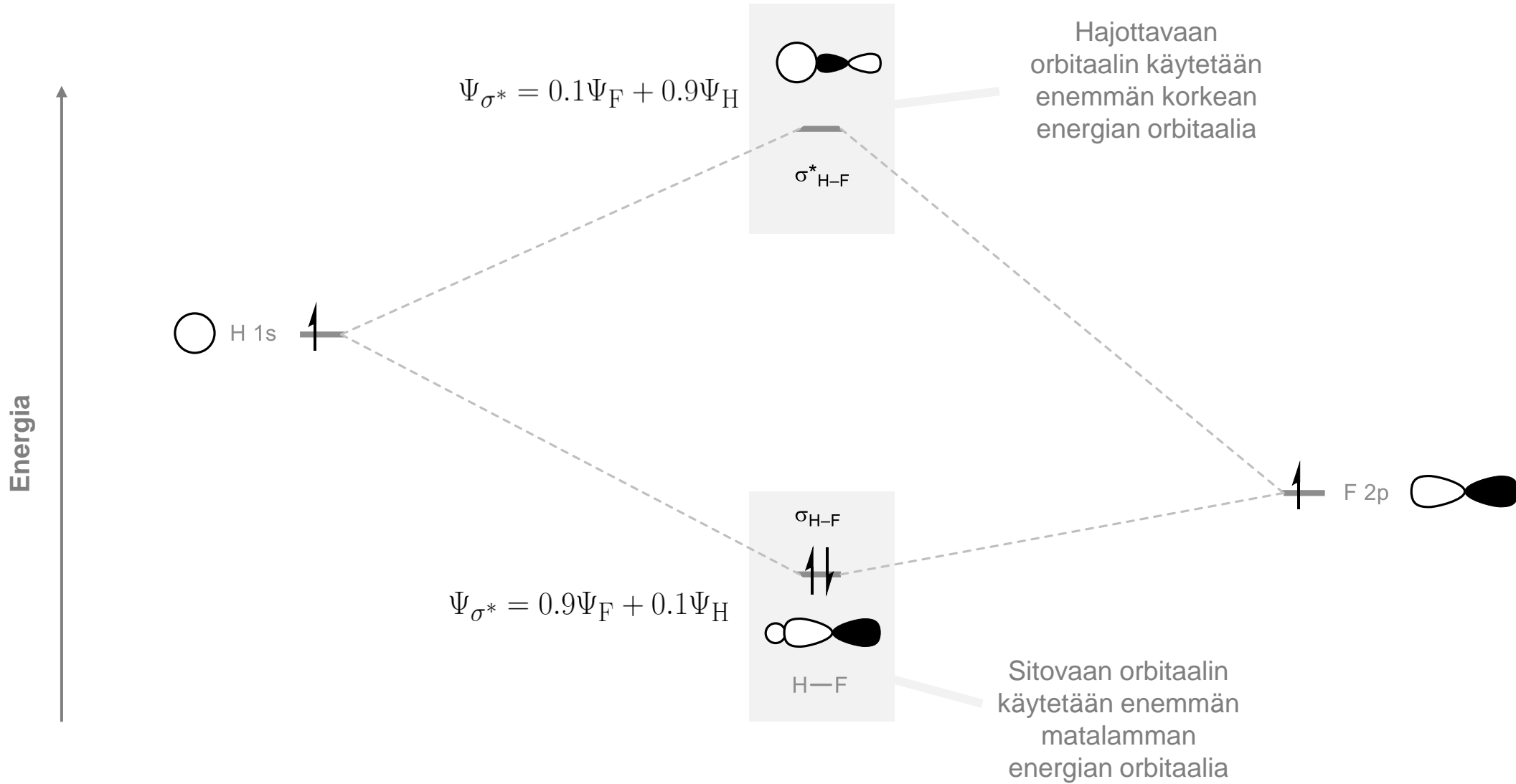
Orbitaalit ennustavat sidosten vahvuutta



Energeettisesti samankaltaiset orbitaalit = Vahva sitova vuorovaikutus

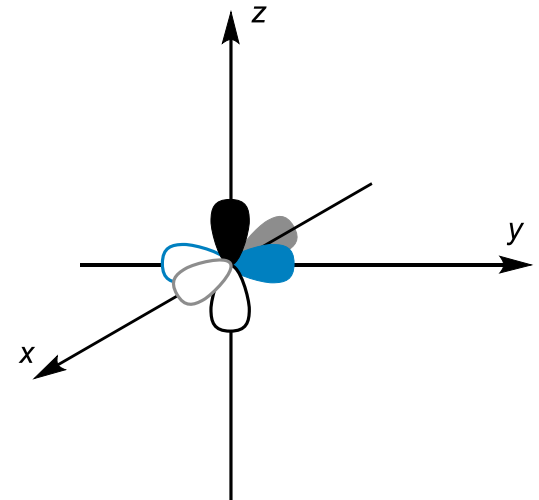
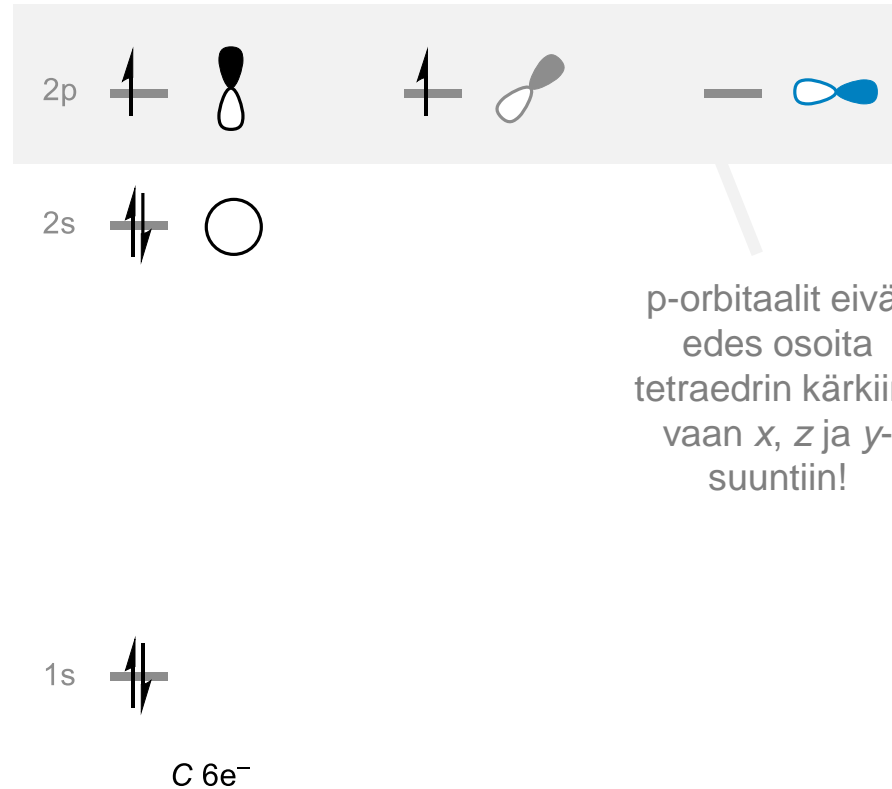
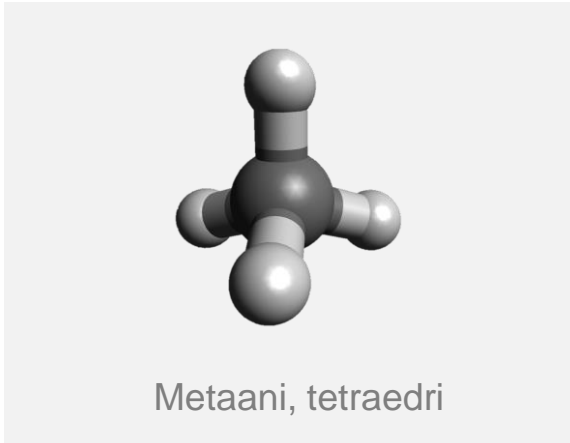


Miksi HF on polaarinen?

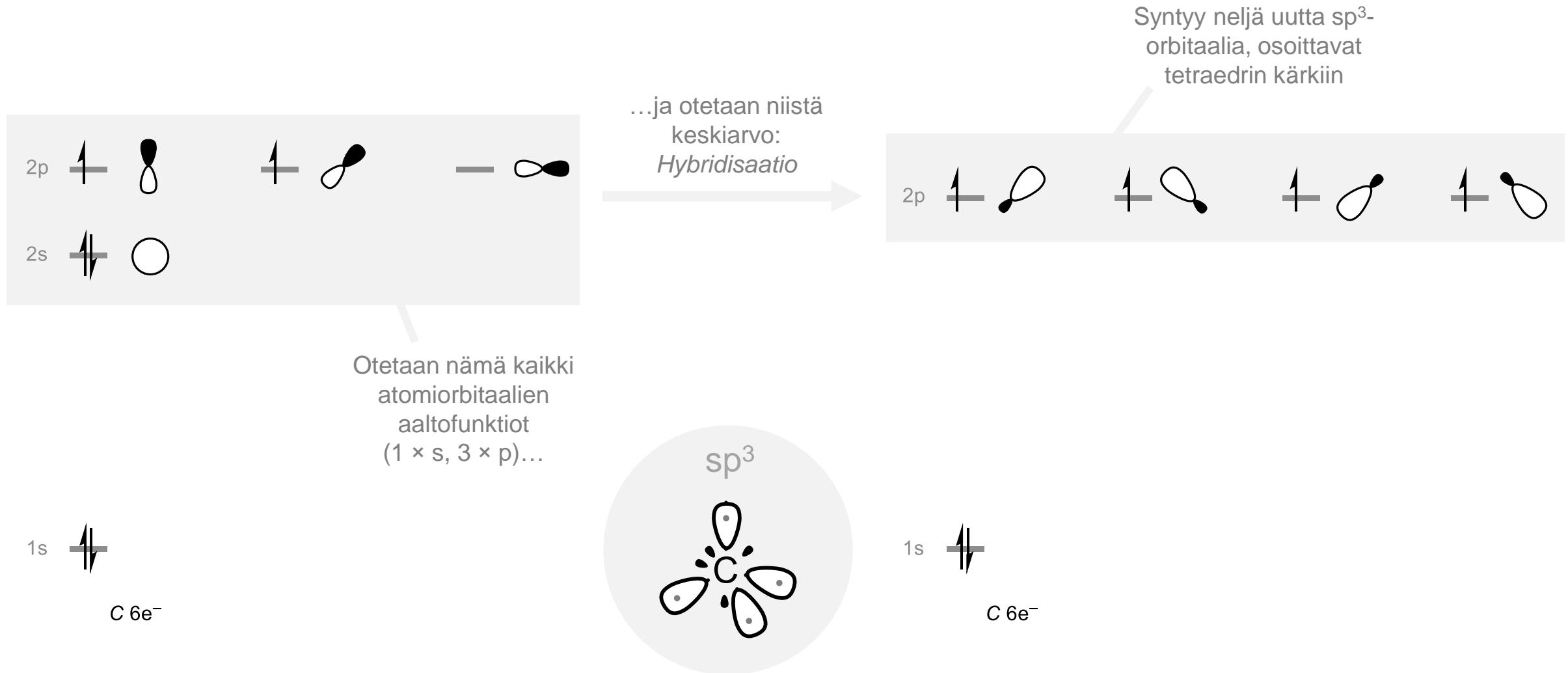


Hiilen ongelma: Sidosten suunta

- **Miten** pallosta ja kolmesta x , y ja z –akselien suuntaan osoittavasta orbitaalista saadaan tetraedri? Suunnat ovat näennäisesti täysin väärin!
- *Virallinen ratkaisu:* Symmetriaoperaatiot – *Höntsäratkaisu:* hybridisaatio: muodostetaan orbitaalit jotka osoittavat intuitiivisesti oikeaan suuntaan.

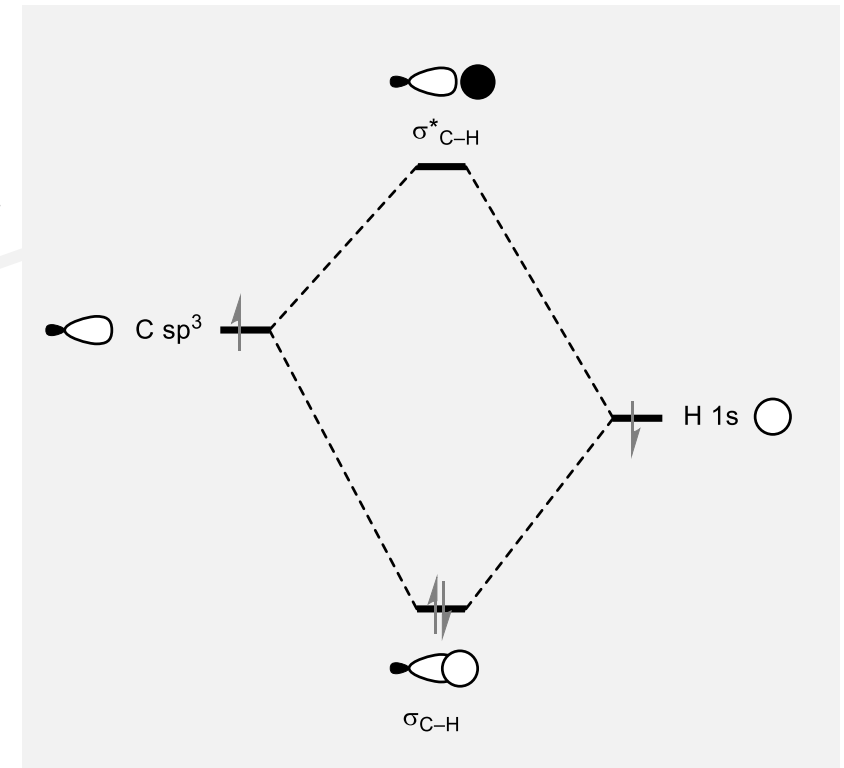
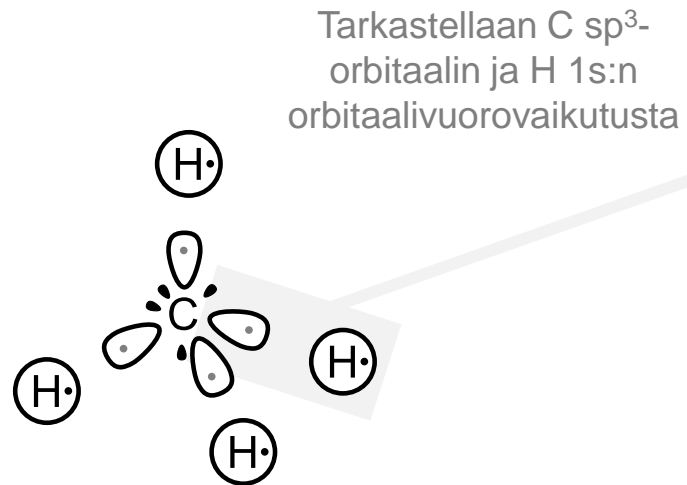
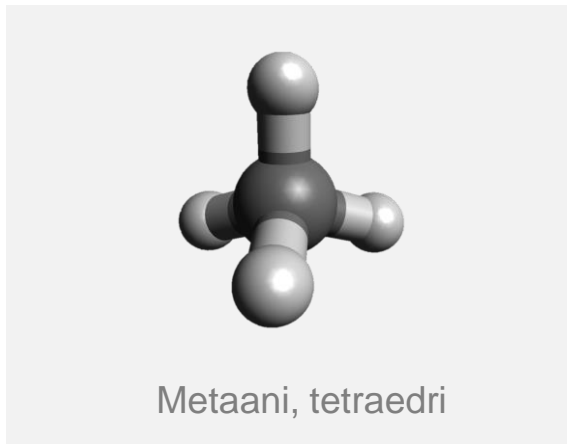


Hybridisaatio: Muodostetaan atomiorbitaaleista uudet hybridiorbitaalit (sp^3)

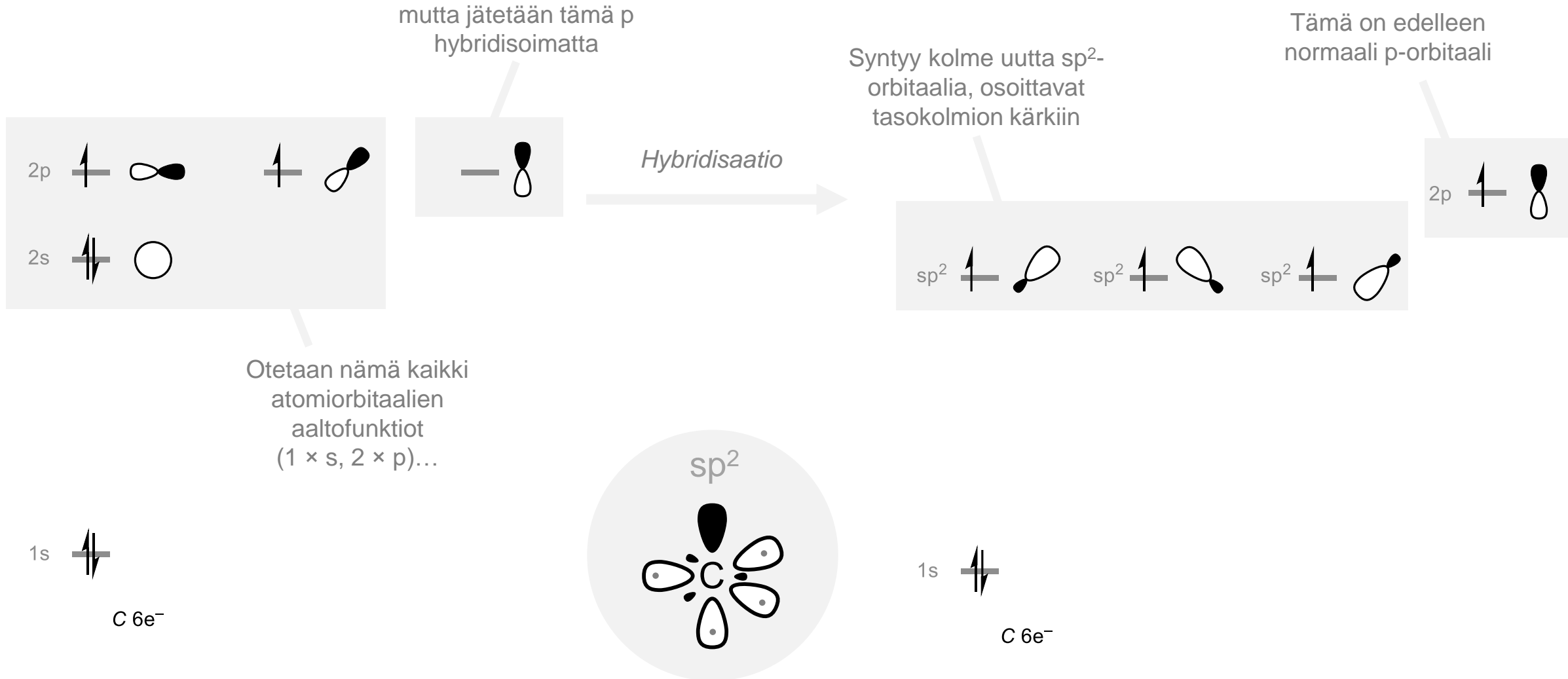


Hiilen ongelma: Sidosten suunta ratkaistu!

- Käyttäen sp^3 -hybridiorbitaaleja atomiorbitaalien sijaan: metaanissa on neljä σ_{C-H} -sidosta!

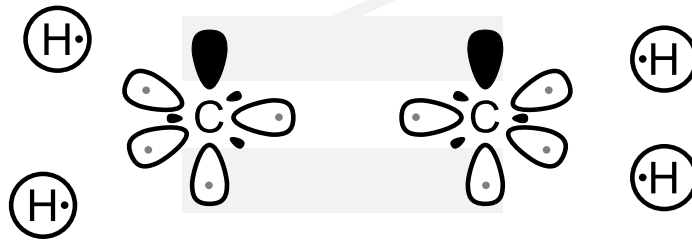
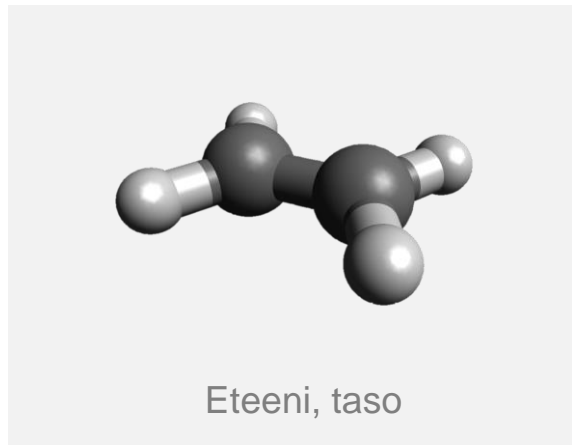


Hybridiorbitaalit: sp^2

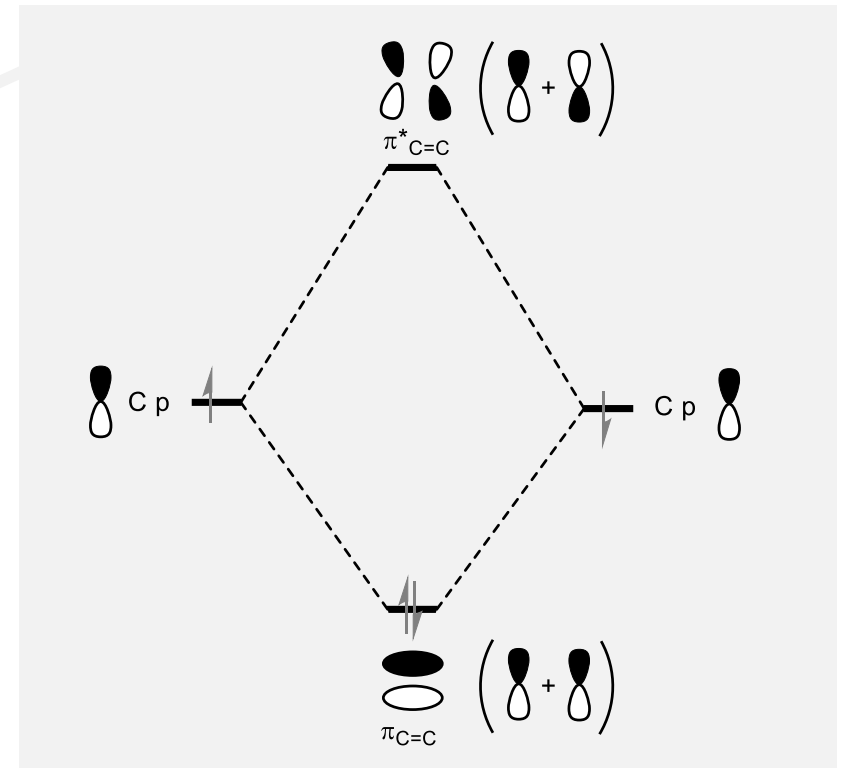


Kaksoissidos!

- Käyttären sp^2 -hybridiorbitaaleja ja p-orbitaalia atomiorbitaalien sijaan: eteenissä on neljä σ_{C-H} -sidosta, yksi σ_{C-C} -sidosta ja yksi $\pi_{C=C}$ -sidos!

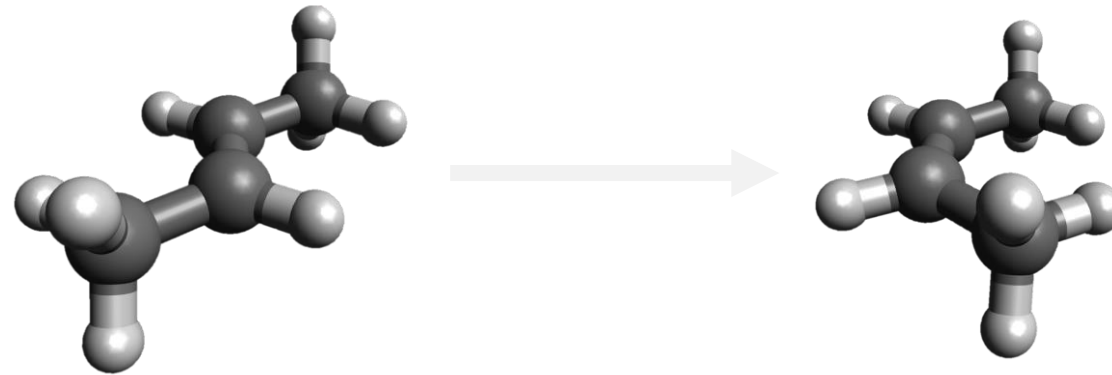


Tarkastellaan C p-orbitaalien
ja C p-orbitaalien
vuorovaikutusta

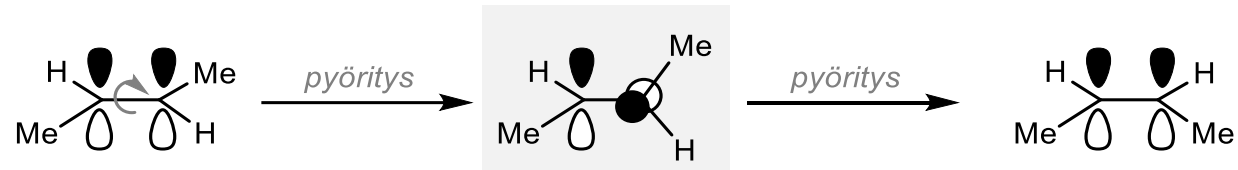


Orbitaalit käyttöön: Miksi kaksoissidoksella on E ja Z isomeerit?

- **Tehtävä:** But-2-eeni esiintyy kahtena isomeerinä jotka ovat pysyviä, eivätkä muutu toisikseen. Miksi?

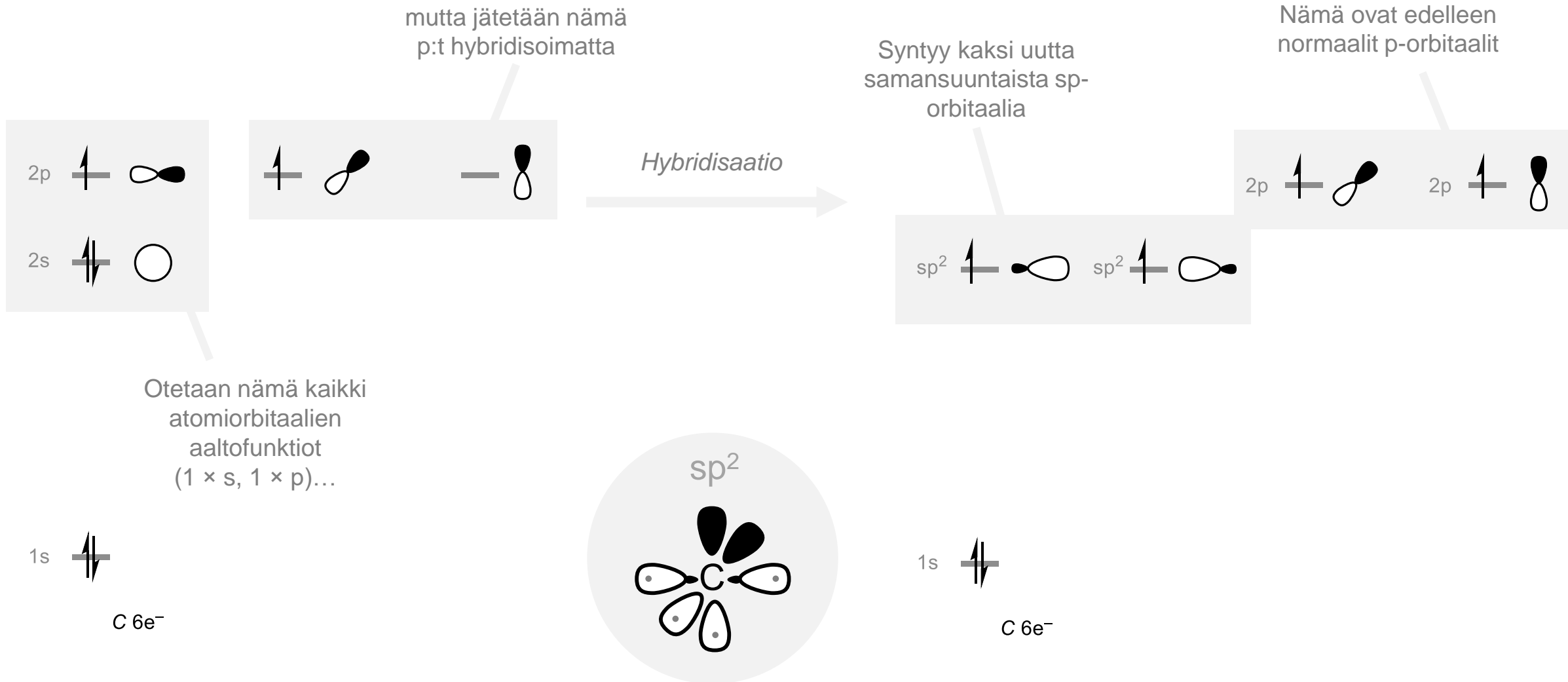


- Isomerisaatio vaatisi C=C sidoksen pyörähdyksen. Tämän seurauksena p-orbitaalit joutuvat kääntymään 90° kulmaan, orbitaalit eivät voi vuorovaikuttaa toistensa kanssa = sidosta ei tässä geometriassa muodostua.



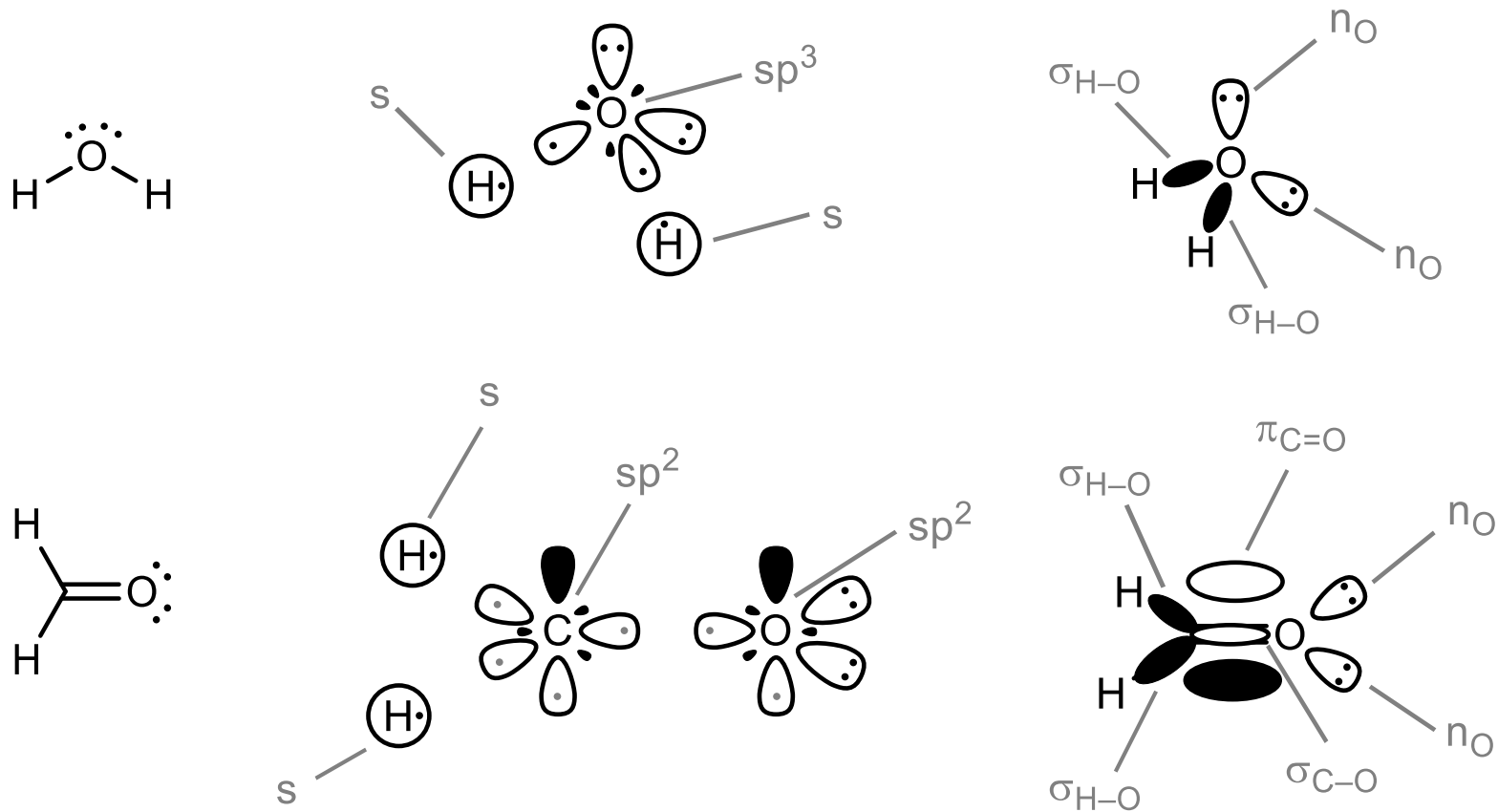
π-sidosta ei voi muodostua kun orbitaalit ovat ortogonaaliset!

Hybridiorbitaalit: sp



Valenssisidosteoria

- Mikä vain atomi voidaan hybridisoida (N, O, C) ja rakentaa sidosorbitaalit mille vain molekyylille.



- Jokaista sitovaa orbitaalia vastaa hajottava orbitaali.