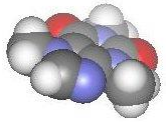
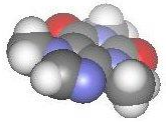


Einführung in die Organische Chemie

PD Dr. Eric Fontain

Technische Universität München
Fakultät für Chemie

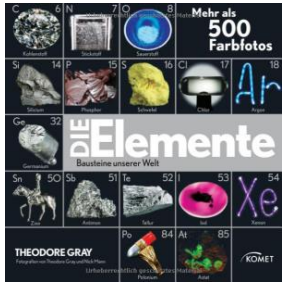


Einführung in die Organische Chemie

- **Einführung**
  - Was ist Organische Chemie?
  - Strukturbausteine, Alkylketten, Funktionelle Gruppen
  - Strukturprinzipien, Isomerie, Geometrie, Chiralität
- **Kohlenwasserstoffe**
  - Alkane, Cycloalkane
  - Alkene, Alkine
  - Aromatizität, Aromaten
- **Sauerstoffverbindungen**
  - Die polare Bindung
  - Alkohole, Ether
  - Aldehyde, Ketone
  - Carbonsäuren, Ester
- **Erdöl, Petrochemie, Kraftstoffe, Triglyceride**
  - Erdöl und Petrochemie
  - Fette, Öle, Triglyceride, Fettsäuren
  - Moderne Kraftstoffe
  - Bioethanol, Biodiesel, Synthetische Kraftstoffe
- **Wasser und Organische Moleküle**
  - Die Struktur des Wassers
  - Entropie, Hydrophilie, Hydrophobie
  - Polare und unpolare Lösungsmittel
  - Tenside, Fett-Verseifung, Phospholipide
- **Organische Farbstoffe und Pigmente**
  - Entstehung und Wahrnehmung von Licht und Farben
  - Chromophore
  - Natürliche Organische Farbstoffe: Indigo und Krapp
  - Triphenylmethan-, Teer-, Azofarbstoffe, Phthalocyanine
  - Moderne Hochleistungspigmente
  - Optische Aufheller
- **Kohlenhydrate**
  - Glucose und isomere Zucker
  - Halbacetal-Bildung und Pyranosen
  - Mono-, Di-, und Polysaccharide
  - Stärke, Cellulose
- **Proteine**
  - Aminosäuren und Peptidbindung
  - Peptide, Proteine
  - Primär-, Sekundär-, Tertiärstruktur
  - Das Schlüssel-Schloss-Prinzip
  - Faserproteine: Keratine, Kollagen
- **Kunststoffe**
  - Thermoplaste, Elastomere und Duroplaste
  - Polymertypen
  - Polymerisation und Polymerisate
  - Polykondensation und Polykondensate
  - Polyaddition und Polyaddukte
- **Vertiefung (nicht für GEO)**
  - Industrielle Organische Chemie: Pharmazeutika
  - Evaluierung von chemischen Reaktionen: Ausbeute und Atomökonomie
  - Terpene
  - DNA und RNA

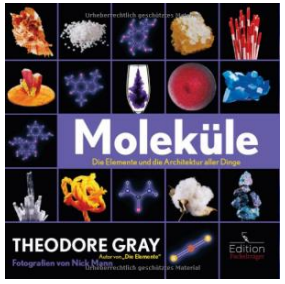
Vorlesungsmaterial und weitere Literatur

PowerPoint-Folien und Übungen, Klausuren
PD Dr. Eric Fontain in www.moodle.tum.de
Vorher muss die LV-Anmeldung in TUMonline erfolgt sein!

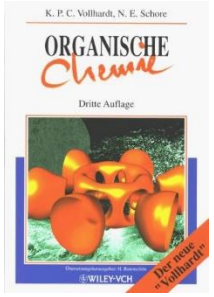


Elemente:
Bausteine unserer Welt
Theodore Gray

Lehrbuch der Organischen Chemie
H. Beyer,
W. Walter,
W. Franke
einfacher



Moleküle:
Die Elemente und die Architektur aller Dinge
Theodore Gray



Organische Chemie
K.P.C. Vollhardt,
N.E. Shore
“hardcore“

Prüfungsrelevanz
Diese PowerPoint-Folien dienen im Wesentlichen als Grundlage und z**ur Demonstration des Vorlesungsinhaltes. Die Kenntnis ihres Inhalts allein garantiert nicht das Bestehen der Klausur. Zum Erreichen des Lernziels sind auch die verbal in der** Vorlesung und den Übungen gegebenen Informationen relevant.
Die manchmal sehr detaillierten Stoffinformationen und Verbindungsnamen in Tabellen etc. sind dann Lernstoff, wenn dies in der Vorlesung besonders angemerkt wird.

Der Begriff "Organische Chemie"

Jöns Jacob Berzelius
(1779-1848)

Anorganisch

Wasser

Salze

Erze

Mineralien

Metalle

1806

Vitalismus

Organisch

Alkohol

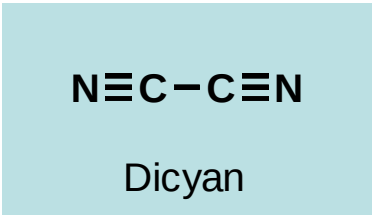
Essigsäure

Zucker

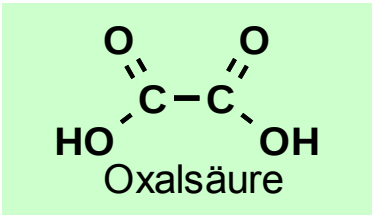
Glycerin

Fette, Öle, Wachse

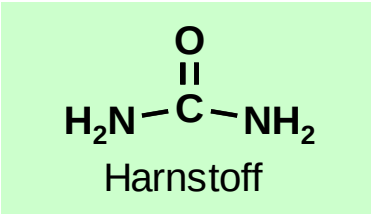
Friedrich Wöhler
(1800-1882)

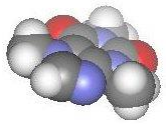


1824



1828





Moderne Definition "Organische Chemie"

Die Organische Chemie ist die Chemie der

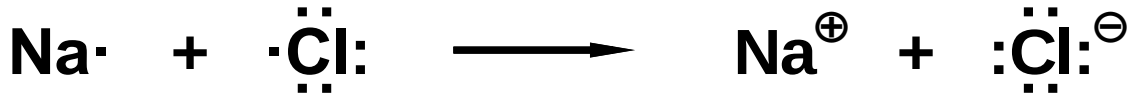
KOHLENSTOFF-VERBINDUNGEN

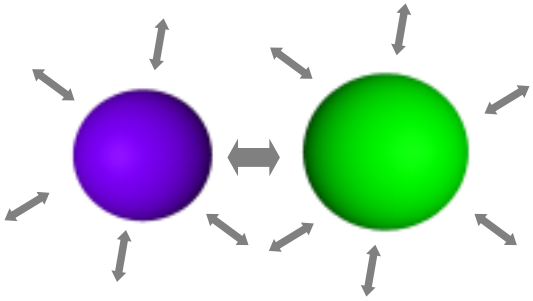
(außer CO, CO_2, CS_2 und deren Derivate)

Anzahl bekannter Organischer Verbindungen (Stand Mrz2007, Quelle: Beilstein): 9.780.073

Hier sind keine Biopolymere (Gene, Proteine etc.) mitgezählt.

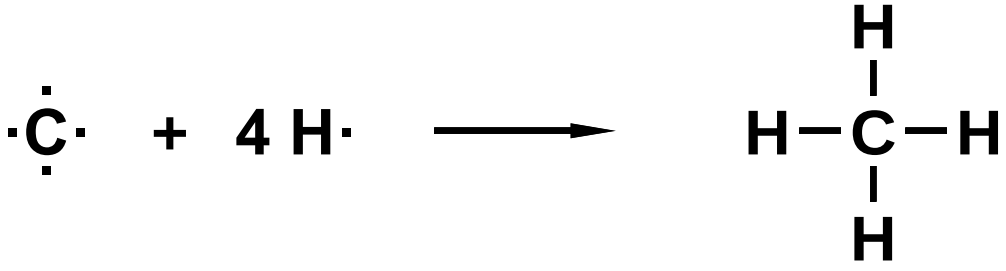
Anorganische Chemie ist meist ionisch:

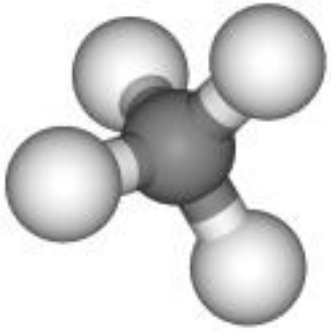




Ungerichtete Bindungen

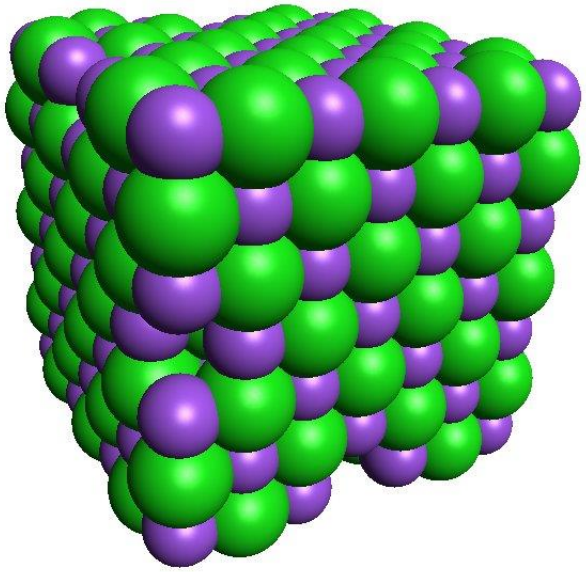
Organische Chemie ist meist kovalent:





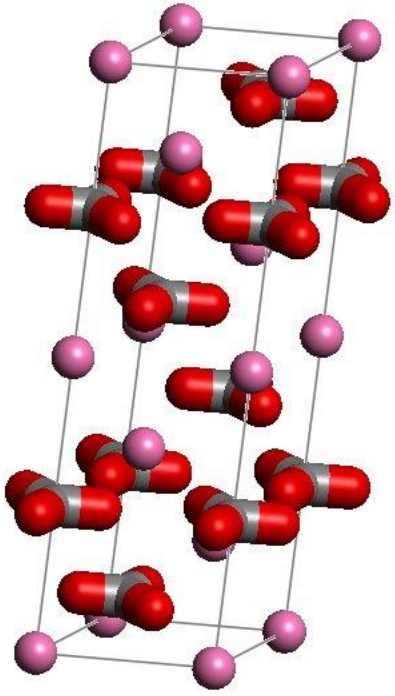
Gerichtete Bindungen

Strukturen der Anorganische Chemie



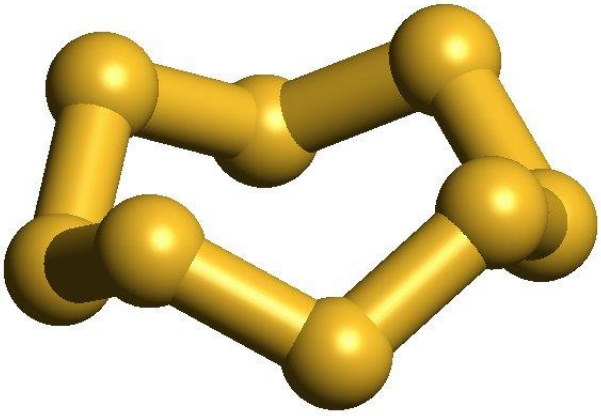
Kochsalz

NaCl



Calcit

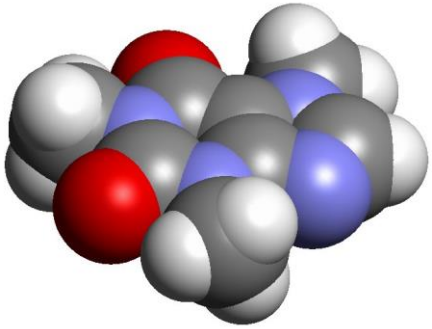
$CaCO_3$



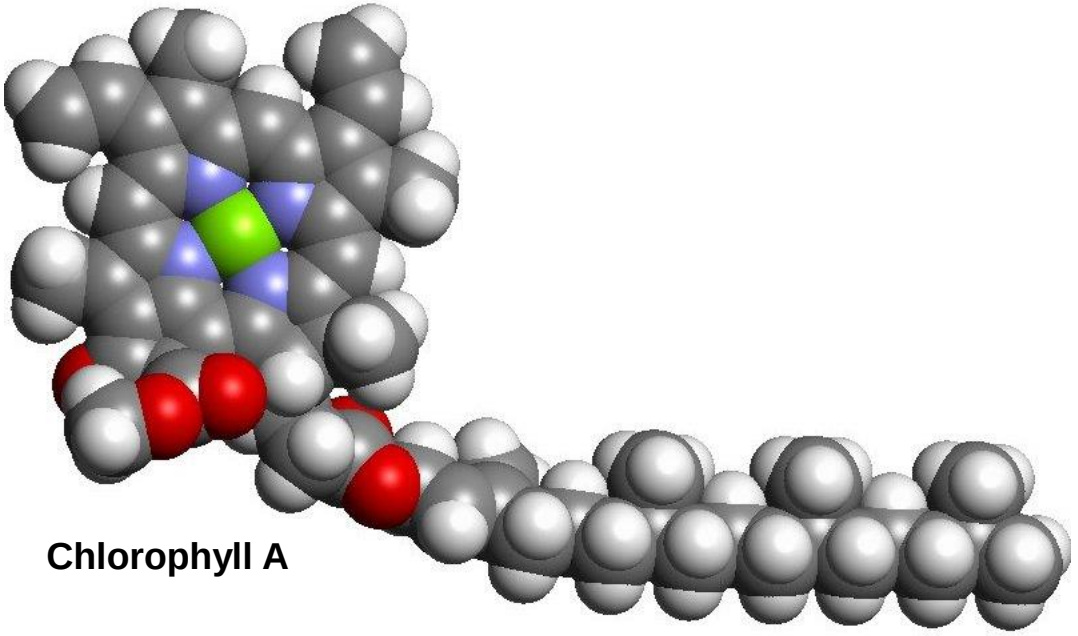
α-Schwefel

S_8

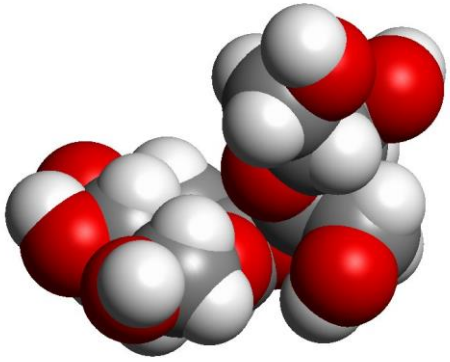
Strukturen der Organische Chemie



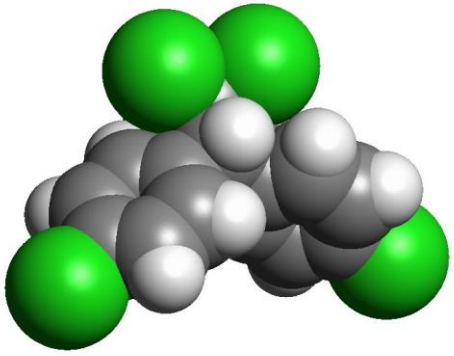
Coffein



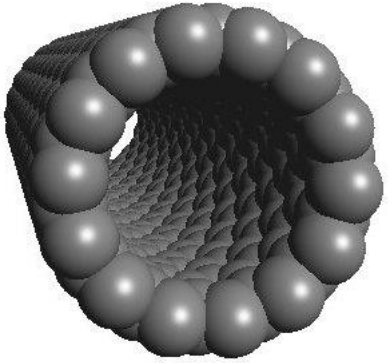
Chlorophyll A



Saccharose

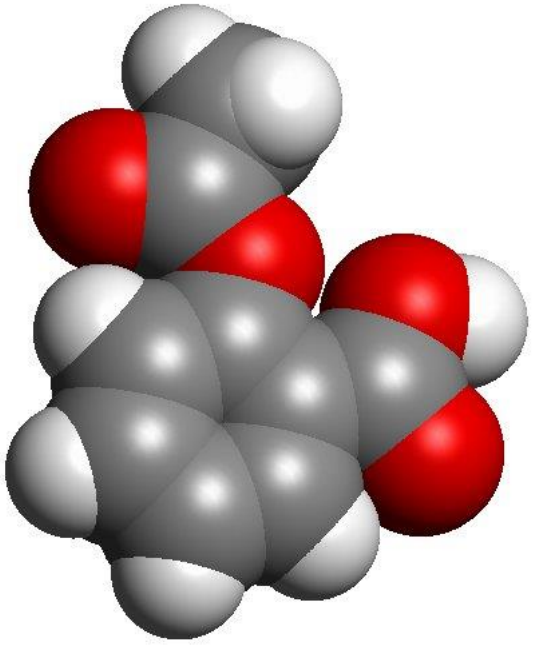


DDT (Dichlordiphenyltrichlorethan)

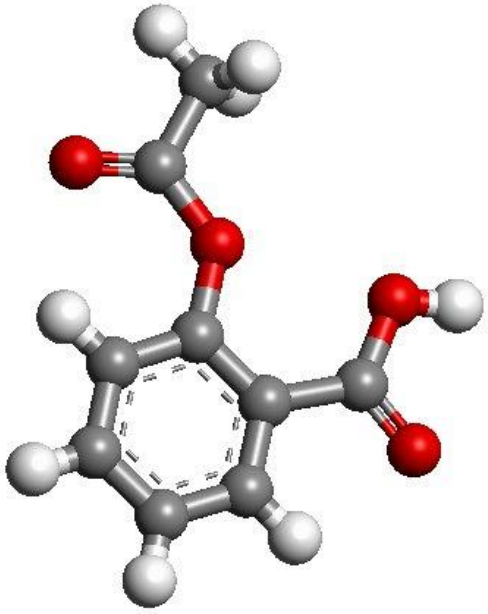


Nanotube (C_n)

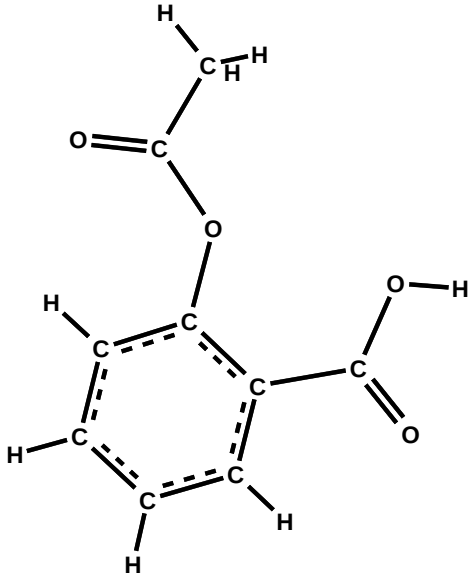
3D-Strukturmodelle (Aspirin)



Kalottenmodell (CPK)

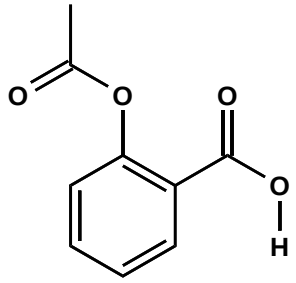


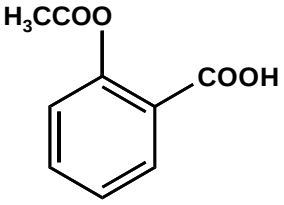
Ball-and-Stick-Modell

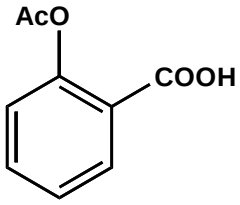


Strichmodell

2D-1D-(0D)-Strukturmodelle (Aspirin)







CH_3-COO-(o-C_6H_4)-COOH

$C_9H_8O_4$

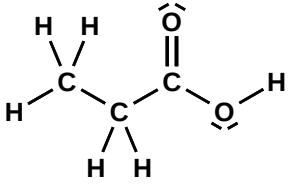
Vereinfachte 2D-Strukturzeichnungen

1D-Zeilenformel

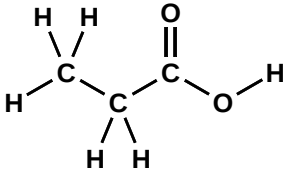
Summenformel (0D)

Auf richtige Darstellung achten!

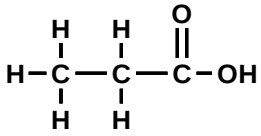
Beispiel Propansäure



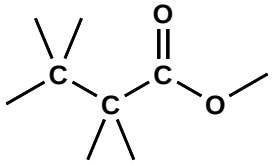
RICHTIG
Sehr ausführlich, mit allen Atomen, allen Bindungen und mit den freien Elektronenpaaren



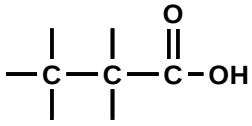
RICHTIG
Auf freie Elektronen kann verzichtet werden, außer sie sind relevant für eine Eigenschaft oder Reaktivität.



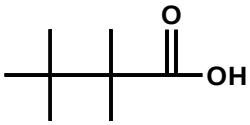
RICHTIG
Die Winkel zwischen den Bindungen müssen keine Tetraeder darstellen.



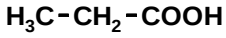
FALSCH
Striche sind normalerweise Methyl-gruppen.
Gemeint sind allerdings H-Atome.



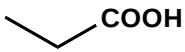
FALSCH
Striche sind normalerweise Methylgruppen.
Gemeint sind allerdings H-Atome.



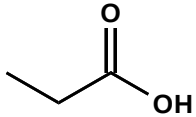
FALSCH
Das dargestellte Molekül heißt 2,2,3,3-Tetramethylbutansäure.



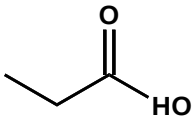
RICHTIG
Eindimensionale Zeilenformel. Gut für Listen und Tabellen. Erfordert jedoch zusätzliche Kenntnisse über die Codierung funktioneller Gruppen.



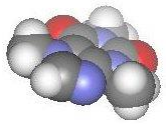
RICHTIG
Kürzer geht's nicht. Erfordert jedoch zusätzliche Kenntnisse über die Codierung funktioneller Gruppen



RICHTIG
Implizite Annahme der H-Atome. Nur die Heteroatome werden dargestellt. Verkürzung von funktionellen Gruppen. Häufigste Darstellungsart in der OC.



FALSCH
Die Bindung der OH-Gruppe erfolgt über das O-Atom und nicht über das H-Atom.



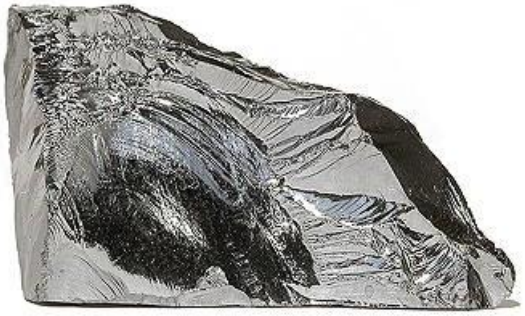
Elemente der Organische Chemie

I	II											III	IV	V	VI	VII	VIII	
H																	He	1
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	2
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	3
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	4
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	5
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	6
Fr	Ra	Ac	Rf	Ha														7

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Leben: Warum Kohlenstoff und nicht Silicium?

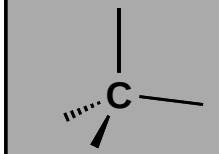
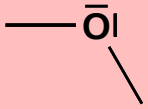
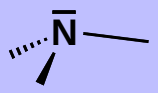
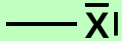
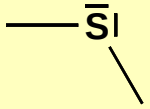
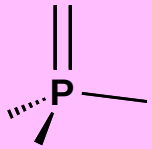
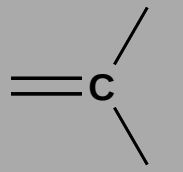
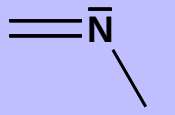
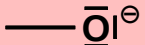
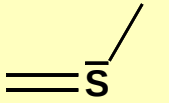
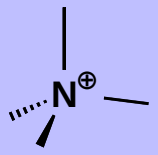
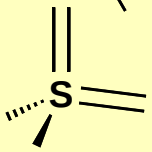
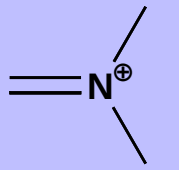
Silicium silicon



Kohlenstoff carbon

Anteil in der Erdhülle:	**25,8 %**	**0,087 %**
Aggregatszustand der Oxide:	**SiO_2 ist fest (Quarz)**	**CO_2 ist gasförmig**
Stabilität der Oxide:	**ΔH_f^o (SiO_2) = -909 kJ/mol**	**ΔH_f^o (CO_2) = -394 kJ/mol**
Stabilität der Ketten:	**D_{298}^o (Si-Si) = 302 kJ/mol**	**D_{298}^o (C–C) = 345 kJ/mol D_{298}^o (C=C) = 615 kJ/mol D_{298}^o (C≡C) = 811 kJ/mol**

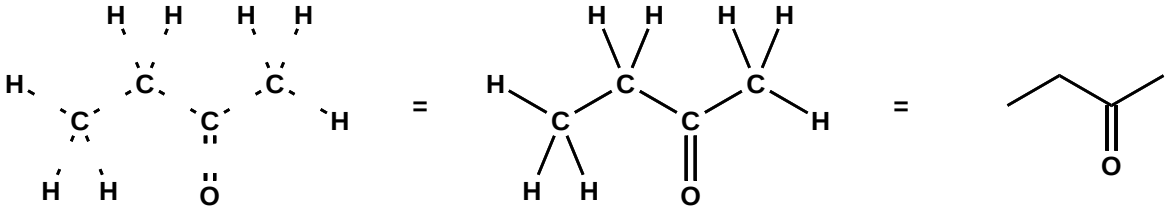
Bauelemente Organischer Moleküle

		Heteroatome				
C	H	O	N	X = F,Cl,Br,I	S	P
						
						
						
						
						
						

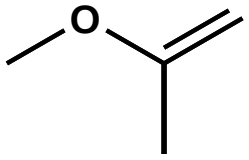
Zusammenbau der Bauelemente

Summenformel C_4H_8O

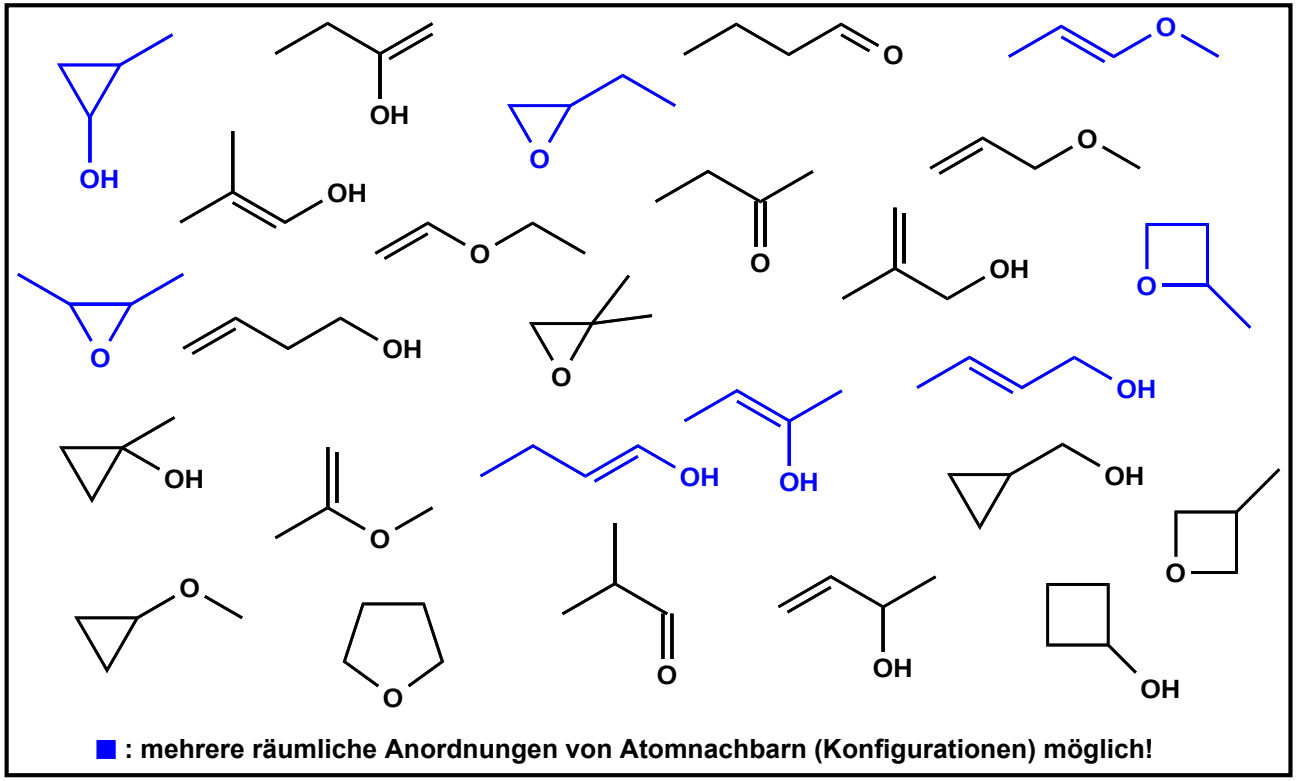
26 Moleküle können gebaut werden:



Wo steckt

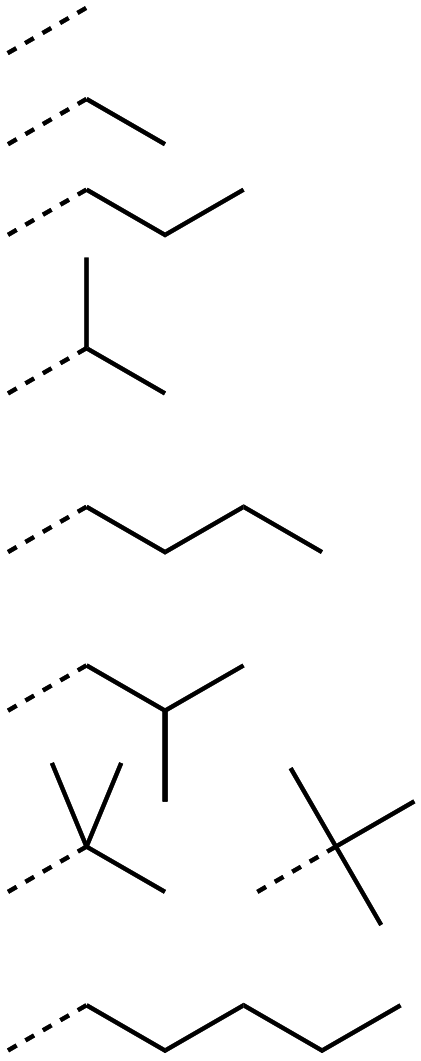


?

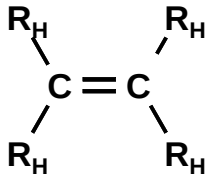
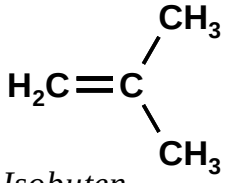
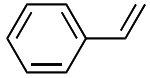
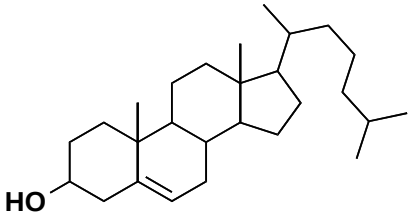
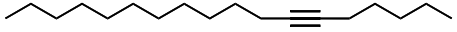
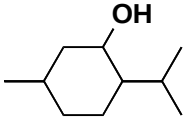
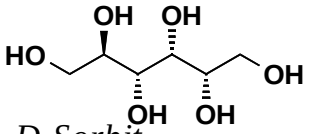
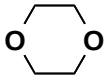
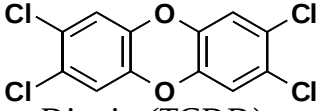


Alkylketten als Strukturbausteine

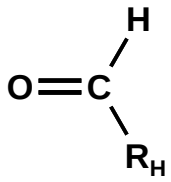
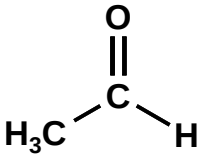
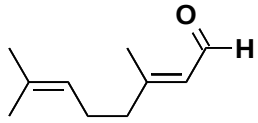
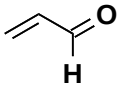
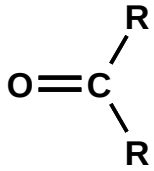
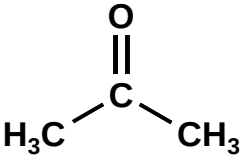
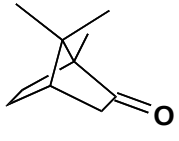
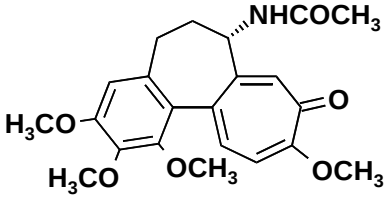
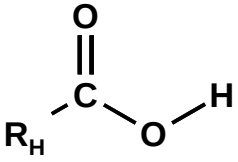
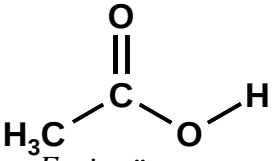
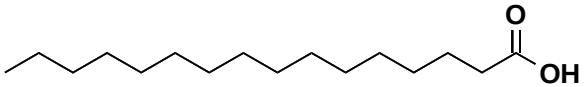
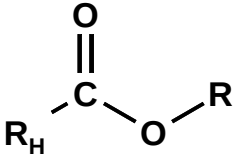
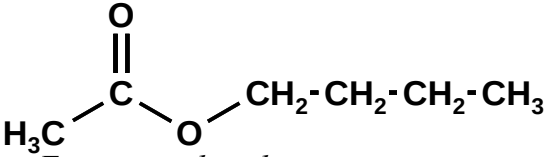
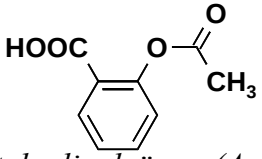
H_3C----	Methyl-	Me
H_3C-CH_2----	Ethyl-	Et
$H_3C-CH_2-CH_2$----	n-Propyl-	n-Pr
H_3C \ CH----- / H_3C	Isopropyl-	i-Pr
$H_3C-CH_2-CH_2-CH_2$----	n-Butyl-	n-Bu
H_3C \ $CH-CH_2$---- / H_3C	Isobutyl-	i-Bu
H_3C | H_3C-C---- | H_3C	tert.-Butyl-	t-Bu
$H_3C-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2$----	Pentyl- (Amyl-)	



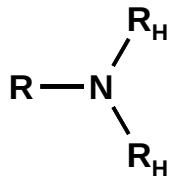
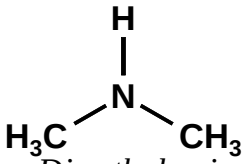
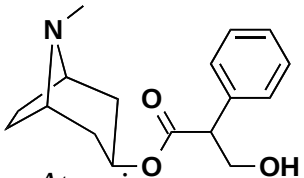
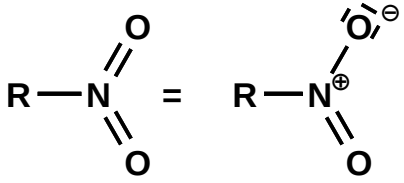
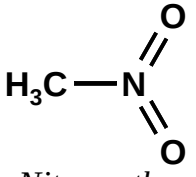
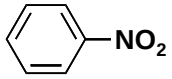
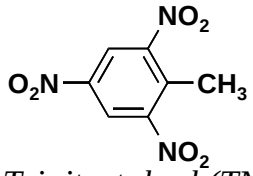
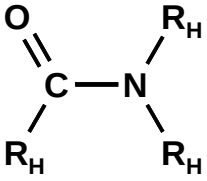
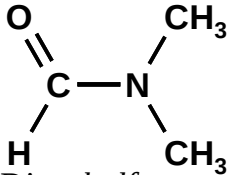
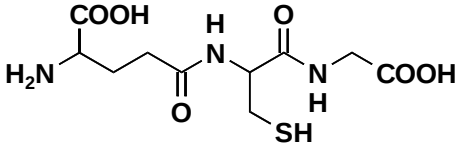
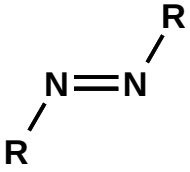
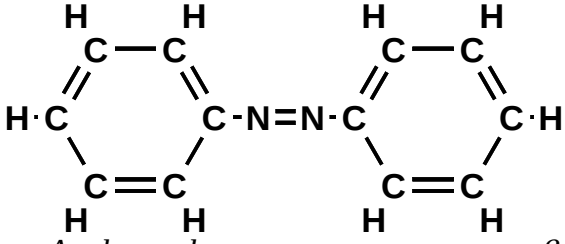
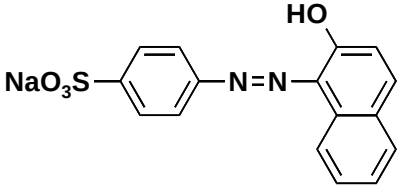
Funktionelle Gruppen 1

Verbindungs-klasse	Funktionelle Gruppe	R = C-Rest R_H = C-Rest / H	Beispiele
Alkene			 *Isobuten*  *Styrol*  *Cholesterin (Cholesterol)*
Alkine			 *Ethin (Acetylen)*  *6-Octadecin*
Alkohole			 *Ethanol*  *Menthol*  *D-Sorbit*
Ether			 *Ethylmethylether*  *Dioxan*  *Dioxin (TCDD)*

Funktionelle Gruppen 2

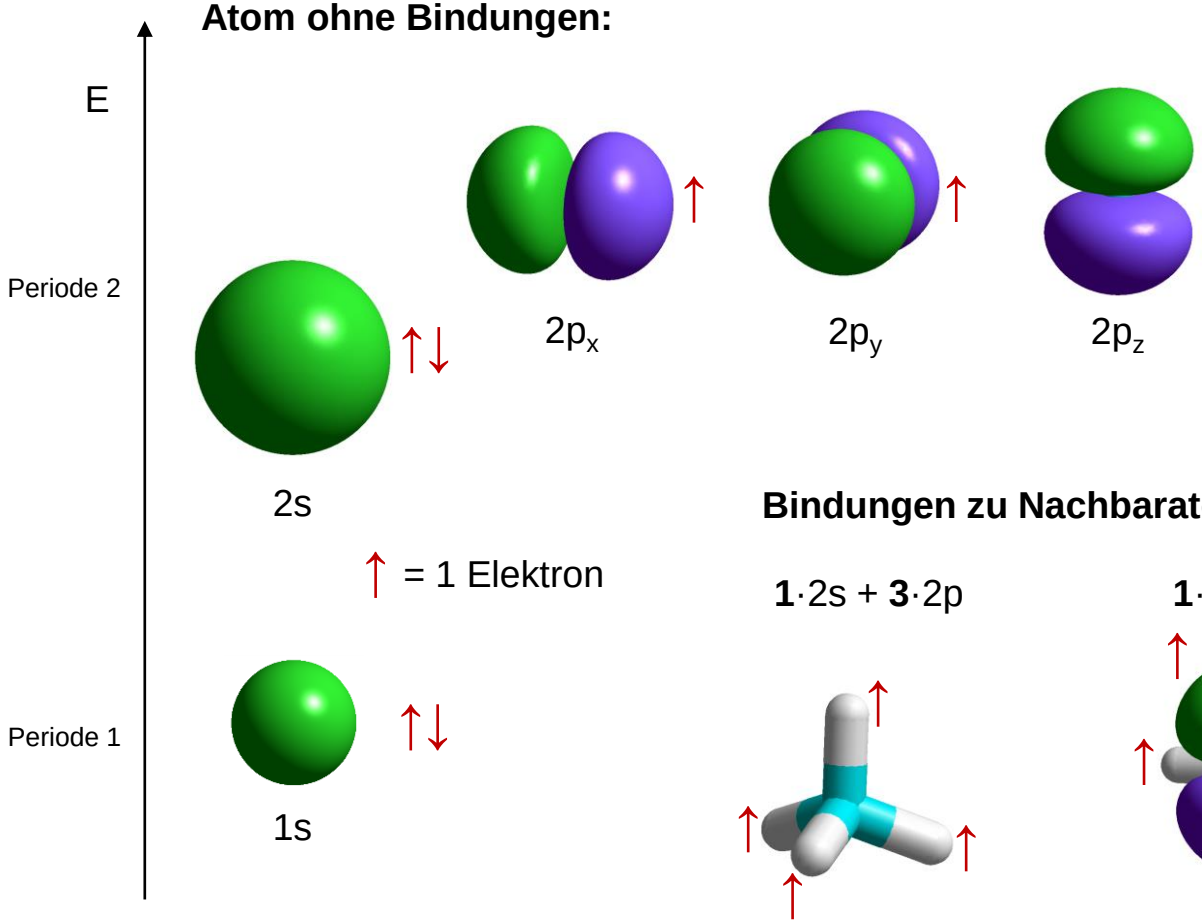
Verbindungs-klasse	Funktionelle Gruppe	R = C-Rest R_H = C-Rest / H	Beispiele
Aldehyde			 *Acetaldehyd*  *Citral a (Geranial)*  *Acrolein*
Ketone			 *Aceton*  *Campher*  *Colchicin*
Carbonsäuren			 *Essigsäure*  *Palmitinsäure*
Ester			 *Essigsäurebutylester*  *Acetylsalicylsäure (Aspirin)*

Funktionelle Gruppen 3

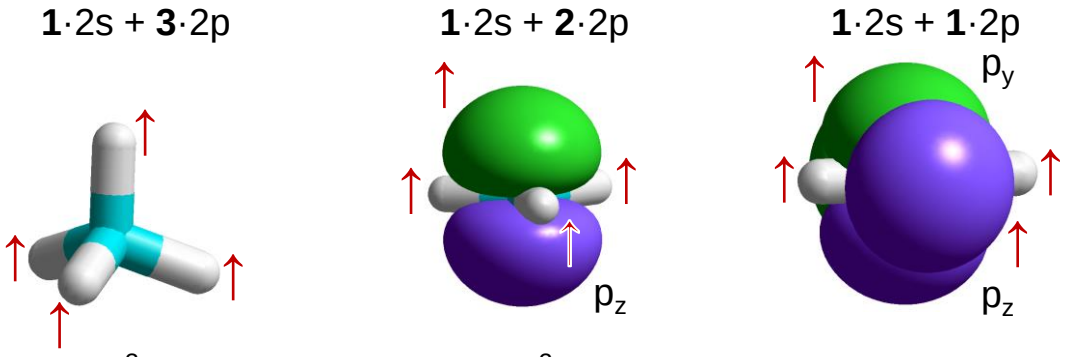
Verbindungs-klasse	Funktionelle Gruppe	R = C-Rest R_H = C-Rest / H	Beispiele
Amine			 *Dimethylamin*  *Atropin*
Nitro-verbindungen			 *Nitromethan*  *Nitrobenzol*  *Trinitrotoluol (TNT)*
Amide			 *Dimethylformamid*  *Glutathion (γ-Glu-Cys-Gly-Peptid)*
Azo-verbindungen			 *Azobenzol*  *β-Naphtholorange (Orange II)*

Elektronische Struktur des C-Atoms

Atom ohne Bindungen:



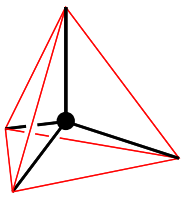
Bindungen zu Nachbaratomen (Hybridisierung):

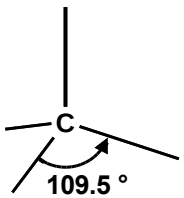


Elektronenkonfiguration:
C = $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$

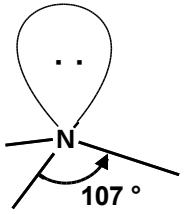
Kern:
6 Protonen + 6(7) Neutronen

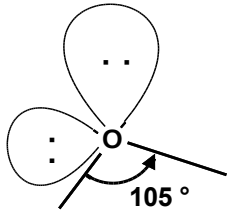
Geometrie der Bauelemente: sp^3-C-Atome



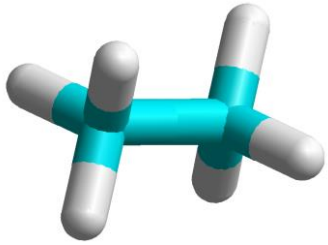


Gesättigte C-Atome,
sp^3-Hybridisierung
⇨ Tetraeder

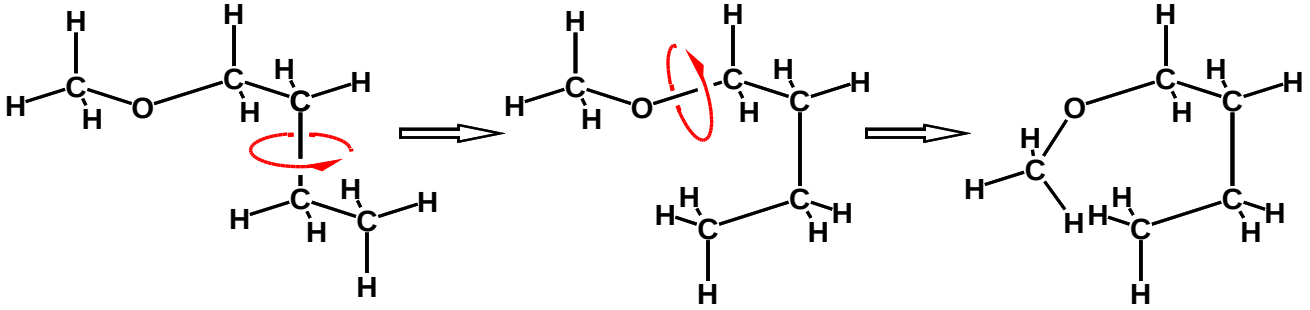




O, N: freie Elektronenpaare
benötigen mehr Platz
⇨ kleinerer Winkel

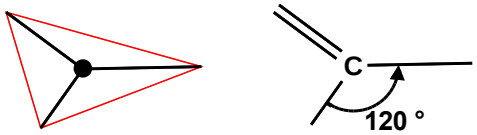


σ-Bindungen

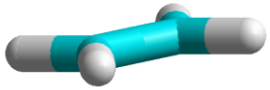


Bei Normaltemperatur wandeln sich die obigen Strukturen (und weitere) durch interne Rotation beliebig ineinander um. Die Strukturen beschreiben damit *nicht unterscheidbare Moleküle*.
Die freie Rotierbarkeit der Einfachbindungen kann eingeschränkt oder aufgehoben sein durch:
a) sperrige Gruppen oder
b) partiellen Doppelbindungscharakter der Einfachbindungen

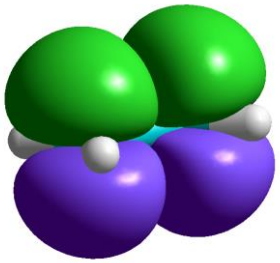
Geometrie der Bauelemente: sp^2-C-Atome



Ungesättigte C-Atome
sp^2-Hybridisierung
⇨ planar-trigonal

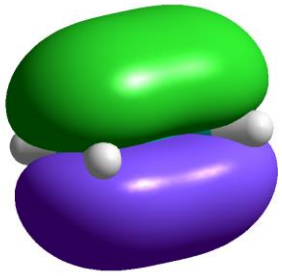


σ-Bindungen

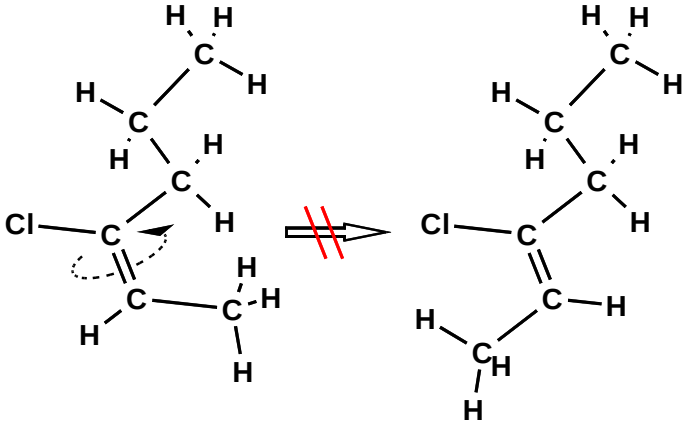


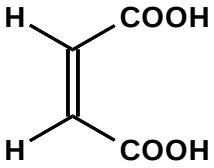
p_z-Atomorbitale

⇨

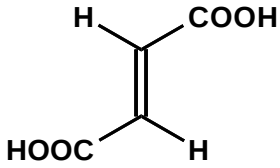


π-Molekülorbital
Doppelbindung





Maleinsäure
***cis* (Z)**

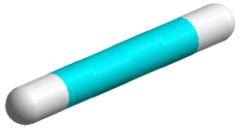


Fumarsäure
***trans* (E)**

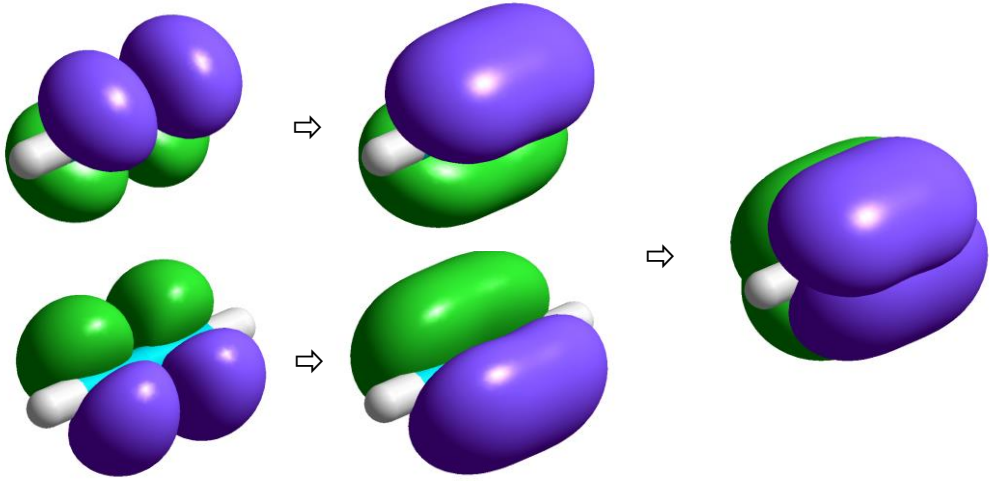
Die Nachbarn von Kohlenstoff-Doppelbindungen liegen in einer *Ebene*.
Die *interne Rotation* der Molekülteile entlang der Doppelbindung ist *nicht möglich*.
Es existieren nicht ineinander umwandelbare Moleküle mit unterschiedlichen Geometrien an der C=C-Doppelbindung (cis/trans-Geometrie oder E/Z-Geometrie).
Diese Substanzen zeigen *unterschiedliche* physikalische und chemische *Eigenschaften*.

Geometrie der Bauelemente: sp-C-Atome

Ungesättigte C-Atome
sp-Hybridisierung
⇨ linear



σ-Bindungen

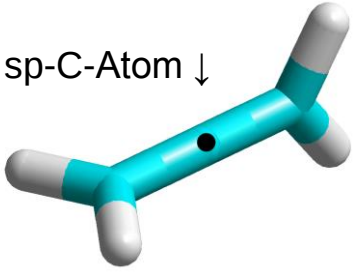


p_y-Atomorbitale
p_z-Atomorbitale

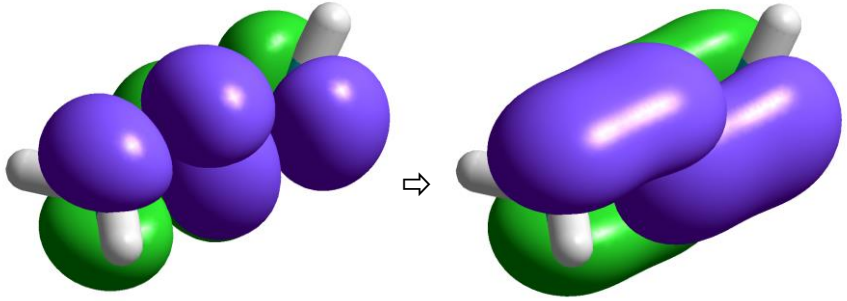
π_y-Molekülorbital
π_z-Molekülorbital

π-Molekülorbitale
Dreifachbindung

Ungesättigte C-Atome
sp^2-sp-sp^2-Hybridisierung
⇨ linear mit 90° Drehung



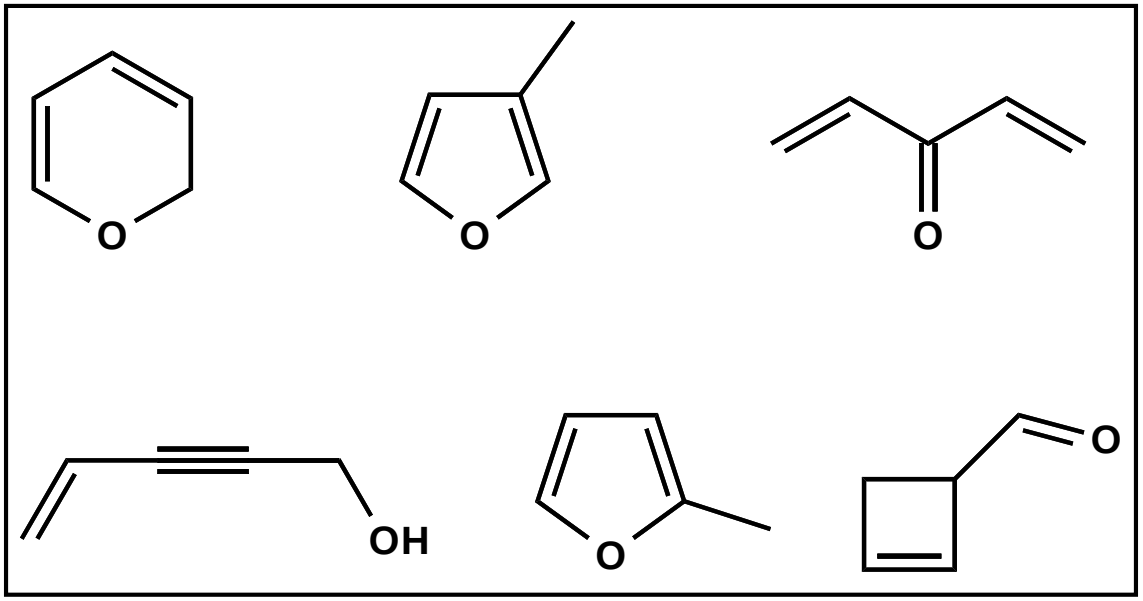
σ-Bindungen



p_z-p_{yz}-p_z-Atomorbitale

π-Molekülorbitale
2xDoppelbindung

Isomerie: Konstitution



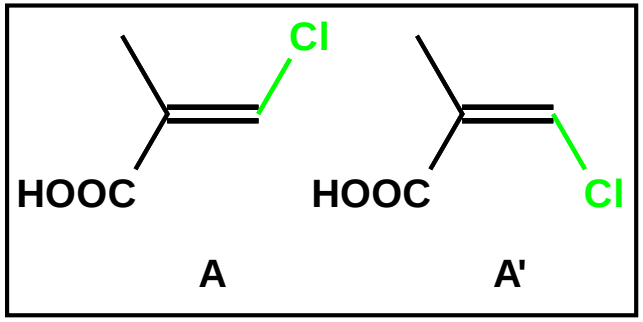
Die *Konstitution* beschreibt die Bindungsverhältnisse zwischen den Atomen eines Moleküls.

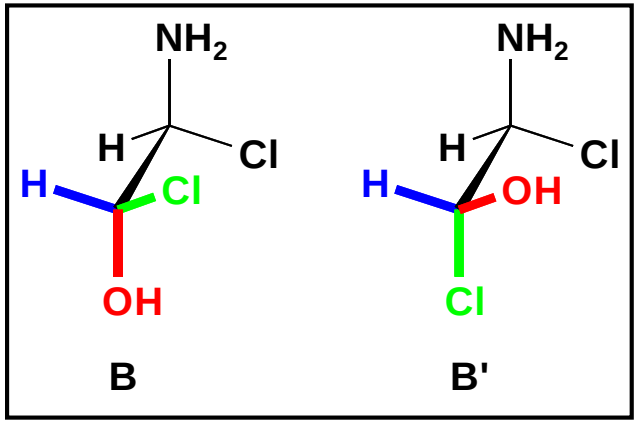
Konstitutionsisomere haben dieselbe atomare Zusammensetzung (*Summenformel*),
die Atome sind jedoch unterschiedlich miteinander verknüpft.

Die Substanzen haben meist stark *unterschiedliche* chemische und physikalische *Eigenschaften* und sind im allgemeinen *nicht* unmittelbar ineinander *umwandelbar*.

Abgebildet sind einige Konstitutionsisomere der Summenformel C_5H_6O (von insgesamt 205).

Isomerie: Konfiguration





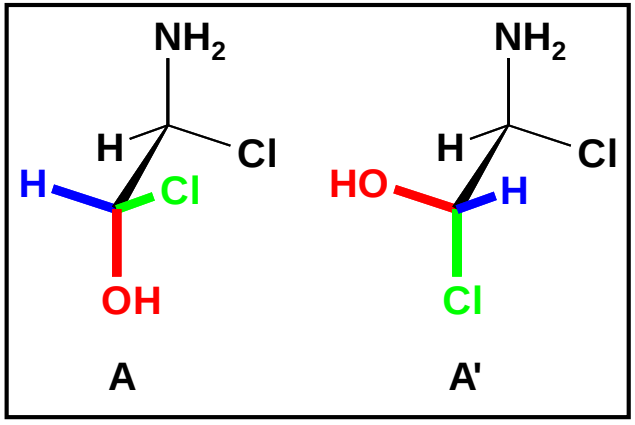
Die *Konfiguration* definiert bei gegebener Konstitution die relative *räumliche Anordnung* der Substituenten an den *Bindungsstellen*.

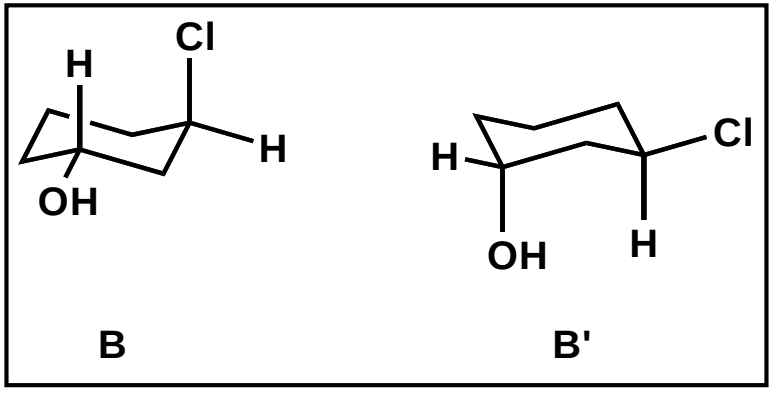
Konfigurationsisomere haben meist *ähnliche*, aber doch *unterschiedliche* chemische und physikalische *Eigenschaften*.

Unterscheidbare Konfigurationsisomere, die sich *nicht wie Bild und Spiegelbild* verhalten (siehe Chiralität), heißen *Diastereomere* (Moleküle B und B').

Konfigurationsisomere sind *nicht* einfach ineinander *umwandelbar*, entstehen bei chemischen Reaktionen oft als Gemische und müssen, um sie in reiner Form zu erhalten, meist auf *unterschiedlichen Synthesewegen* hergestellt werden.

Isomerie: Konformation





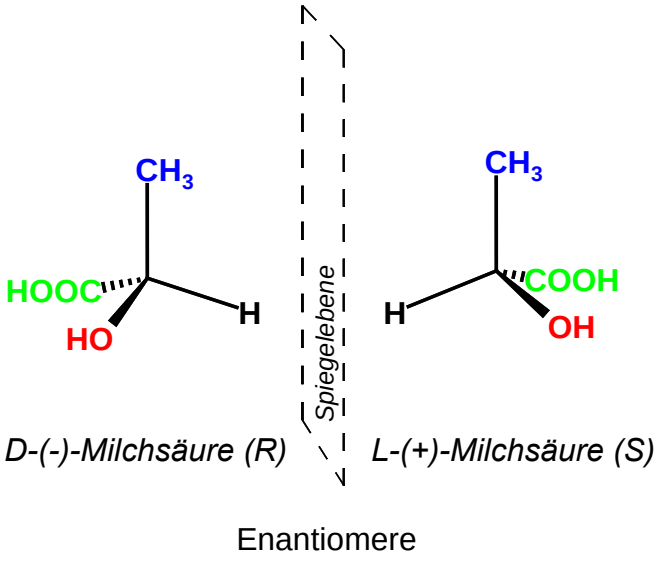
Die *Konformation* beschreibt die unterschiedlichen räumlichen Anordnungen der Molekülteile, die sich durch *Rotation* um *Einfachbindungen* ergeben (z.B. Moleküle A und A').

Im allgemeinen sind unterschiedliche Konformationen eines Moleküls *nicht* einzeln *beobachtbar*, sondern sie wandeln sich ständig ineinander um. Sie sind unter Normalbedingungen *nicht unterscheidbar*.

Die makroskopischen *Eigenschaften* einer Verbindung ergeben sich aus der jeweiligen *Mischung* der Eigenschaften der Konformationen, wobei jede gemäß ihrem relativen Anteil (Stabilität!) beiträgt.

In *Ringstrukturen* führt der Wechsel zwischen unterschiedlichen Konformationen zu einem Durchschwingen (*Flip*) des Ringes zusammen mit *Ortswechsel* der Substituenten (Moleküle B und B').

Isomerie: Chiralität



Enantiomere

Achirale Objekte




Chirale Objekte




Die Geometrie der Molekülbauelemente erlaubt den Aufbau von Molekülen *gleicher Konstitution*, die mit ihrem eigenen *Spiegelbild nicht identisch* sind. Solche Moleküle sind *chiral*.

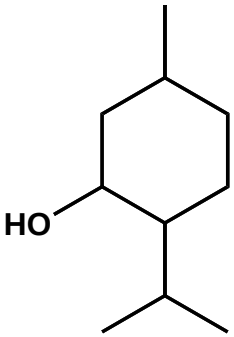
Die Paare aus Struktur und nicht identischer Spiegelbildstruktur nennt man dann *Enantiomere*.

Enantiomere zeigen in vielen physikalischen und chemischen Experimenten *identische Eigenschaften* (wie z.B. Reaktivität, Schmelzpunkt, Siedepunkt, Löslichkeit, Dichte etc.).

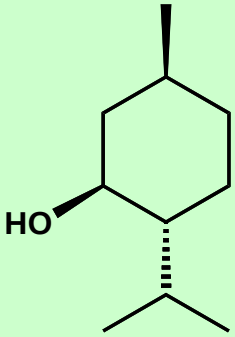
Lediglich in Kombination *mit* anderen *chiralen Objekten* (z.B. Teile des polarisierten Lichts, andere chirale Moleküle, wie Proteine o.ä.) verhalten sie sich *unterschiedlich*.

Im Prinzip sind *fast alle Gegenstände* unserer Umwelt *chiral*. Real existierende *Paare von Enantiomeren* (wie z.B. unsere Hände/Füße, oder links- und rechtsdrehende Schrauben) sind *seltener*.

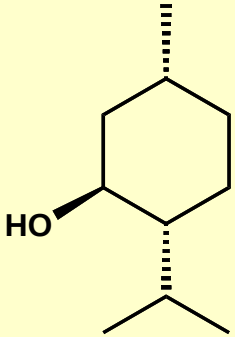
Isomerie: Stereozentren (Beispiel Menthol)



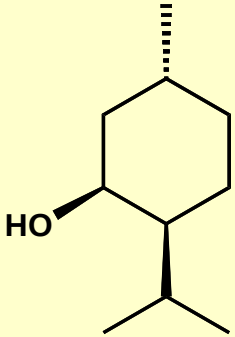
Konstitution



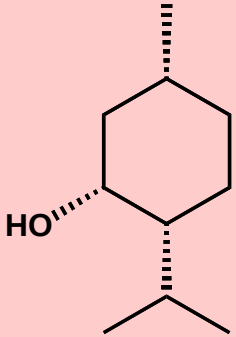
(+)-Menthol



(+)-Isomenthol

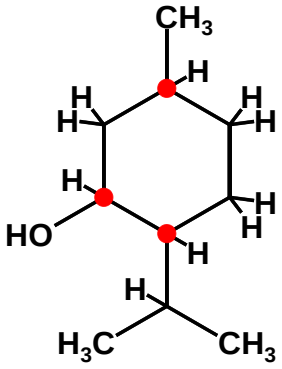


(+)-Neomenthol

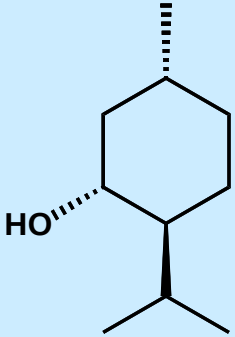


(+)-Neoisomenthol

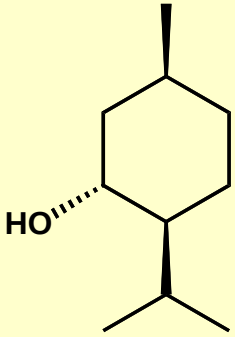
Spiegelebene



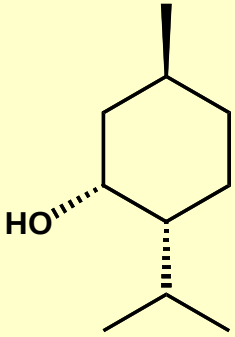
Stereozentren



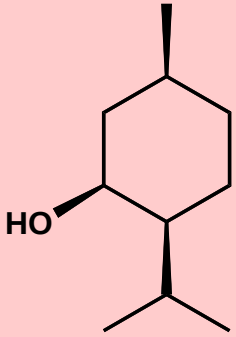
(-)-Menthol



(-)-Isomenthol



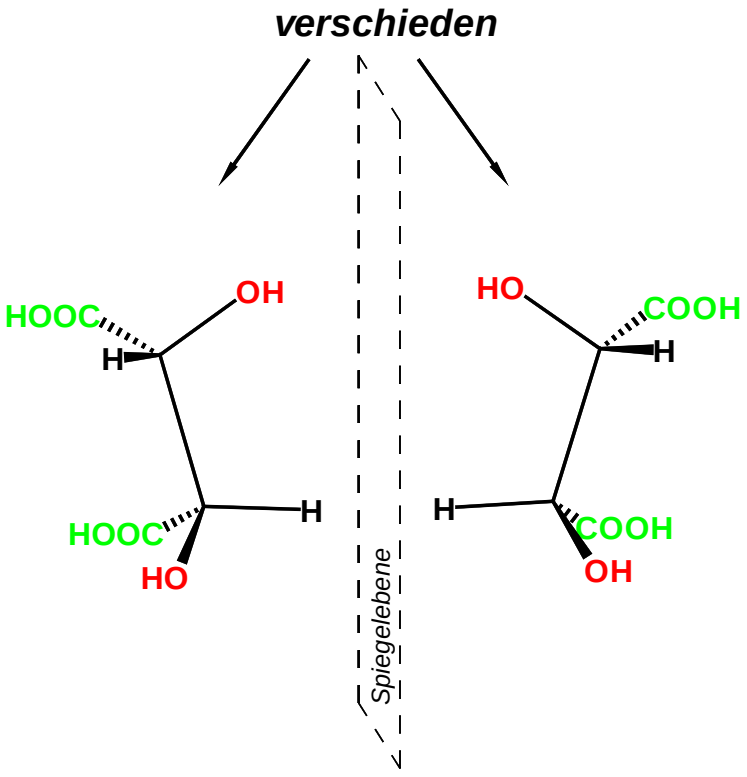
(-)-Neomenthol



(-)-Neoisomenthol

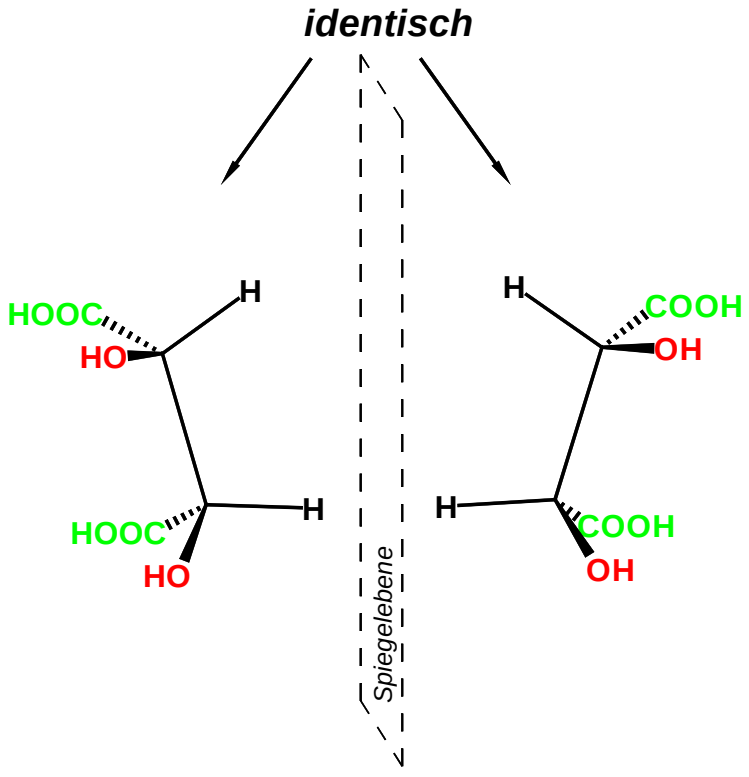
Stark frisch minzig süß | Schwach frisch minzig süß | Dumpf muffig | Campher

Isomerie: Enantiomere und Mesoverbindungen



L-(+)-Weinsäure *D-(-)-Weinsäure*

chiral

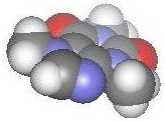


meso-Weinsäure

nicht chiral

Enantiomere sind *nicht-identische* Strukturen, die sich wie *Bild und Spiegelbild* zueinander verhalten.
Mesoverbindungen haben eine *interne Symmetrieebene* oder ein Inversionszentrum.

Isomerie: Übersicht

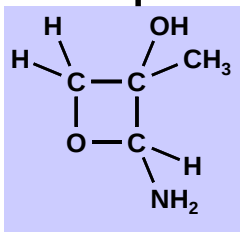
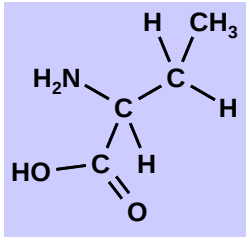
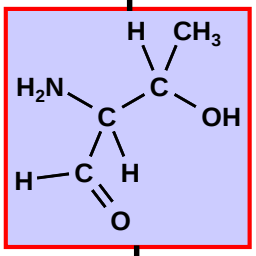
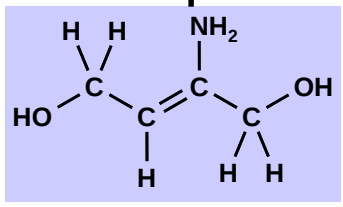


Moleküle

Summen-formeln

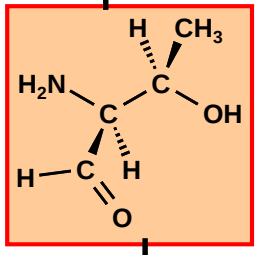
$C_9H_8O_4$ $C_4H_9NO_2$ C_2H_6O C_6H_6 $C_8H_{10}N_4O_2$ + . . .

Konstitutions-isomere

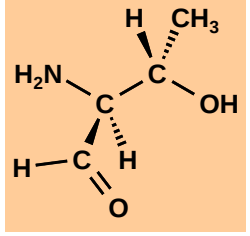





+ . . .

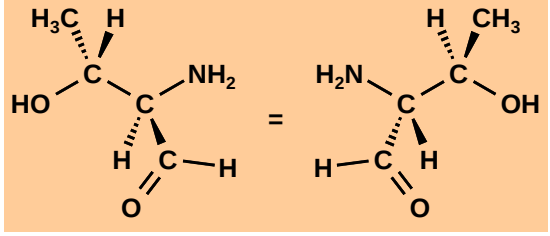
Konfigurations-isomere



Diastereo-mere

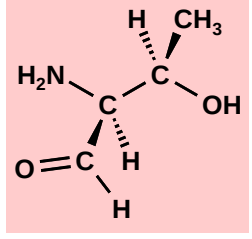
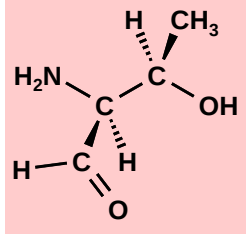
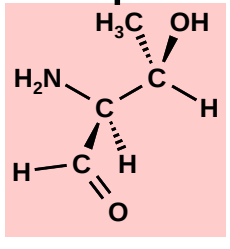
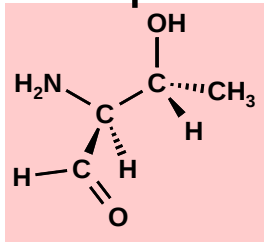


Enantio-mere



+ . . .

Konformations-isomere

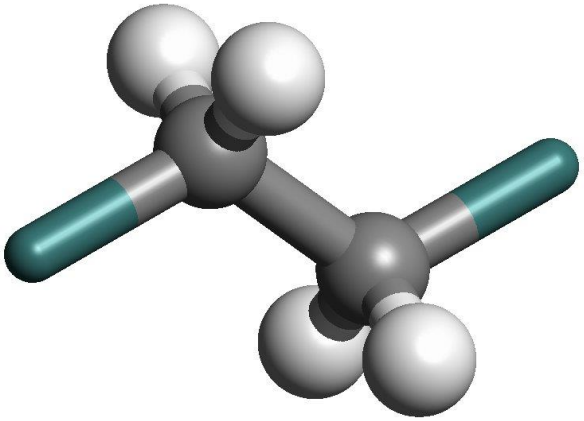





+ . . .

Bei Raumtemperatur normalerweise nicht unterscheidbar, da die Umwandlung permanent erfolgt

Kohlenwasserstoffe

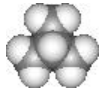
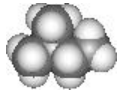
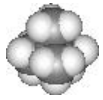
Alkane

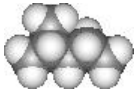
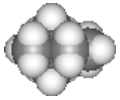
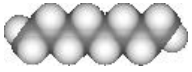


Andere Bezeichnungen: **gesättigte Kohlenwasserstoffe**
Paraffine

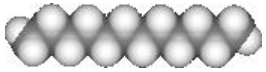
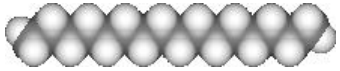
Allgemeine Summenformel: C_nH_{2n+2}

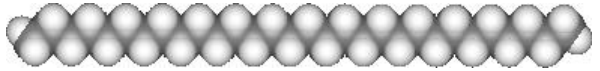
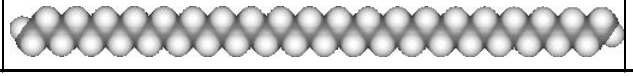
Alkane (Tabelle 1)

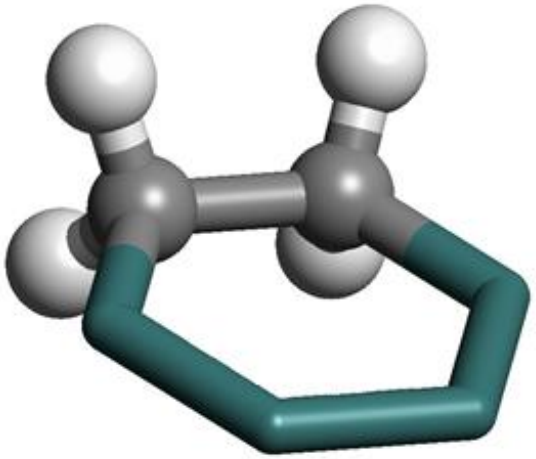
Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Methan CH_4		-182	-164
Ethan C_2H_6		-183	-89
Propan C_3H_8		-190	-42
Butane (insgesamt 2 Isomere)			
Butan C_4H_{10}		-138	-1
Isobutan C_4H_{10}		-159	-12
Pentane (insgesamt 3 Isomere)			
Pentan C_5H_{12}		-130	36
Isopentan C_5H_{12}		-160	28
2,2-Dimethyl-propan C_5H_{12}		-17	10

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Hexane (insgesamt 5 Isomere)			
Hexan C_6H_{14}		-95	69
Isohexan C_6H_{14}		-154	60
3-Methyl-pentan C_6H_{14}		-6	63
2,2-Dimethyl-butan C_6H_{14}		-100	50
2,3-Dimethyl-butan C_6H_{14}		-129	58
Heptane (insgesamt 9 Isomere)			
Heptan C_7H_{16}		-91	98
Octane (insgesamt 18 Isomere)			
Octan C_8H_{18}		-57	126
2,2,4-Trimethyl-pentan C_8H_{18}		-107	99

Alkane (Tabelle 2)

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Nonane (insgesamt 35 Isomere) und längerkettige Alkane			
Nonan C_9H_{20}	$H_3C-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$ 	-51	151
Decan $C_{10}H_{22}$	$H_3C-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$ 	-30	174
Dodecan $C_{12}H_{26}$	$H_3C-[CH_2]_{10}-CH_3$ 	-10	216
Tetra-decan $C_{14}H_{30}$	$H_3C-[CH_2]_{12}-CH_3$ 	6	254
Hexa-decan $C_{16}H_{34}$	$H_3C-[CH_2]_{14}-CH_3$ 	18	287
Octadecan $C_{18}H_{38}$	$H_3C-[CH_2]_{16}-CH_3$ 	28	316
Eicosan $C_{20}H_{42}$	$H_3C-[CH_2]_{18}-CH_3$ 	37	343

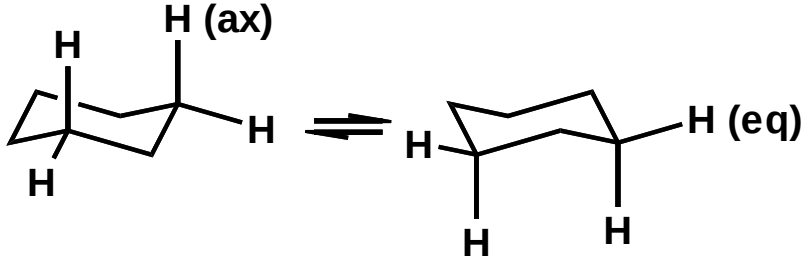
Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Langkettige Alkane			
Penta-cosan $C_{25}H_{52}$	$H_3C-[CH_2]_{23}-CH_3$ 	53	402
Triacontan $C_{30}H_{62}$	$H_3C-[CH_2]_{28}-CH_3$ 	66	450
Tetra-contan $C_{40}H_{82}$	$H_3C-[CH_2]_{38}-CH_3$ 	81	-



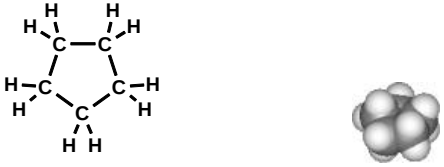
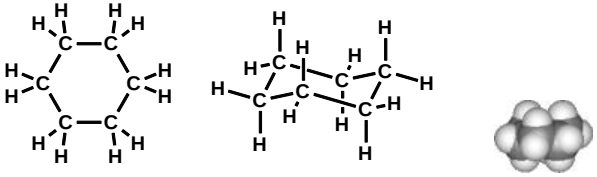
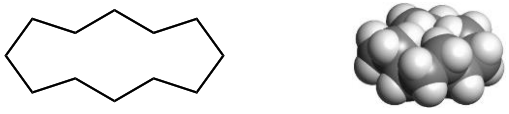
Allgemeine Summenformel: C_nH_{2n}

Gespannte Ringe: 3, 4, ab 7 C-Atome im Ring
Spannungsfrei: 5 oder 6 C-Atome im Ring

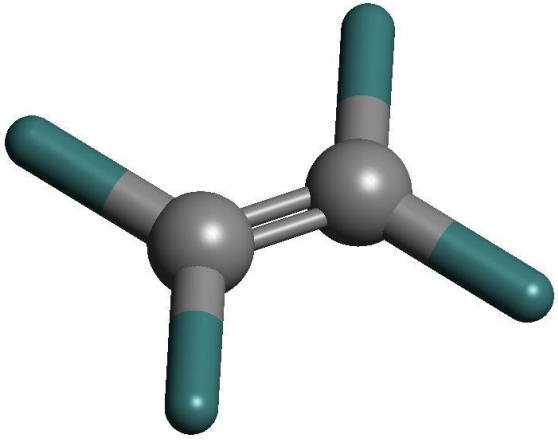
Konformationen:



Cycloalkane (Tabelle)

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Cyclo-propan C_3H_6		-128	-33
Cyclo-butan C_4H_8		-50	12
Cyclo-pentan C_5H_{10}		-94	49
Cyclo-hexan C_6H_{12}		7	81
Cyclo-dodecan $C_{12}H_{24}$		61	247

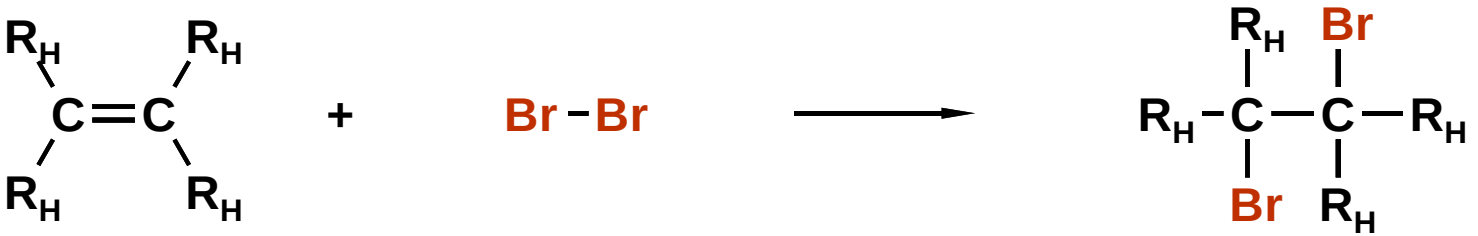
Alkene



Andere Bezeichnungen: **ungesättigte Kohlenwasserstoffe**
Olefine

Allgemeine Summenformel: C_nH_{2n}

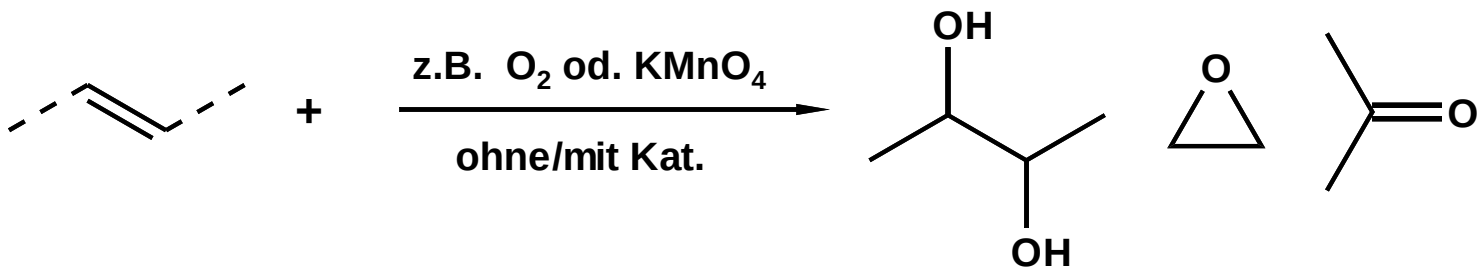
Addition:



meist farblos *rotbraun* *meist farblos*

Auch mit Cl_2, I_2, HCl, HBr, HI, H_2O, H_2SO_4, H_2 etc.

Oxidation:

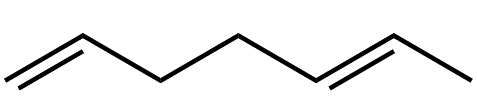


Oxidationsprodukte

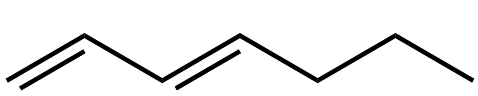
Alkene (Tabelle)

Name Summen- formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (°C)	Kp (°C)
Ethen C_2H_4		-169	-104
Propen C_3H_6		-185	-47
Butene (insgesamt 4 Isomere)			
1-Buten C_4H_8		-185	-6
trans-2- Buten C_4H_8		-106	1
cis-2- Buten C_4H_8		-139	4
Isobuten C_4H_8		-140	-7

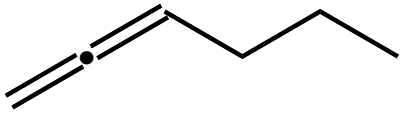
Polyalkene und cyclische Alkene



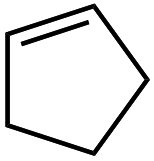
isolierte Doppelbindungen



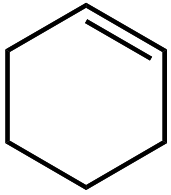
konjugierte Doppelbindungen energetisch günstiger stabiler



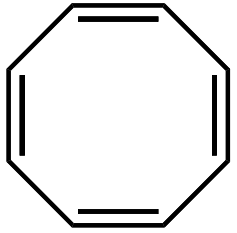
kumulierte Doppelbindungen



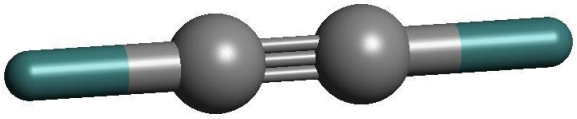
Cyclopenten



Cyclohexen



Cyclooctatetraen



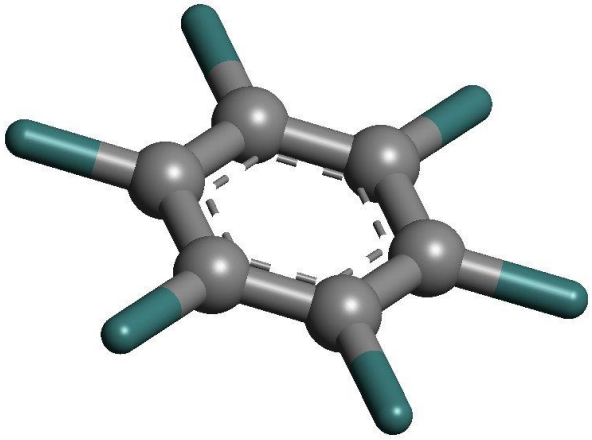
Andere Bezeichnungen: **Acetylenverbindungen**

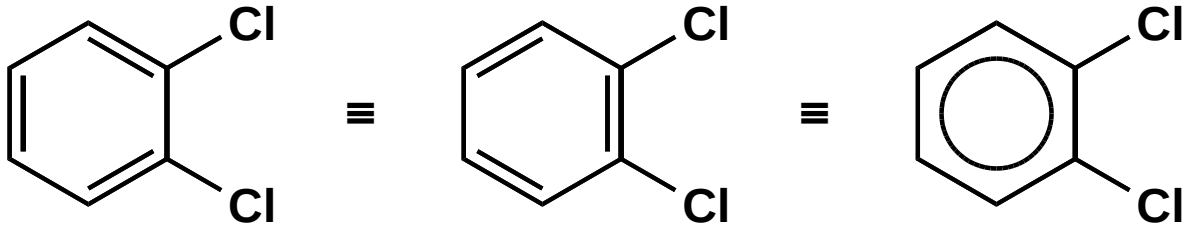
Allgemeine Summenformel: C_nH_{2n-2}

Alkine (Tabelle)

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Ethin C_2H_2	$H-C\equiv C-H$ 	-81	-84 (subl.)
Propin C_3H_4	$H-C\equiv C-CH_3$ 	-102	-23
Butine (insgesamt 2 Isomere)			
1-Butin C_4H_6	$H-C\equiv C-CH_2-CH_3$ 	-126	8
2-Butin C_4H_6	$H_3C-C\equiv C-CH_3$ 	-32	27

YouTube

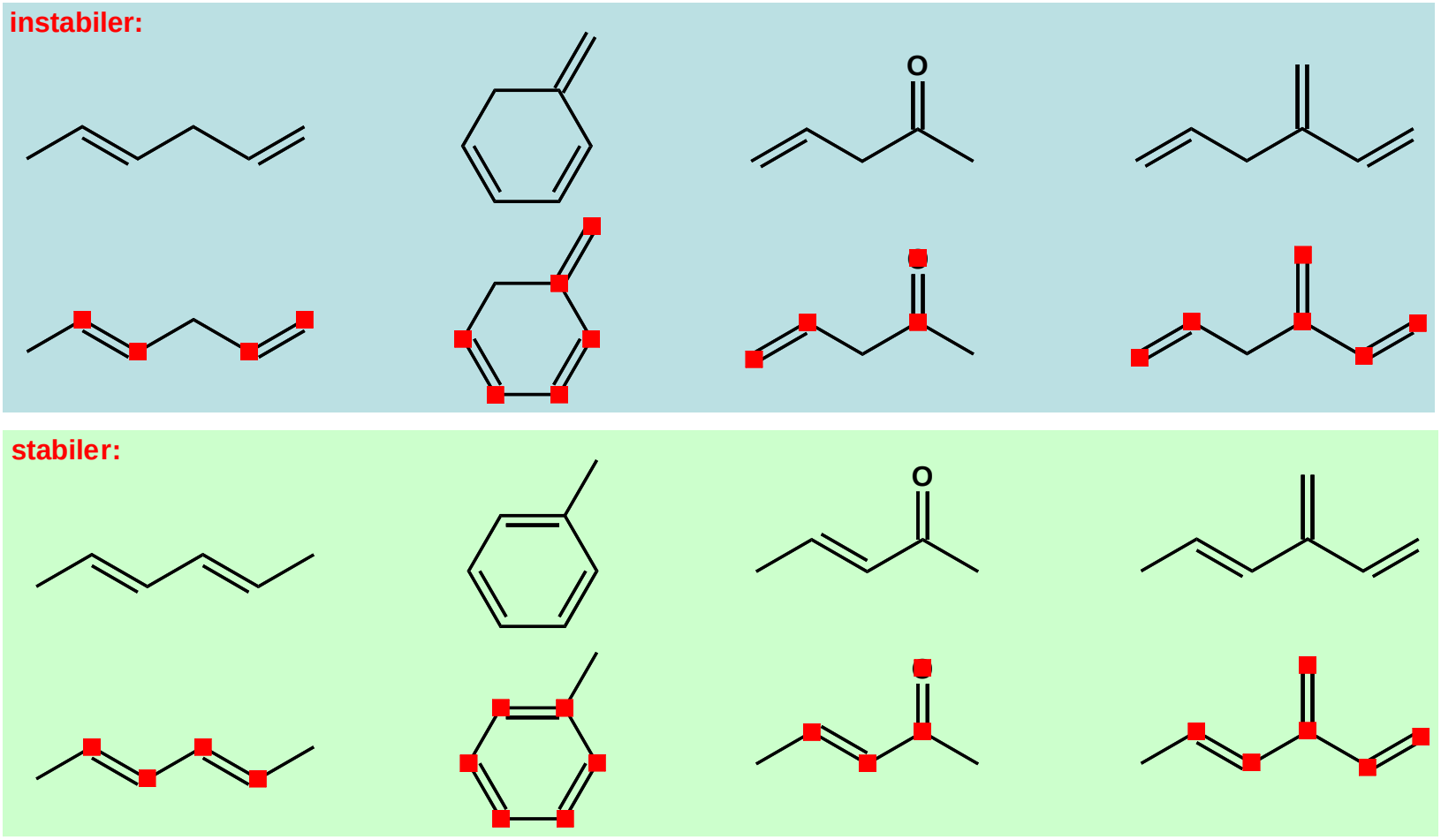




"Einhorn" *"Drache"* *Nashorn*

fiktiv *real*

Resonanzstabilisierung, Mesomerie



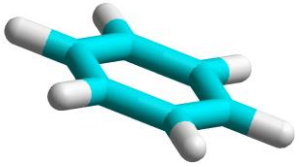
Die Moleküle im unteren grünen Feld besitzen eine *größere Stabilität* als die jeweils vergleichbaren Moleküle im oberen blauen Feld.
Sie haben eine **größere Zahl unmittelbar benachbarter sp²-Atome mit einem p_z-Orbital**, weisen damit ein größeres *resonanzfähiges π-System* auf (*Mesomerie*) oder sind aromatisch.

Historisch:

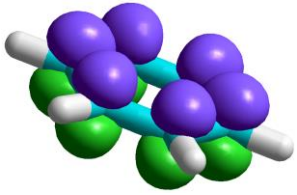
Aromatisch sind ungesättigte Verbindungen, die kein Brom addieren.

Hückelregel:

Voraussetzung für **Aromatizität** ist ein **ebener Ring** mit einem **konjugierten π-System** von **4n+2** (n=0,1,2...) **π-Elektronen**.
Gilt bei einfachen Ringsystemen, Vorsicht bei Polycyclen!

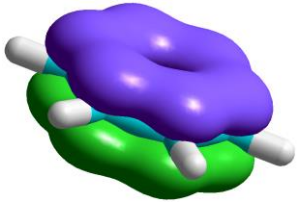


σ-Bindungen



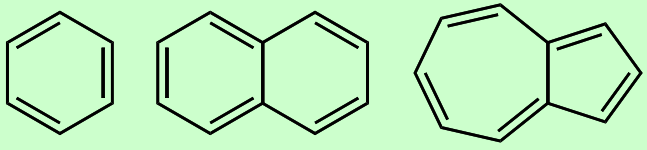
p_z-Atomorbitale

⇨

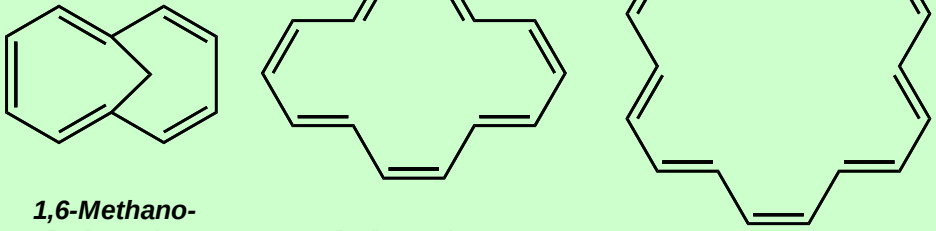


π-Molekülorbital

Aromatisch:

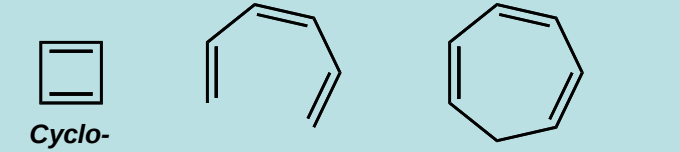


Benzol *Naphthalin* *Azulen*

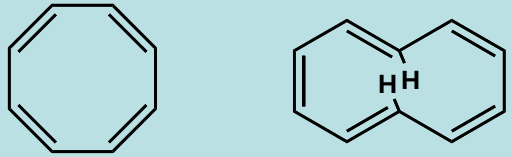


1,6-Methano-[10]annulen *[14]Annulen* *[18]Annulen*

Nicht aromatisch:

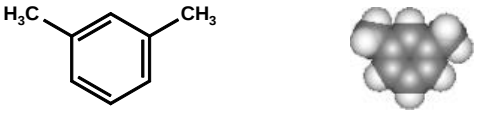
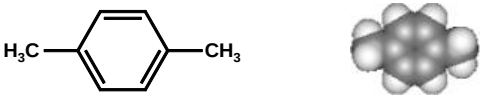


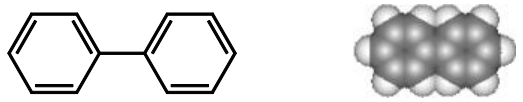
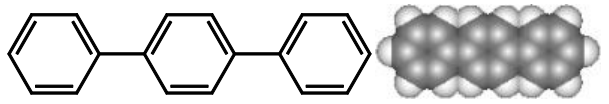
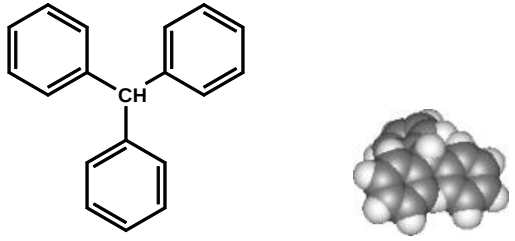
Cyclo-butadien [4]Annulen *1,3,5-Hexatrien (kein Ring)* *Cycloheptatrien (keine Ringkonjugation)*



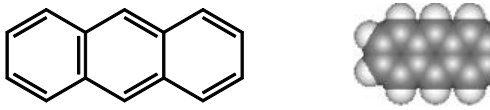
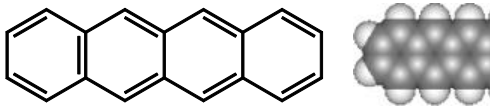
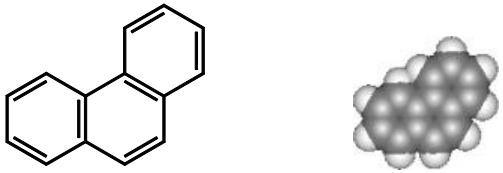
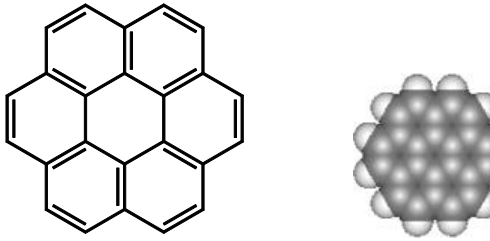
Cyclooctatetraen [8]Annulen *[10]Annulen (kein ebenes Ringsystem)*

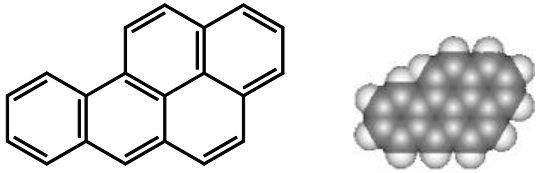
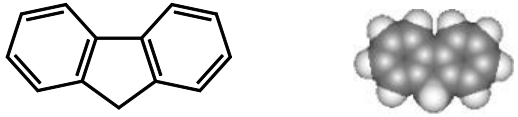
Aromaten (Tabelle 1)

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Benzol C_6H_6		6	80
Toluol C_7H_8		-95	111
Xylole (insgesamt 3 Isomere)			
o-Xylol C_8H_{10}		-25	144
m-Xylol C_8H_{10}		-48	139
p-Xylol C_8H_{10}		13	138

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Mehrkernige nichtkondensierte Aromaten			
Bipenyl $C_{12}H_{10}$		71	255
p-Ter-phenyl $C_{18}H_{14}$		171	250
Triphenyl-methan $C_{19}H_{16}$		93	359

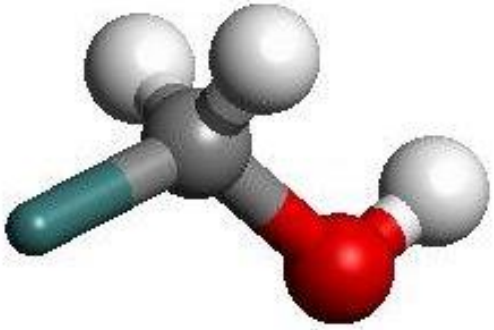
Aromaten (Tabelle 2)

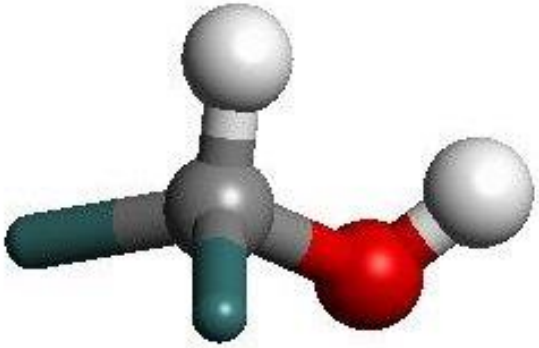
Mehrkernige kondensierte Aromaten			
Naphthalin $C_{10}H_8$		80	218
Anthracen $C_{14}H_{10}$		216	354
Naphthacen $C_{18}H_{12}$		355	-
Phenanthren $C_{14}H_{10}$		101	340
Coronen $C_{24}H_{12}$		440	-

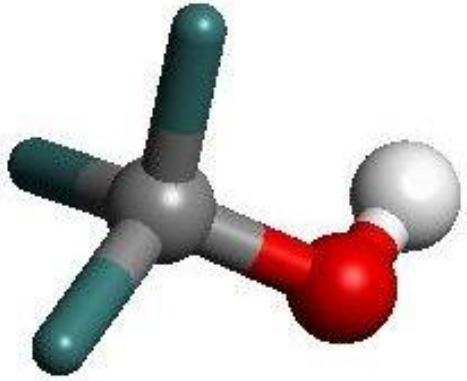
Mehrkernige kondensierte Aromaten			
3,4-Benzpyren $C_{20}H_{12}$		179	-
Azulen $C_{10}H_8$		99	270
Aromaten mit CH_2-Gruppen			
Fluoren $C_{13}H_{10}$		114	295
Inden C_9H_8		-2	181

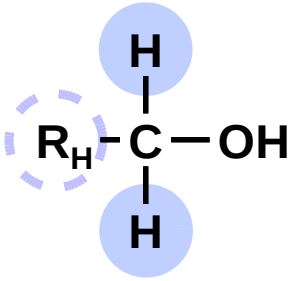
Sauerstoffverbindungen

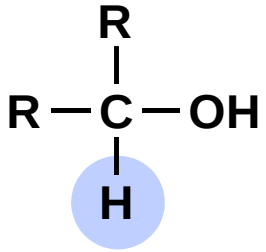
Alkohole

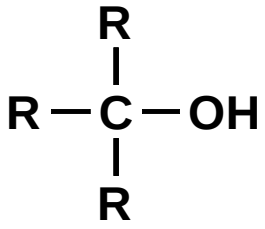












primärer Alkohol

sekundärer Alkohol

tertiärer Alkohol

R_H = C-Rest oder H

R = C-Rest

Vergleich Ethan - Methanol

Ethan

CH_3-CH_3

MW = 30 g/mol

Kp = -89 °C

Gas

nicht wasserlöslich

Methanol

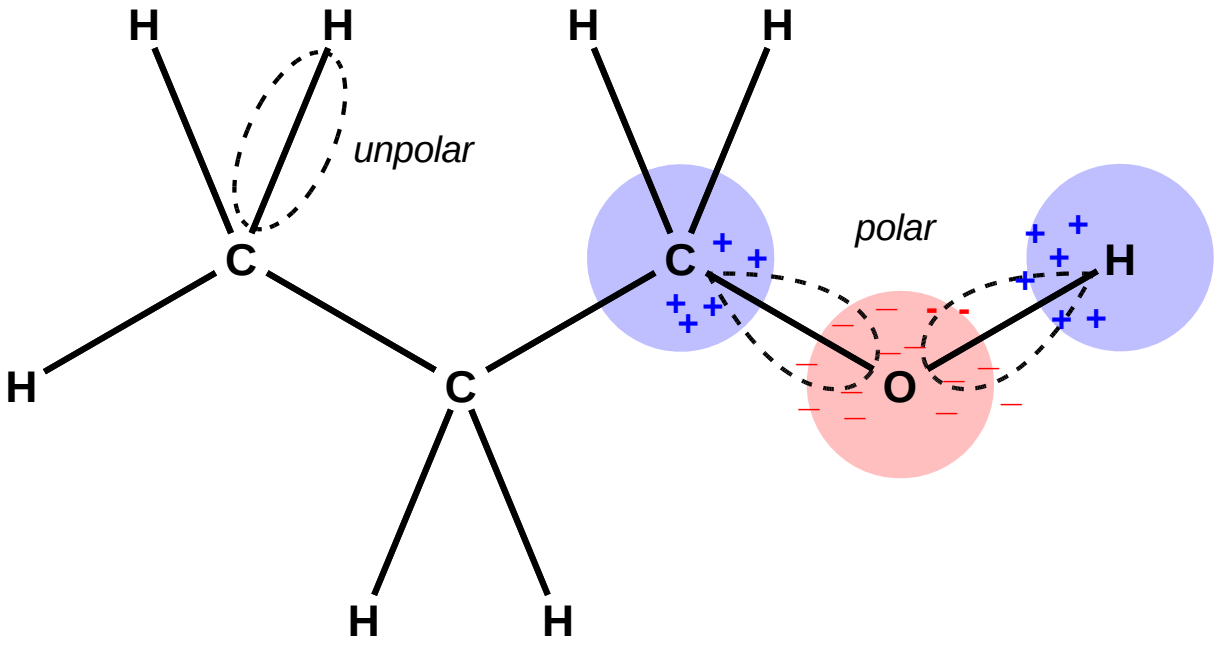
CH_3-OH

MW = 32 g/mol

Kp = +65 °C

Flüssigkeit

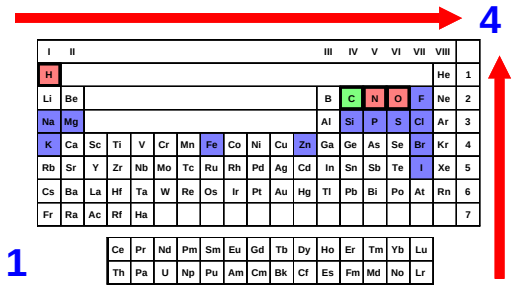
wasserlöslich



Elektronegativität:

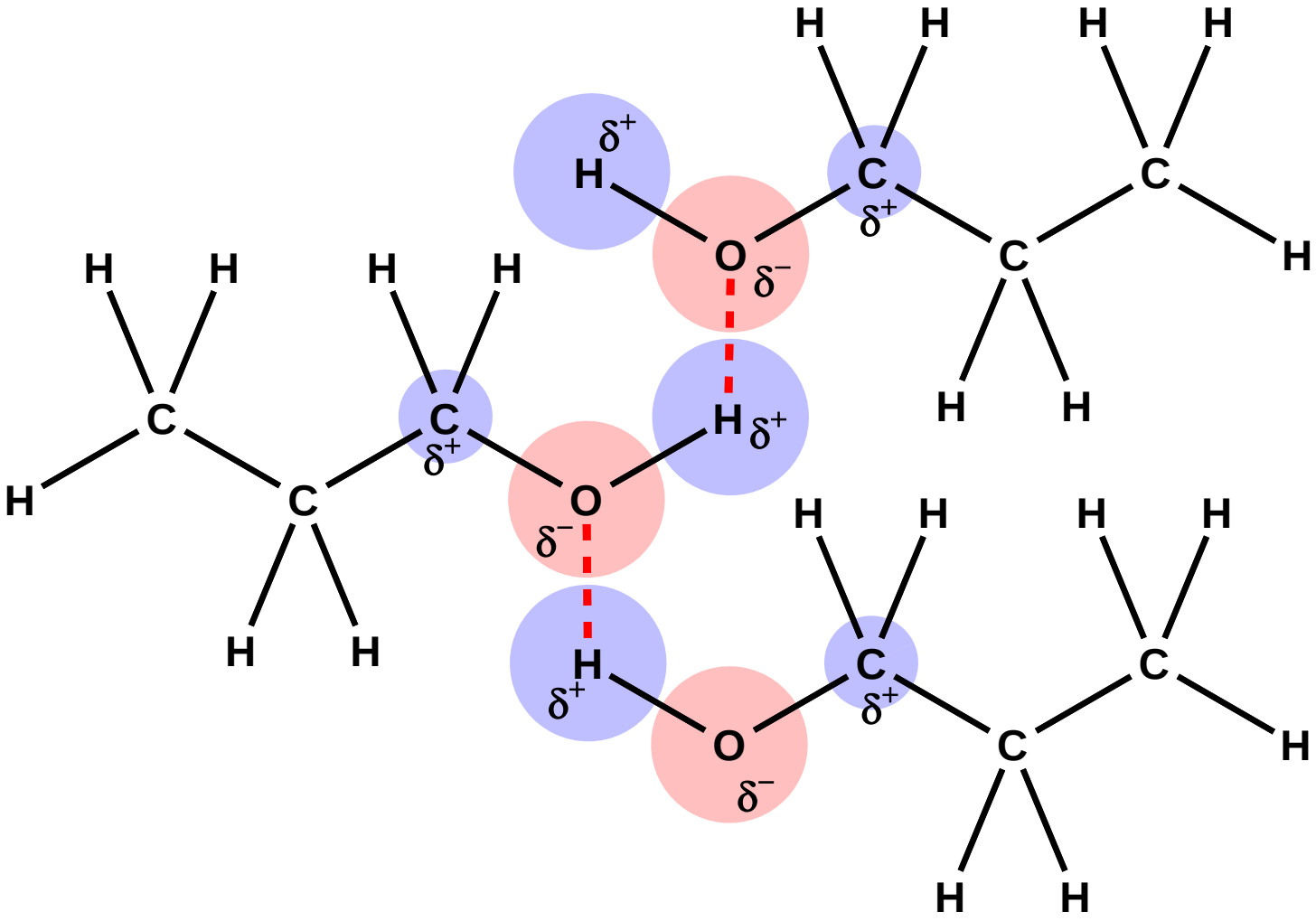
(L. Pauling)

H :	**2,20**
C :	**2,55**
O :	**3,44**

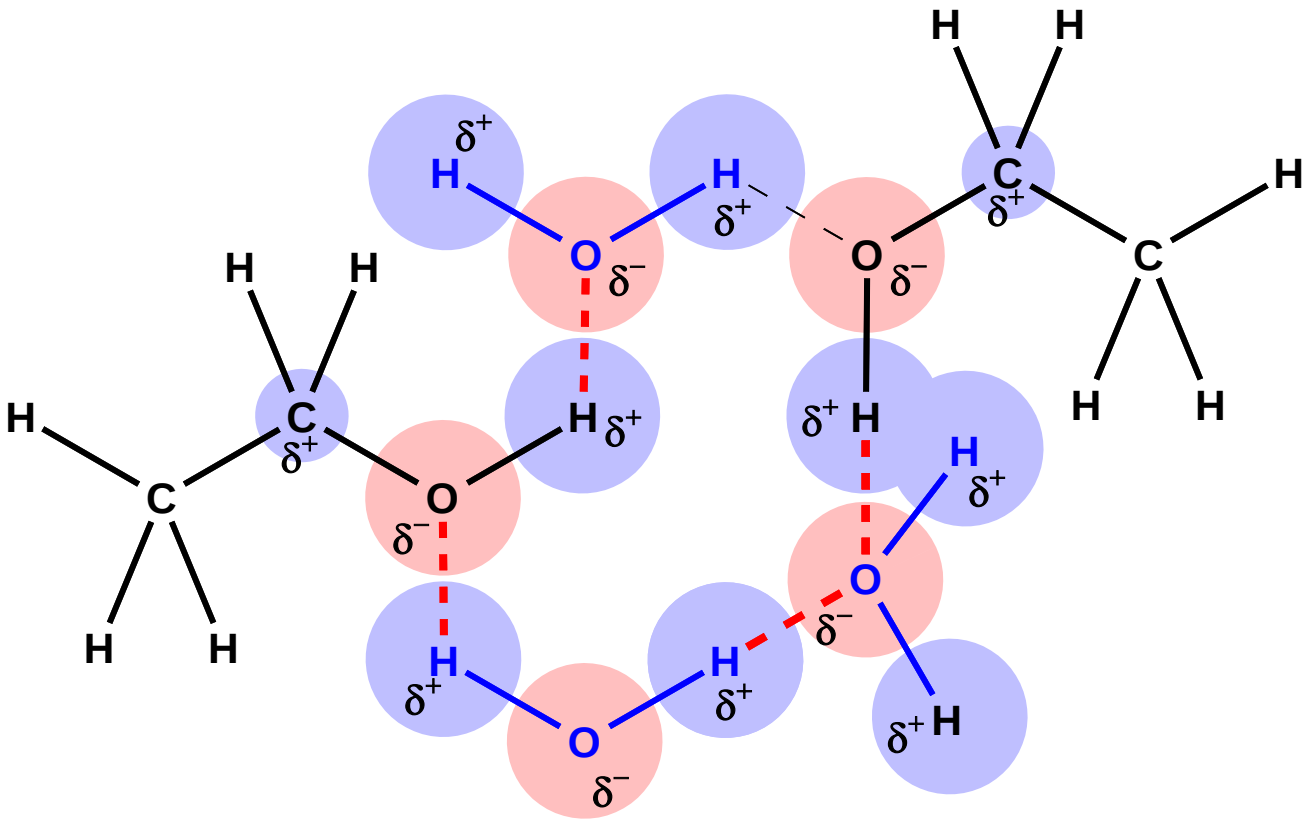


Polare Bindungen aufgrund stark unterschiedlicher Elektronegativitäten

Assoziation über Wasserstoffbrücken



Löslichkeit in Wasser

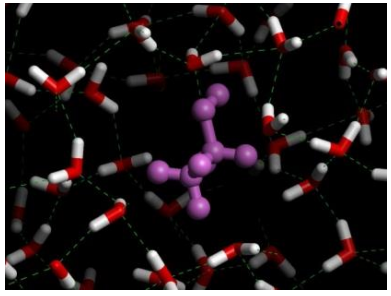


Alkohol	Lösl. H_20
CH_3OH	∞
C_2H_5OH	∞
C_3H_7OH	∞
C_4H_9OH	79 g/L
$C_5H_{11}OH$	23 g/L
$C_6H_{13}OH$	6 g/L
$C_7H_{15}OH$	2 g/L
$C_8H_{17}OH$	0,5 g/L
$C_9H_{19}OH$	0 g/L
$C_{10}H_{21}OH$	0 g/L

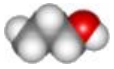
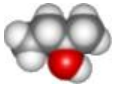
Ähnliches löst sich in Ähnlichem

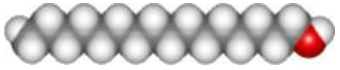
similia similibus solvuntur

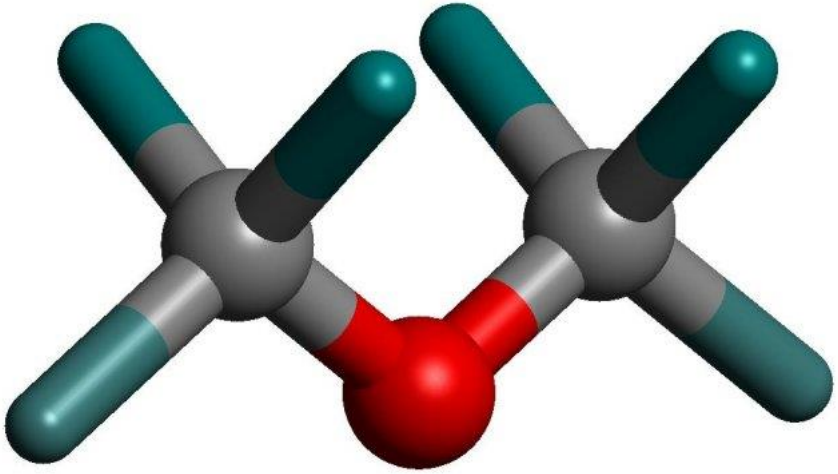
Paracelsus
(Philippus Theophrastus Aureolus Bombastus von Hohenheim, 1493-1541)

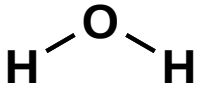


Alkohole (Tabelle)

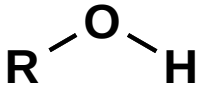
Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Methanol CH_4O	H_3C-OH 	-94	65
Ethanol C_2H_6O	H_3C-CH_2-OH 	-117	79
Propanole (insgesamt 2 Isomere)			
Propanol C_3H_8O	$H_3C-CH_2-CH_2-OH$ 	-127	97
Iso-propanol C_3H_8O	$H_3C-\underset{\displaystyle OH}{\underset{\vert}{CH}}-CH_3$ 	-90	82
Butanole (insgesamt 4 Isomere)			
Butanol $C_4H_{10}O$	$H_3C-CH_2-CH_2-CH_2-OH$ 	-90	117
sec-Butanol $C_4H_{10}O$	$H_3C-\underset{\displaystyle OH}{\underset{\vert}{CH}}-CH_2-CH_3$ 	-	100
tert-Butanol $C_4H_{10}O$	$H_3C-\underset{\displaystyle CH_3}{\underset{\vert}{\overset{\displaystyle OH}{\overset{\vert}{C}}}}-CH_3$ 	26	82

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Wachsalkohole			
Cetyl-alkohol $C_{16}H_{34}O$	$H_3C-\left[CH_2\right]_{15}-OH$ 	50	344
Höherwertige Alkohole			
Glycol $C_2H_6O_2$	$HO-CH_2-CH_2-OH$ 	-13	197
Glycerin $C_3H_8O_3$	$H-\underset{\displaystyle OH}{\underset{\vert}{C}}(H)-\underset{\displaystyle OH}{\underset{\vert}{C}}(H)-\underset{\displaystyle OH}{\underset{\vert}{C}}-H$ 	20	290

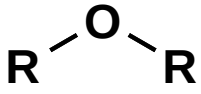




Wasser



Alkohol



Ether

R = C-Rest

Vergleich Alkohole – Ether (Koch- und Flammpunkte)

Ethanol: CH_3CH_2OH

Kp = 78 °C

Flp = 12 °C

Butanol: $CH_3CH_2CH_2CH_2OH$

Kp = 118 °C

Flp = 35 °C

Dimethylether: CH_3OCH_3

Kp = -25 °C

Flp = n.b.

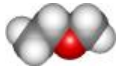
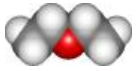
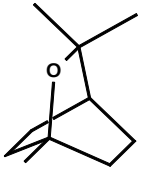
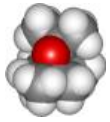
Diethylether: $CH_3CH_2OCH_2CH_3$

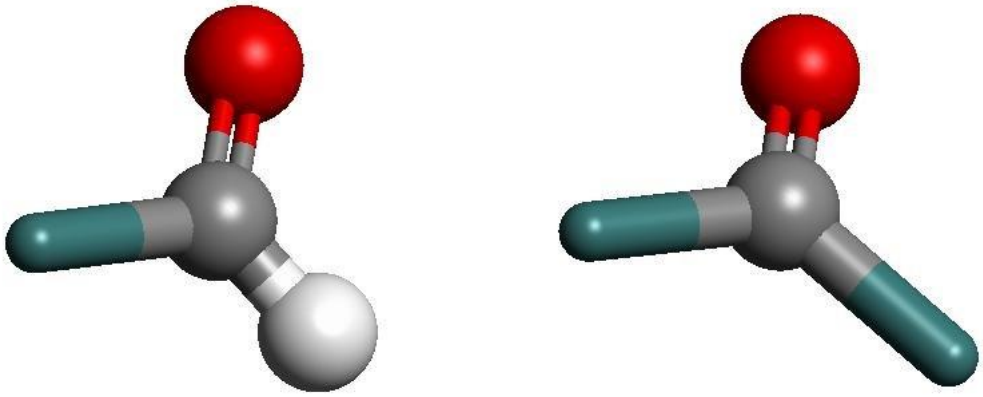
Kp = 35 °C

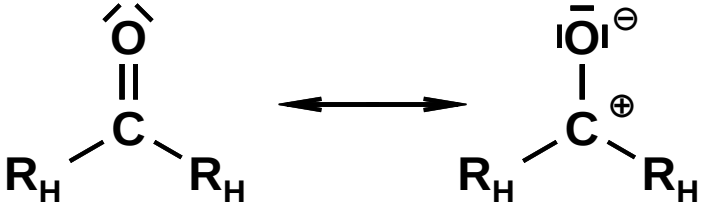
Flp = - 40 °C !!!

Zum Vergleich:
Flammpunkte von: Benzin (-20 °C), Kerosin (38 °C), Dieselöl (60 °C), Sonnenblumenöl (316 °C)

Ether (Tabelle)

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Dimethyl-ether C_2H_6O	$H_3C-O-CH_3$ 	-138	-23
Ethyl-methyl-ether C_3H_8O	$H_3C-CH_2-O-CH_3$ 	-	11
Diethyl-ether $C_4H_{10}O$	$H_3C-CH_2-O-CH_2-CH_3$ 	-116	35
Cineol $C_{10}H_{18}O$	 	2	177

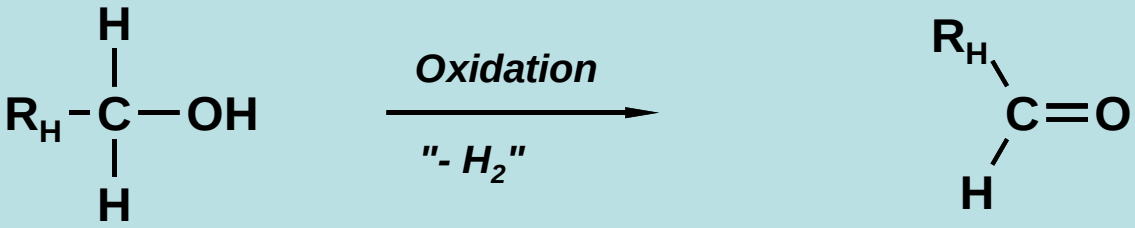




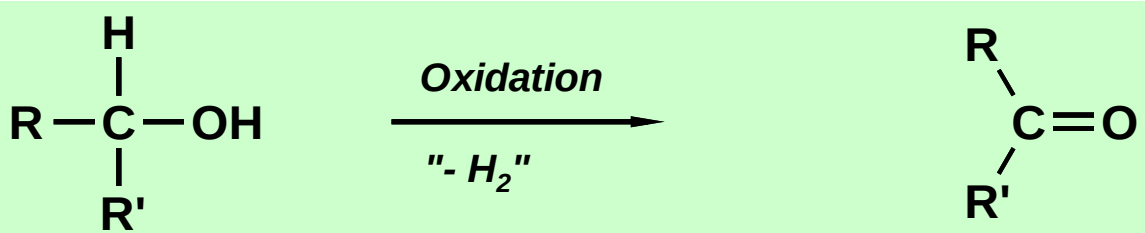
Carbonylgruppe

Oxidation von Alkoholen

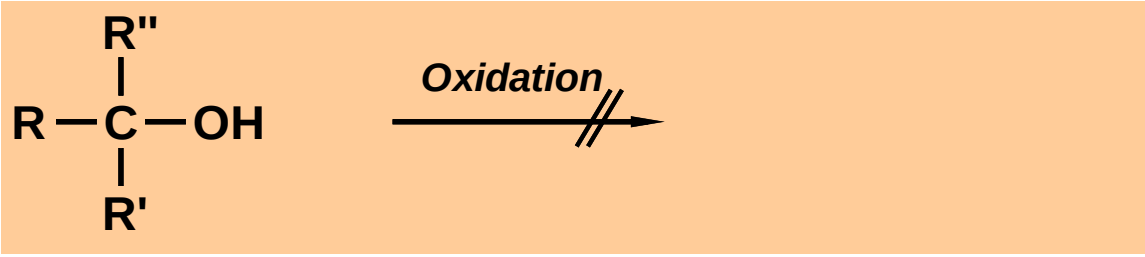
Primäre Alkohole bilden bei der Oxidation Aldehyde



Sekundäre Alkohole bilden bei der Oxidation Ketone



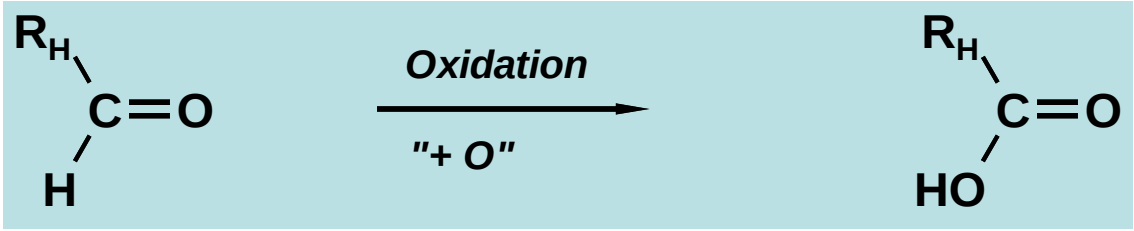
Tertiäre Alkohole lassen sich nicht oxidieren



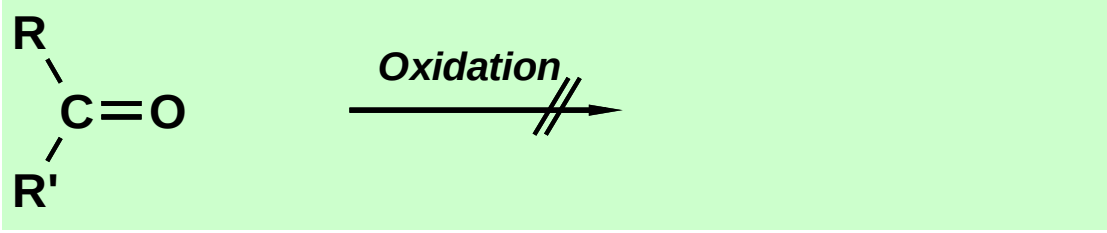
Oxidationsmittel: z.B. $K_2Cr_2O_7/H_2SO_4$, Luft + Ag oder $PdCl_2/CuCl_2$

Oxidation von Aldehyden

Aldehyde bilden bei der Oxidation Carbonsäuren



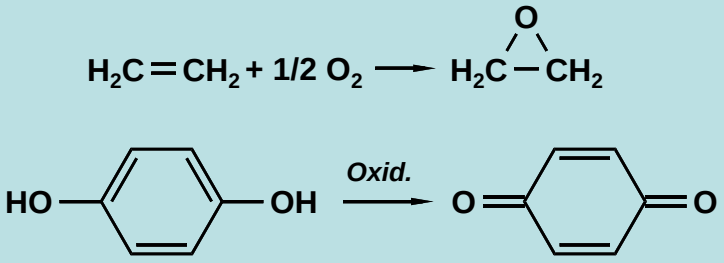
Ketone lassen sich nicht oxidieren



Oxidation und Reduktion (einfache Darstellung)

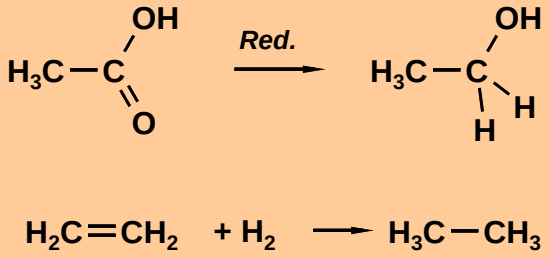
Oxidation:

- Hinzufügen von Sauerstoff
- Entfernen von Wasserstoff
- Entfernen von Elektronen

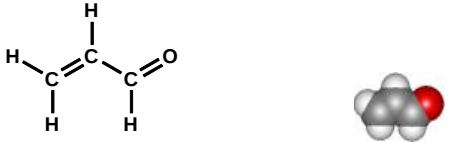


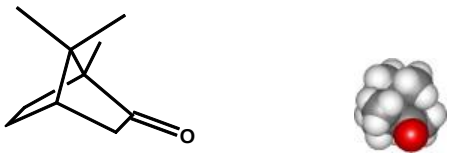
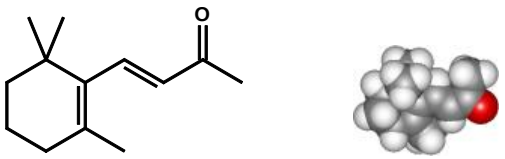
Reduktion:

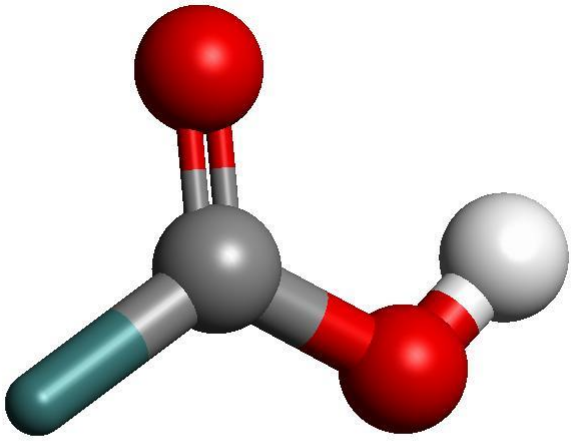
- Entfernen von Sauerstoff
- Hinzufügen von Wasserstoff
- Hinzufügen von Elektronen

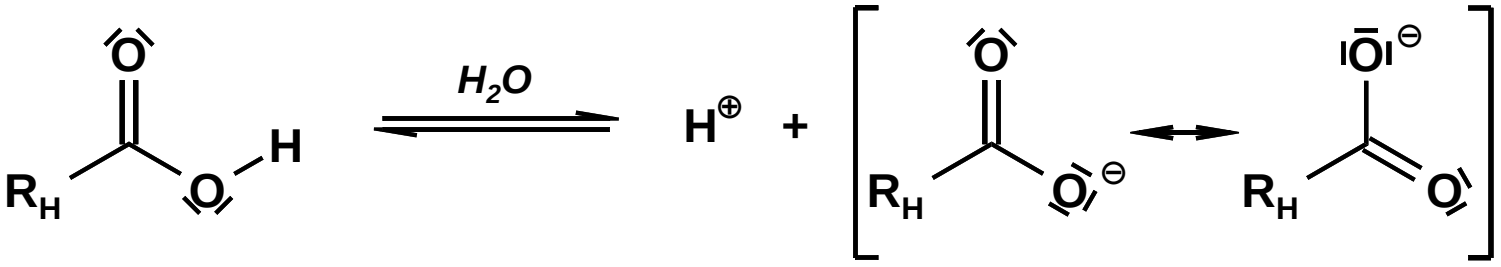


Aldehyde und Ketone (Tabelle)

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Aldehyde			
Methanal Form-aldehyd CH_2O		-92	-21
Ethanal Acet-aldehyd C_2H_4O		-121	21
Propenal Acrolein C_3H_4O		-87	53

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (ºC)	Kp (ºC)
Ketone			
Propanon Aceton C_3H_6O		-95	56
Campher $C_{10}H_{16}O$		180	204
β-Jonon $C_{13}H_{20}O$		-	-





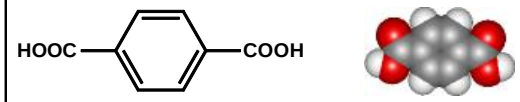
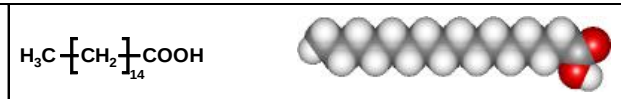
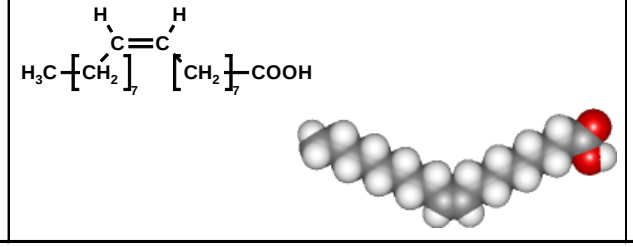
Carbonsäure

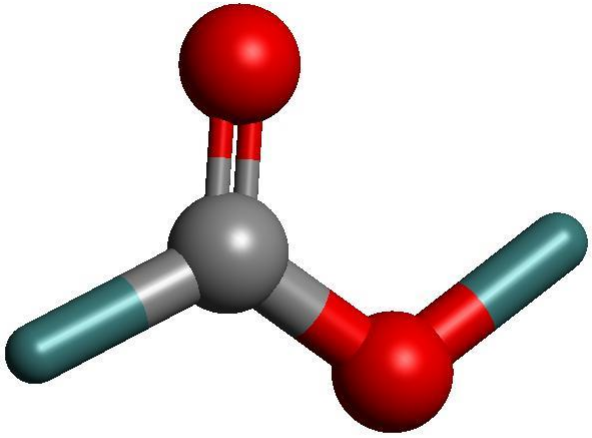
Carboxylat-Anion

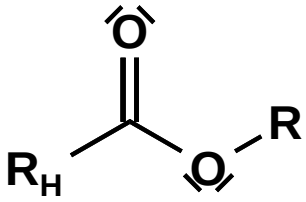
stabil, weil die Ladung mesomer verteilt ist

Carbonsäuren (Tabelle)

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (°C)	Kp (°C)
Monocarbonsäuren			
Ameisen-säure CH_2O_2		8	101
Essig-säure $C_2H_4O_2$		17	118
Propion-säure $C_3H_6O_2$		-21	141
Butter-säure $C_4H_8O_2$		-4	164
Acryl-säure $C_3H_4O_2$		13	142
Benzoe-säure $C_7H_6O_2$		122	249

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (°C)	Kp (°C)
Dicarbonsäuren			
Oxalsäure $C_2H_2O_4$		189	157
Tere-phthal-säure $C_8H_6O_4$		> 300	-
Fettsäuren			
Palmitin-säure $C_{16}H_{32}O_2$		63	390
Ölsäure $C_{18}H_{34}O_2$		16	-



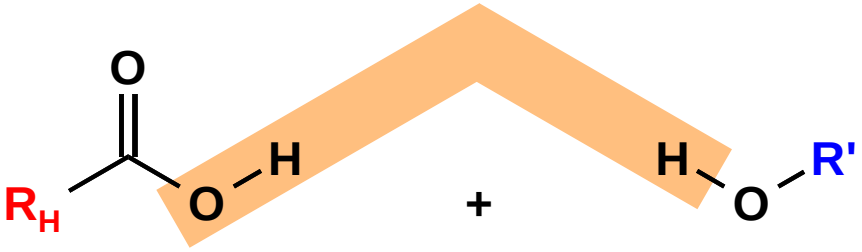


Ester

R = C-Rest

Esterbildung und -spaltung

Kondensationsreaktion



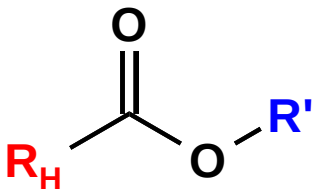
Carbonsäure + *Alkohol*

Esterbildung

$H^{\oplus}$ / - H_2O

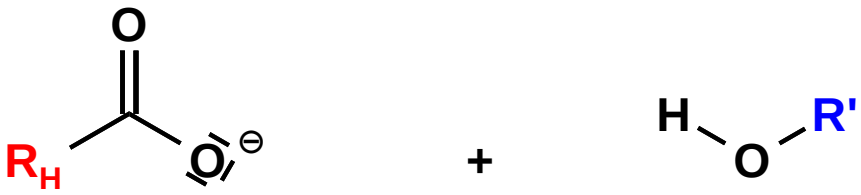
$H^{\oplus}$ / + H_2O

Esterspaltung



Ester

reversibel (Gleichgewicht)

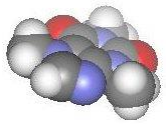


Carboxylat-Anion + *Alkohol*

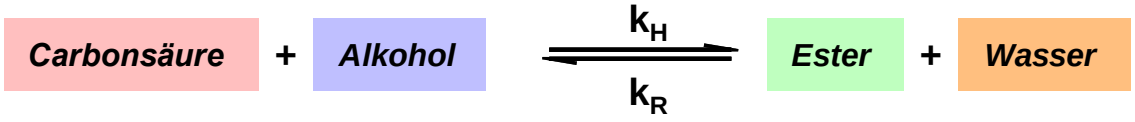
$OH^{\ominus}$ / + H_2O

Verseifung

irreversibel



Gleichgewichtsreaktionen



Bildungsgeschwindigkeit *Ester* $= d[E]/dt = d[W]/dt = k_H [C] [A]$

Bildungsgeschwindigkeit *Carbonsäure* $= d[C]/dt = d[A]/dt = k_R [E] [W]$

Im Gleichgewicht gilt:

$$d[E]/dt = d[C]/dt \quad \text{und} \quad k_H [C] [A] = k_R [E] [W]$$

Massenwirkungsgesetz:

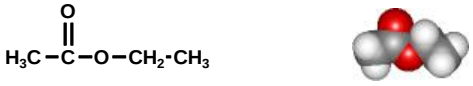
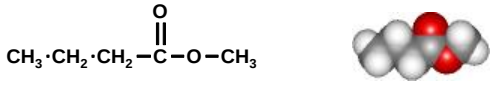
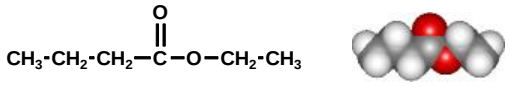
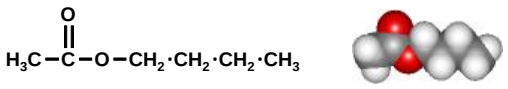
$$\frac{k_H}{k_R} = K = \frac{[E] [W]}{[C] [A]}$$

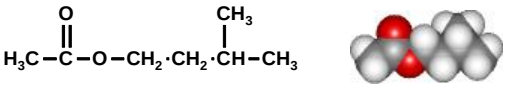
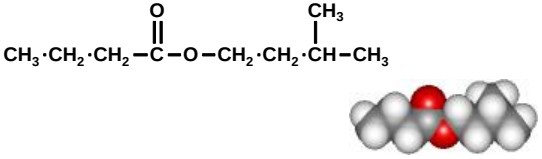
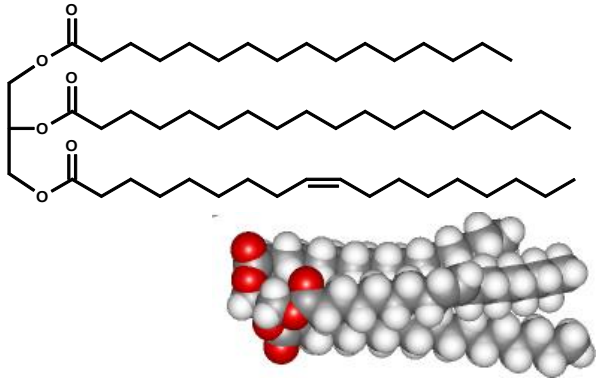
Prinzip des kleinsten Zwangs:
(Le Chatelier 1884)

$$K = \frac{\blacksquare\blacksquare}{\blacksquare\blacksquare}$$

z.B. Entfernung des Wassers erhöht die Ausbeute an Ester

Ester (Tabelle)

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (°C)	Kp (°C)
Methyl-formiat $C_2H_4O_2$		-99	32
Ethyl-acetat $C_4H_8O_2$		-84	77
Methyl-butyrat $C_5H_{10}O_2$		-85	102
Ethyl-butyrat $C_6H_{12}O_2$		-101	124
Butyl-acetat $C_6H_{12}O_2$		-78	126

Name Summen-formel	Strukturformel Kalottenmodell	Fp (°C)	Kp (°C)
Isoamyl-acetat $C_7H_{14}O_2$		-79	142
Isoamyl-butyrat $C_9H_{18}O_2$		-	179
Triglycerid $C_{55}H_{104}O_6$		-	-

Erdöl, Petrochemie, Kraftstoffe, Triglyceride

Fette und Öle

Mineralöle

Kohlenwasserstoffe aus Erdöl
z.B.: Dieselöl, Motorenöl, Paraffinöl

Fette Öle

Triglyceride von langkettigen Carbonsäuren aus Pflanzen und Tieren
bleibender Fettfleck (keine Verdunstung)
teilweise trocknend: Filmbildung durch Oxidation
z.B.: Olivenöl, Schweinefett, Leinöl

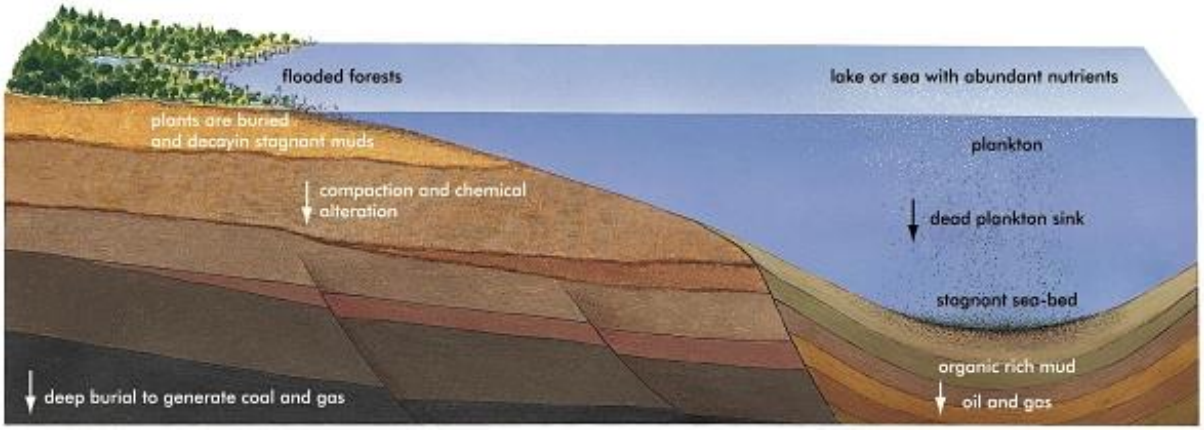
Etherische Öle

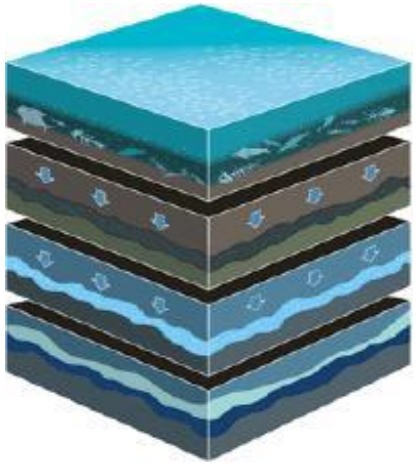
Terpene und Terpenoide aus Pflanzen
stark riechend, hoher Dampfdruck, kein bleibender Fettfleck, verdunsten, teilweise bakterizid/fungizid
z.B.: Terpentinöl, Lavendelöl, Rosenöl, Nelkenöl, Anisöl

Siliconöle

Polymerisierte Siloxane mit organ. Seitenketten
synthetisch, klar, farblos, ungiftig, neutral, geruchslos, chemisch inert, temperaturstabil, hydrophob
Anwendung als Schmiermittel, Hydrauliköl, Isolator, Kraftfluid, Trennstoff

Entstehung des Erdöls

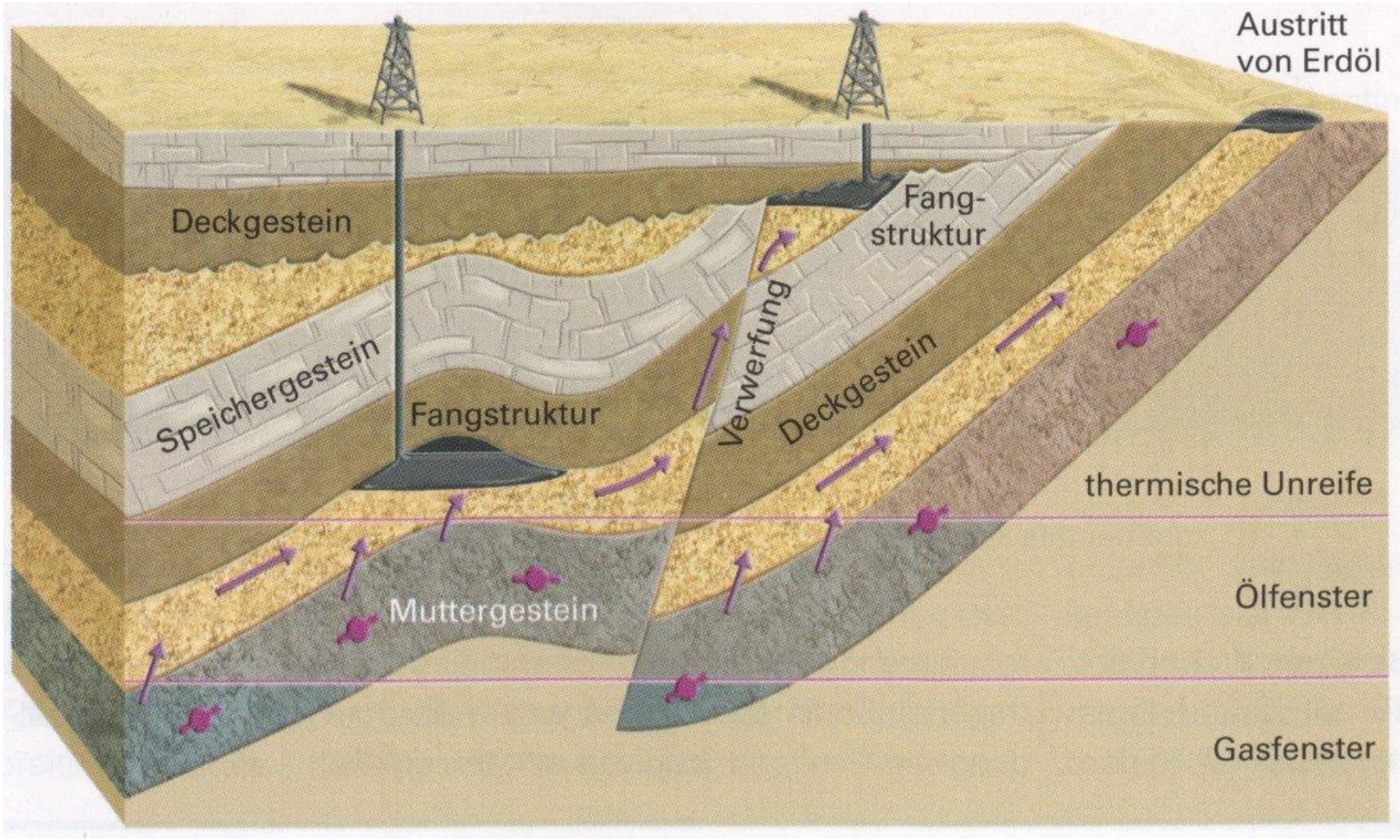




Biogenetische Theorie (akzeptiert):
Abgestorbene Meeresorganismen sinken schnell in eine **anaerobe** Wasserschicht und werden von Sedimenten bedeckt.
Durch hohen **Druck** und **Temperatur**, im Verbund mit katalytisch wirkenden **Tonmineralien** formen sich Kerogene (Alkane, Olefine, Isoprenoide, Terpenoide, Dimethylfuran, Vanadium- od. Nickel-Porphyrine etc.), aus denen sich durch Transportprozesse (Migration) das Erdöl bildet.

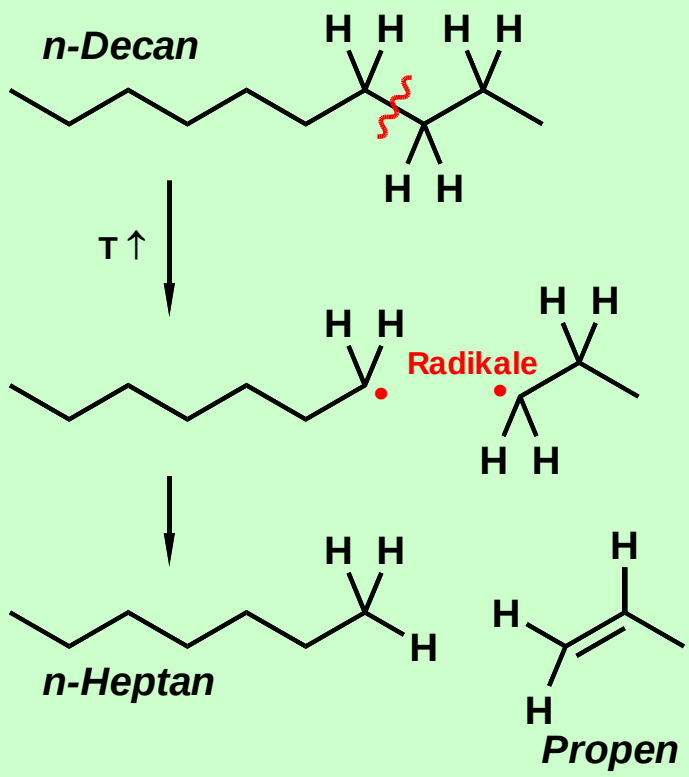
Abiogenetische Theorie (veraltet):
Bei der Erdentstehung gebildete Kohlenwasserstoffe werden aufgrund der geringen Dichte an die Oberfläche gepresst.

Ölfalle


Austritt
von Erdöl
Deckgestein
Fang-
struktur
Speichergestein
Fangstruktur
Verwerfung
Deckgestein
thermische Unreife
Muttergestein
Ölfenster
Gasfenster

Fraktionierte Destillation des Rohöls

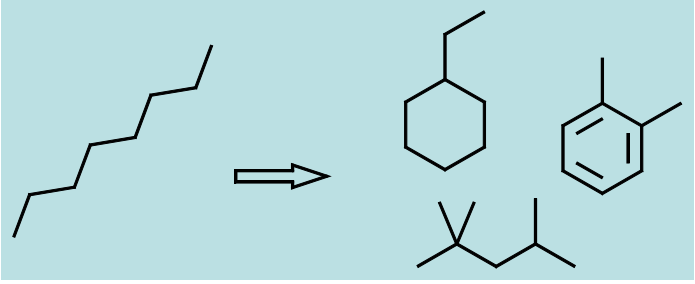
Cracken, Reforming



Cracken:
Bei **hoher Temperatur** (thermisches Cracken), meist zusammen mit Aluminiumsilikat-Katalysatoren (Zeolithe) werden aus längeren Kohlenwasserstoffen kürzere Alkane erzeugt. Diese werden neu fraktioniert und z.B. als Kraftstoffe verwendet.

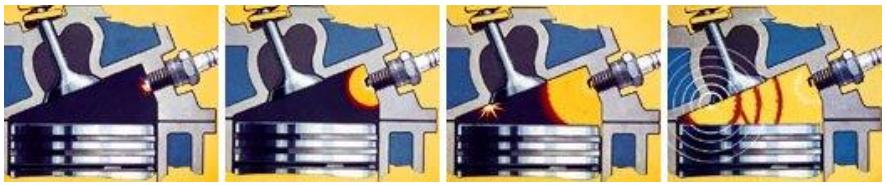
Hydrocracken:
Bei Zusatz von **Wasserstoff** (hoher Druck) werden damit aus Schweröl niedrig siedende Benzine generiert. Dabei entstehen keine Olefine.

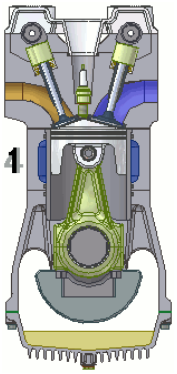
Steamcracken:
Zusammen mit **Wasserdampf** gelangt man zu sehr hohen Anteilen an Olefinen und Aromaten.
Dieses Verfahren ist die Hauptquelle für die Polymer-grundstoffe Ethen und Propen.

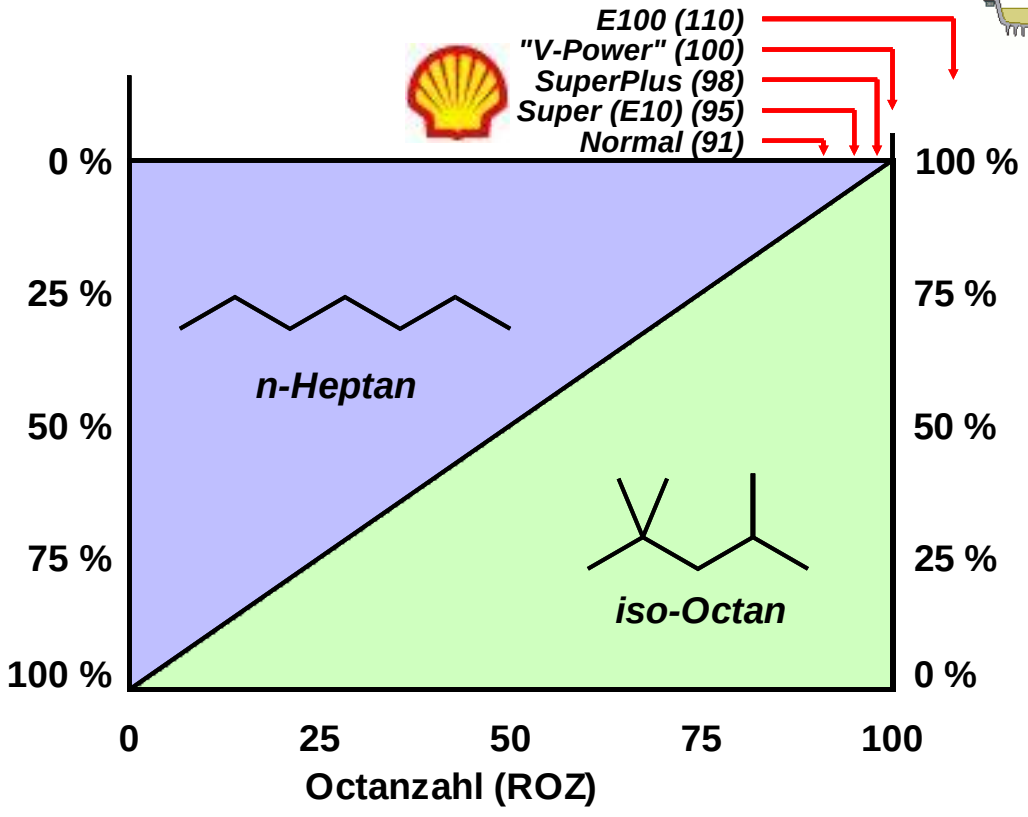


Reforming:
Durch Erhitzen an **Platinkatalysatoren** werden aus geradkettigen Kohlenwasserstoffen verzweigte und ringförmige hochwertige (hoch-octanige) Kraftstoffe (Platformat).

Octanzahl, Antiklopfmittel







Klopfen:
Vorzeitiges Zünden des Kraftstoff/ Luft-Gemisches (noch in der Aufwärtsbewegung des Motorkolbens) führt zu hohem Verschleiß und schlechter Energienutzung.

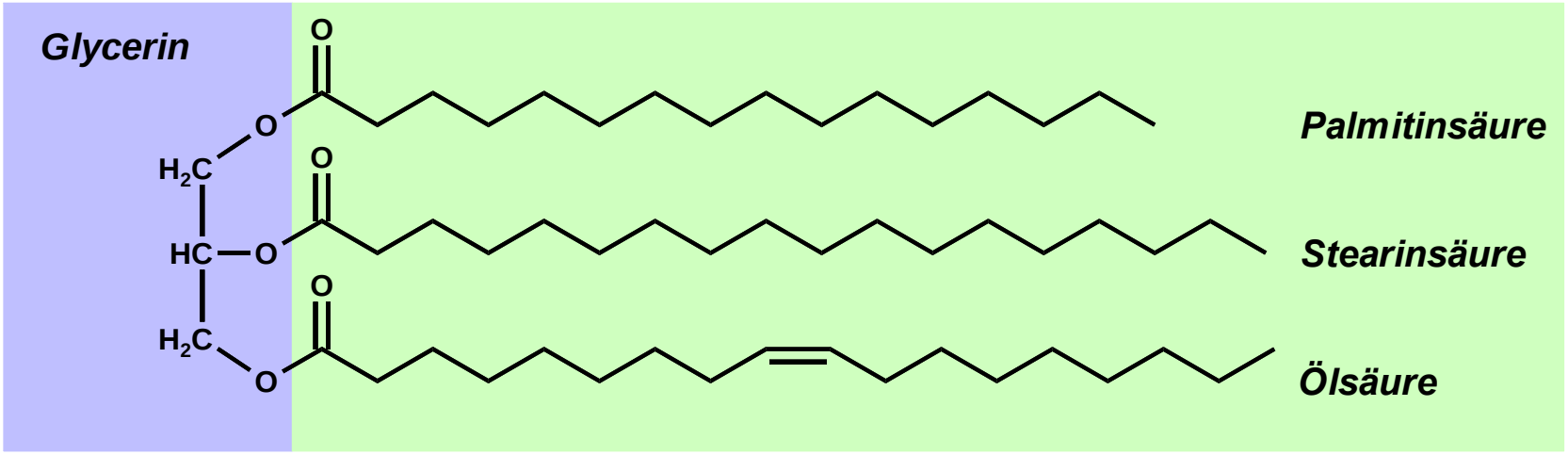
Octanzahl:
Ein Kraftstoff mit der Octanzahl A zeigt in einem Testmotor dasselbe Klopfverhalten wie ein binäres Gemisch aus A% iso-Octan und 100-A% n-Heptan.

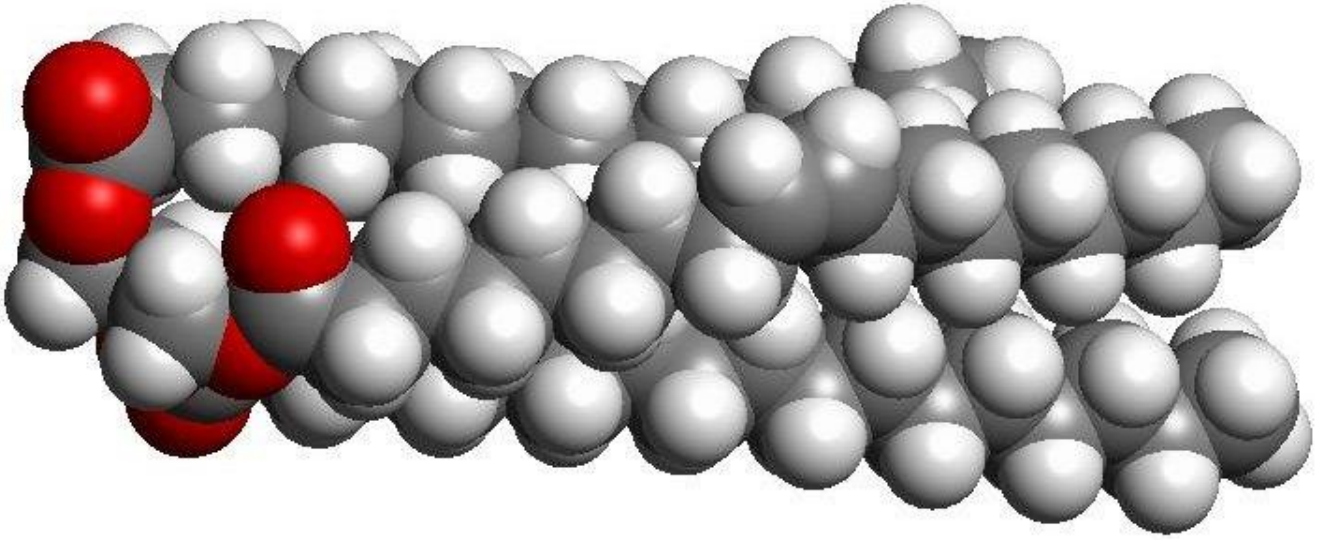
Antiklopfmittel:
$Pb(C_2H_5)_4$ sehr giftig, Katalysatorgift,
1972 0,4 g/l, 1976 0,15 g/l,
seit 1988 verboten im Normalbenzin,
seit 2000 in anderen Kraftstoffen.

Heute:
tert.-Butylmethylether, Alkohole, höhere Anteile an verzweigten und cyclischen Alkanen (z.T. auch Aromaten)

Fette, Öle, Triglyceride

Triglyceride



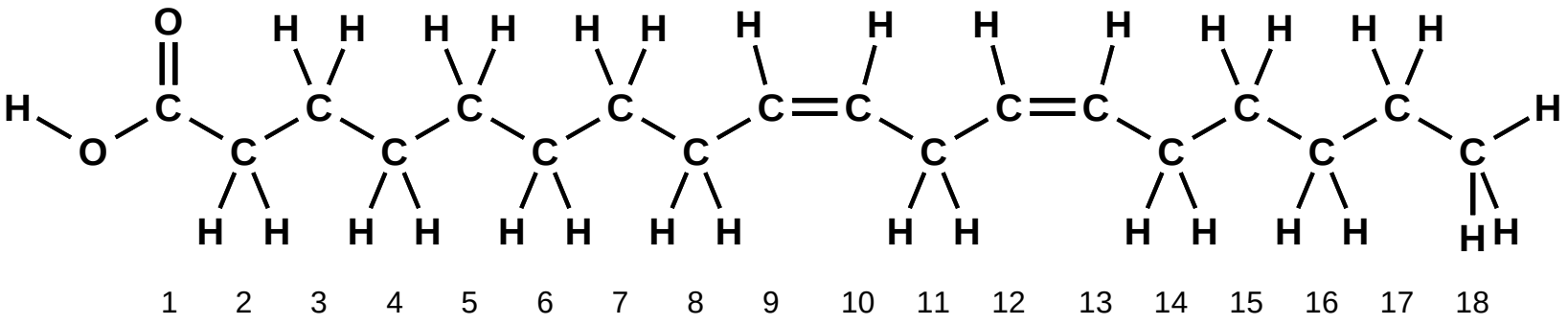


Fettsäuren (Beispiel)

gerade Anzahl von C-Atomen

cis und nicht konjugiert!

1x -CH_2- zwischen den Doppelbindungen



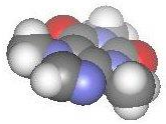
Linolsäure

Octadeca-9,12-diensäure

18:2 (9,12) Fettsäure

9,12-Octadecadiensäure

Omega-6 Fettsäure

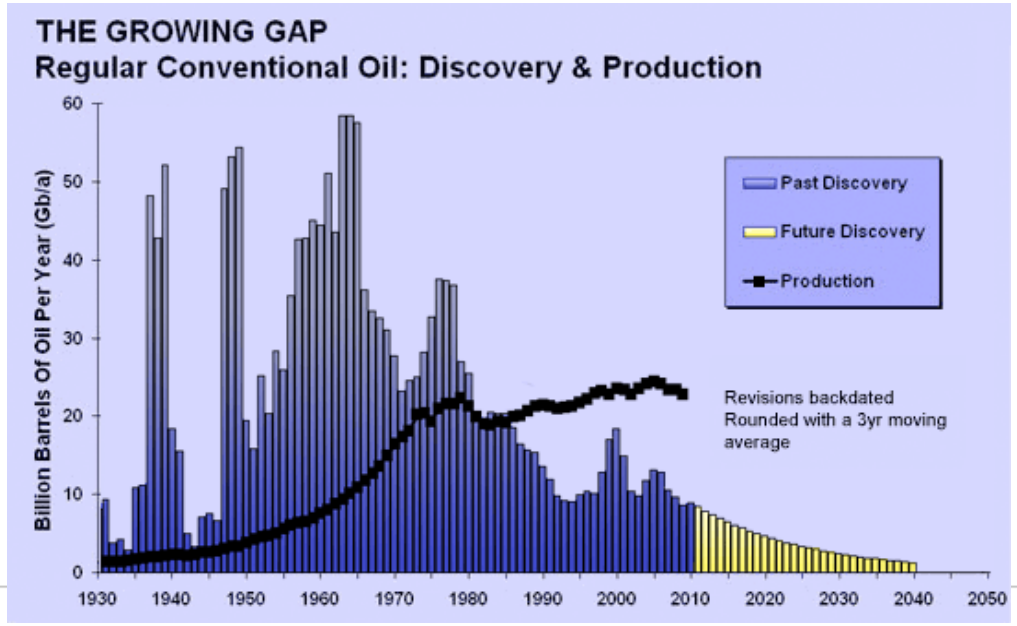


Fettsäuren (Tabelle)

Name	Summen-formel	Kurz-schreib-weise	Strukturformel	Fp (ºC)
Gesättigte Fettsäuren				
Laurinsäure Dodecansäure	$C_{12}H_{24}O_2$	12:0	CH_3-$(CH_2)_{10}$-COOH	44
Myristinsäure Tetradecansäure	$C_{14}H_{28}O_2$	14:0	CH_3-$(CH_2)_{12}$-COOH	54
Palmitinsäure Hexadecansäure	$C_{16}H_{32}O_2$	16:0	CH_3-$(CH_2)_{14}$-COOH	63
Stearinsäure Octadecansäure	$C_{18}H_{36}O_2$	18:0	CH_3-$(CH_2)_{16}$-COOH	70
Einfach ungesättigte Fettsäuren				
Ölsäure 9-Octadecensäure	$C_{18}H_{34}O_2$	18:1 (9)	CH_3-$(CH_2)_7$-CH=CH- -$(CH_2)_7$-COOH	16
Ricinolsäure 12-Hydroxy- 9-Octadecensäure	$C_{18}H_{34}O_3$	12OH 18:1 (9)	CH_3-$(CH_2)_5$-CHOH-CH_2- -CH=CH- -$(CH_2)_7$-COOH	8
Mehrfach ungesättigte Fettsäuren				
Linolsäure 9,12-Octadecadiensäure	$C_{18}H_{32}O_2$	18:2 (9,12)	CH_3-$(CH_2)_4$-CH=CH-CH_2- -CH=CH-$(CH_2)_7$-COOH	-5
Linolensäure 9,12,15- Octadecatriensäure	$C_{18}H_{30}O_2$	18:3 (9,12,15)	CH_3-CH_2-CH=CH-CH_2- -CH=CH-CH_2-CH=CH- -$(CH_2)_7$-COOH	-11
Arachidonsäure 5,8,11,14- Eicosatetraensäure	$C_{20}H_{32}O_2$	20:4 (5,8, 11,14)	CH_3-$(CH_2)_4$-CH=CH-CH_2- -CH=CH-CH_2-CH=CH-CH_2- -CH=CH-$(CH_2)_3$-COOH	-50

Moderne Kraftstoffe

Erdölverknappung und Preisentwicklung



Rohölpreise in $ / 159 L

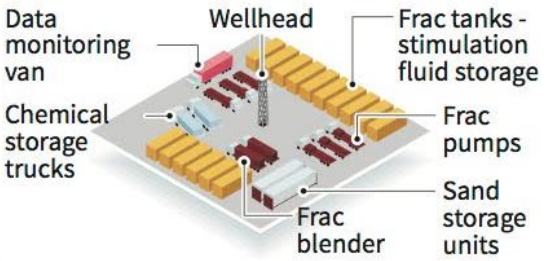
Quellen: ASPO Association for the Study of Peak
http://www.eia.gov/dnav/pet/hist/LeafHandler.ashx?n=pet&s=rbrte&f=d

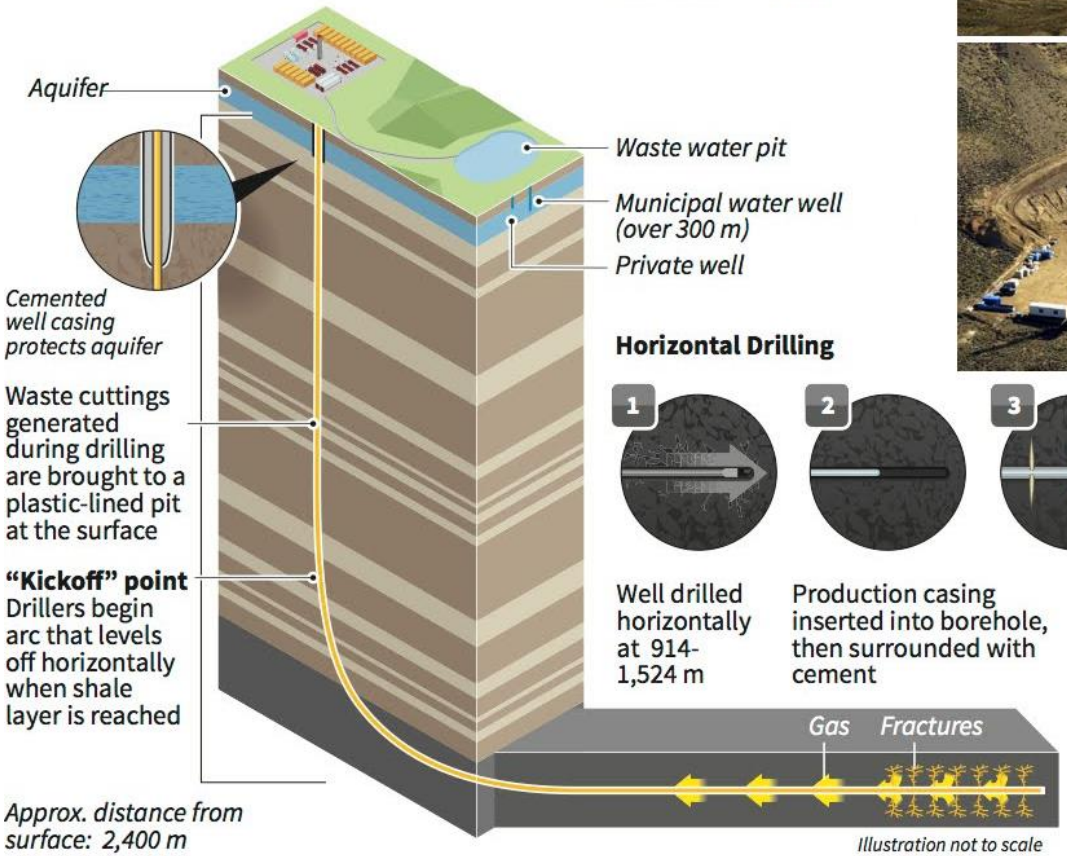
Hydraulic Fracturing ("Fracking")

THE PROCESS

Hydraulic fracturing, commonly known as fracking, is the creation of fractures in rock formations in the earth using pressurised fluid, generally for the purpose of extracting natural gas

Common Fracturing Equipment

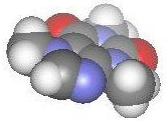




Horizontal Drilling

1. Well drilled horizontally at 914-1,524 m
2. Production casing inserted into borehole, then surrounded with cement
3. Charges then detonated inside a perforating gun, blasting small holes into the shale
4. Pressurised mixture of water, sand and chemicals then pumped into the well at 15,900 litres a minute
5. The fluid generates numerous small fissures in the shale, freeing trapped gas that flows to the surface

Sources: National Geographic, Chesapeake Energy, EIA., USGS



(Chemie)-Konzepte zur Erhaltung der Mobilität

Benzin/Diesel
- Energiedichte 43-45 MJ/kg
- Rohstoffengpässe absehbar
- Leichtere, langsamere, sparsamere Autos
- Im Flugbetrieb aktuell alternativlos

Elektromobilität
- Energiedichte 3,6 MJ/kg (Li-Air)
- Noch in der Entwicklung (Marktdurchdringung ab 2030?)
- Hohe Investition in Batterie (Geld und Masse)
- Benötigt großes Stromnetz (Dichte und Leistung)
- Mögliche neue Rohstoffengpässe (Lithium, Platin, Palladium, Kobalt, Neodym etc.)
- Klimatisierung im KFZ noch schlecht gelöst

Wasserstoff
- Energiedichte 120,0 MJ/kg, 1,2 MJ/kg inkl. Speicher
- Entwicklung stagniert zugunsten Elektromobilität
- Rohstoffe: Methan (aktuell), Wasser, hohe Verluste
- Speicherung problematisch:
  350-700 bar Druck => Sicherheit, Diffusion
  Tiefkalt (Kp = -253 °C) => Verdampfung, Isolierung
- Keine Infrastruktur an den Tankstellen
- Energieträger für Brennstoffzellen => Elektromobilität

Erdgas
- Energiedichte 24,3 MJ/kg
- 1 kg Methan = 1,5 L Benzin
- Höchster H-Anteil bei fossilen Kraftstoffen
  Methan: C/H=1/4 $CH_4 + 2\ O_2 \Rightarrow CO_2 + 2\ H_2O$
  Octan: C/H=4/9 $2\ C_8H_{18} + 25\ O_2 \Rightarrow 16\ CO_2 + 18\ H_2O$
- Neue verfügbare Ressourcen z.B. durch "Fracking"
- Auch als Biogas verfügbar, aktuell eher für BHKs
  aber dann: Wettbewerb Tank-Teller

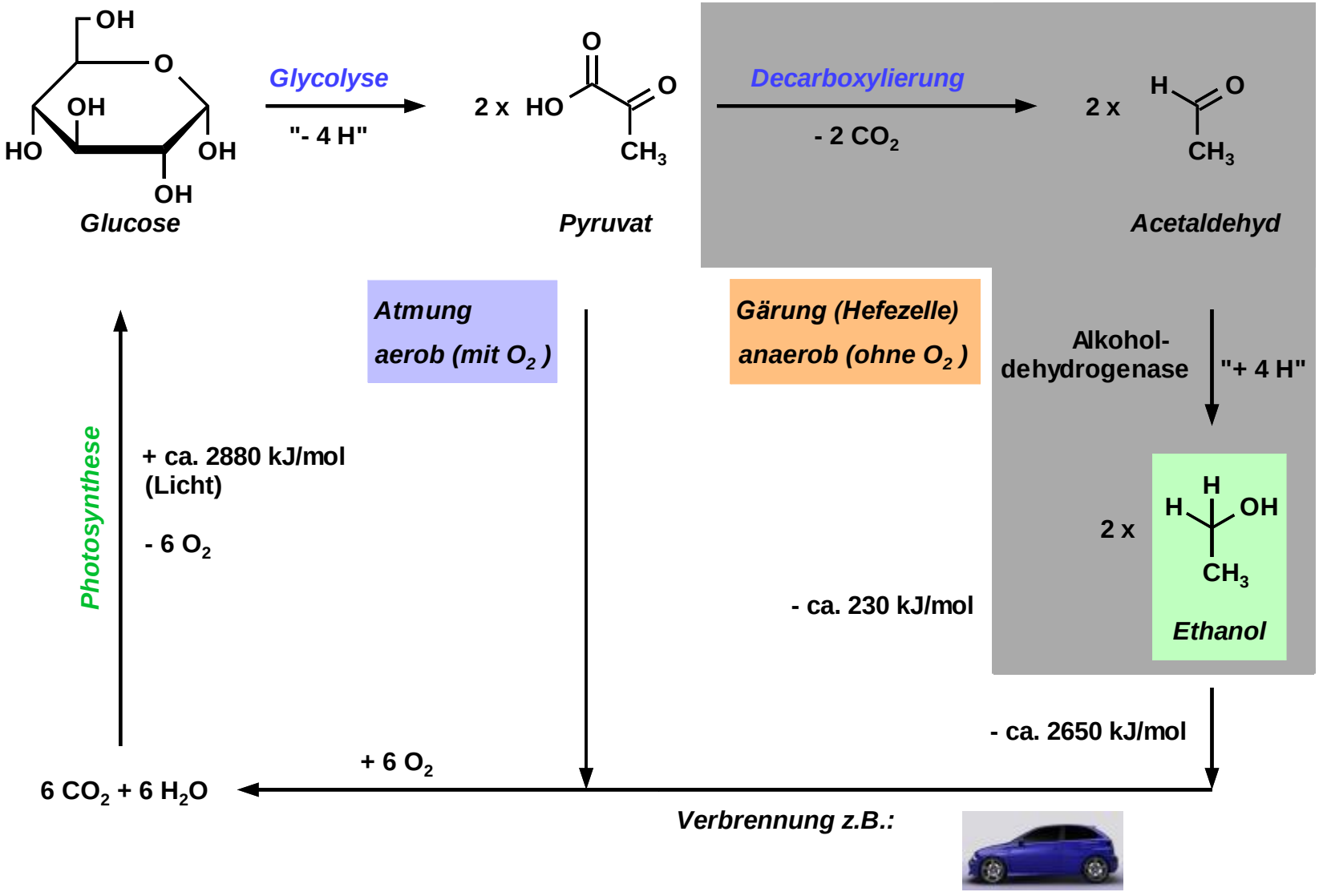
Bioethanol
- Energiedichte 26,8 MJ/kg
- Zumischung zu Benzin als E5/E10 oder E85
- Rohstoffe: Zucker, Getreide, Cellulose
- Oktanzahl ca. 110
- Korrosion von Aluminiumteilen
- Lösung von Weichmachern in Kunststoffen
- Abrodung von Wäldern zur Anpflanzung von Zuckerrohr, Weizen o.ä.
- Wettbewerb Tank-Teller

Biodiesel
- Energiedichte 37 MJ/kg
- Umesterung von pflanzlichen Triglyceriden
- Rohstoffe: Pflanzliche Öle (Raps, Palmöl etc.)
- Wettbewerb Tank-Teller

Synthetische Kraftstoffe
- Analog Benzin oder Diesel
- Über Fischer-Tropsch-Verfahren aus Synthesegas
- Rohstoffquellen sind Kohle, Erdgas, Biogas, Holz oder Biomasse anderer Herkunft
- Keine Änderung der Infrastruktur, Motorentechnik etc.
- Wettbewerb Tank-Teller bei Verwendung von Biomasse

Weitere Konzepte
- CO_2 –Verwertung für Energiematerialien
- Künstliche Photosynthese

Ethanolgewinnung durch Gärung



Biodiesel, Rapsölmethylester

Rapsöl

Glycerin

Linolensäure (6-15%)

Linolsäure (16-25%)

Ölsäure (52-67%)

Umesterung

+ 3 CH_3OH (Methanol)

+ $NaOCH_3$ (Na-Methanolat als Katalysator)

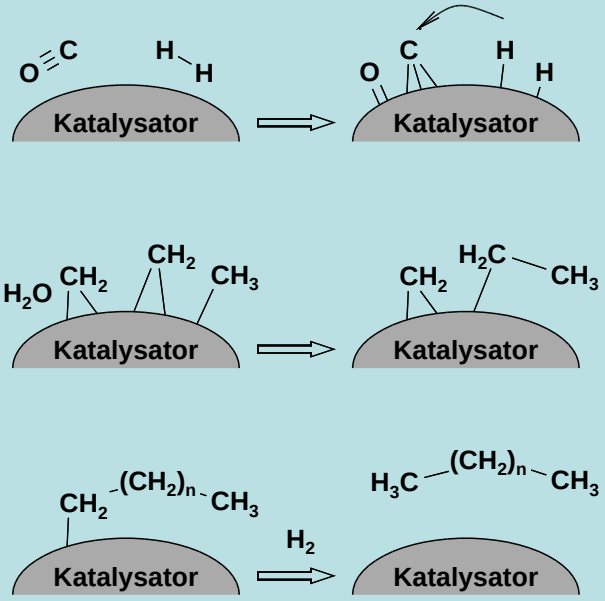
Glycerin

mit Wasser abtrennbar

RME = Rapsölmethylester (Gemisch der Fettsäuremethylester)

Fischer-Tropsch-Verfahren

Heterogene Katalyse



Sasol Slurry Phase Reactor

$CO + n\ H_2$ → (Fischer-Tropsch (1925); 300 °C, 10 bar; $Fe/Al_2O_3/Cu/K$ Kat.) → $-(CH_2)_x- + H_2O$

Synthesegas n=1-3

Kohlenwasserstoffe

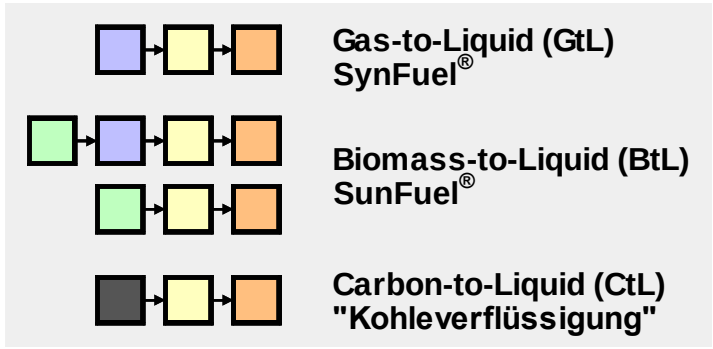
Alkohole
Essigsäure
Glykole
etc.

Franz Fischer (1877-1947)

Hans Tropsch (1889-1935)

South African Synthetic Oil Ltd.

Synthetische Kraftstoffe: SynFuel - SunFuel



Kohle

C

Kohlevergasung (z.B. Lurgi-Prozess)

$C + H_2O \longrightarrow CO + H_2$

$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$

$CH_4 + H_2O$

Methan (Erdgas)

Steam reforming

700-1100 °C, 3-25 bar

Ni + Ca-Al-Silikat Kat.

$CO + n\ H_2$

Synthesegas n=1-3

Fischer-Tropsch (1925)

300 °C, 10 bar

$Fe/Al_2O_3/Cu/K$ Kat.

$-(CH_2)_x- + H_2O$

Kraftstoff

anaerobe Vergärung

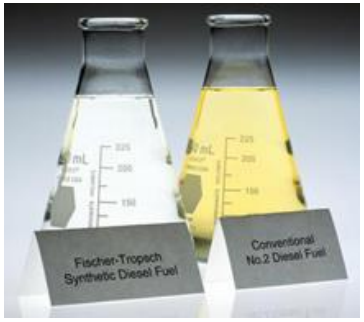
CHOREN

THE LINDE GROUP

Carbo V®

Biomasse

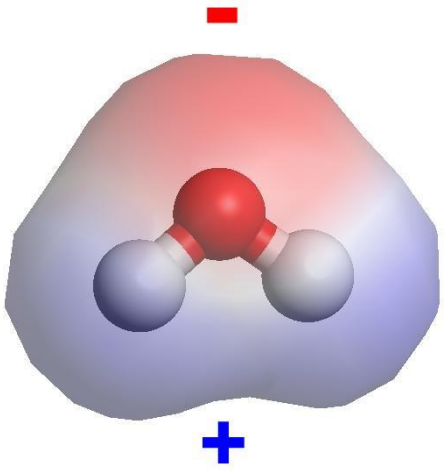
Mais, Weizen, Abfälle etc. Holz



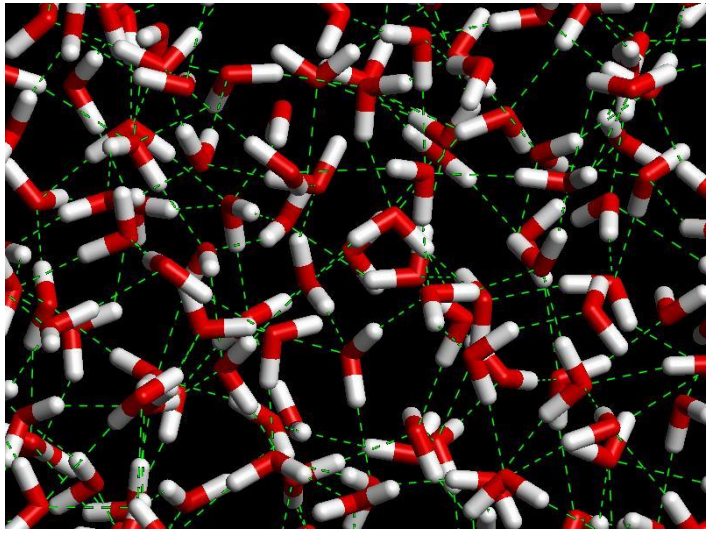
Wasser und Organische Moleküle

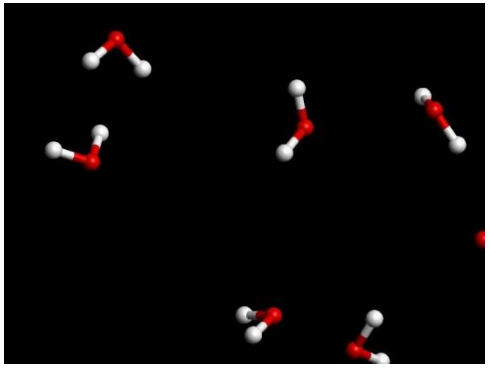
Die Struktur von Wasser

Wasser als Dipol

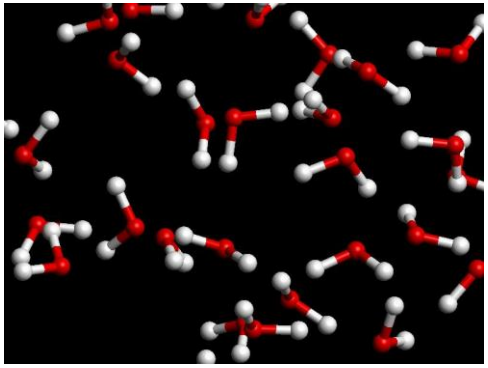


Wasserstoffbrücken

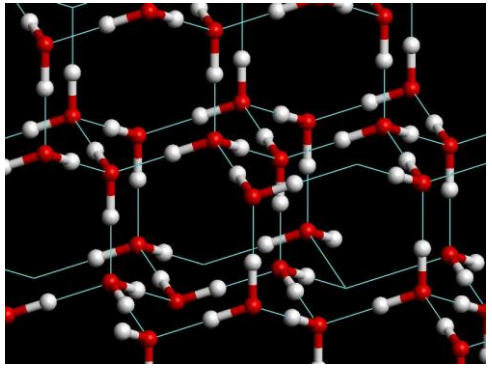




gasförmig (Dampf)

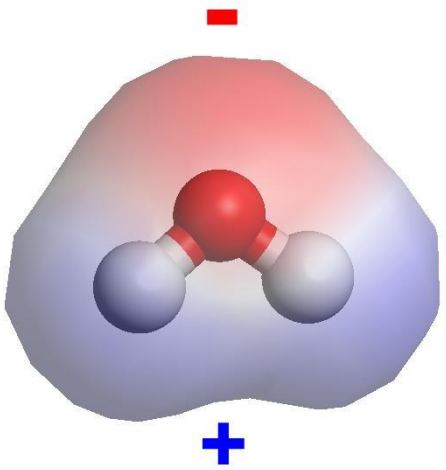


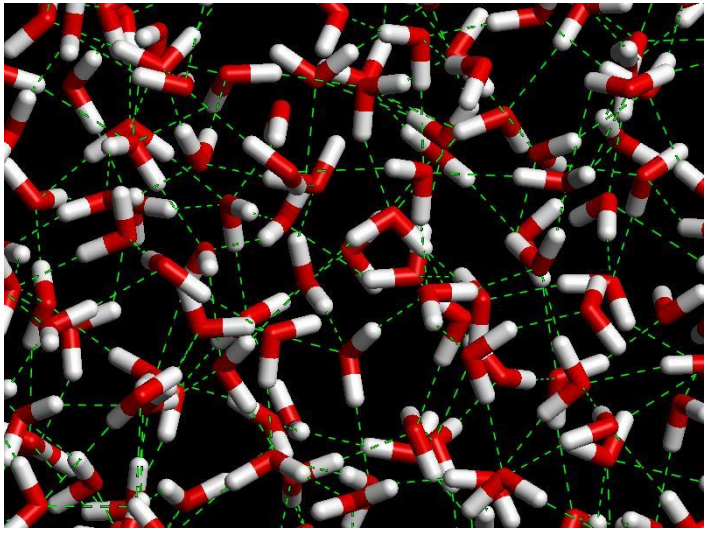
flüssig (Wasser)

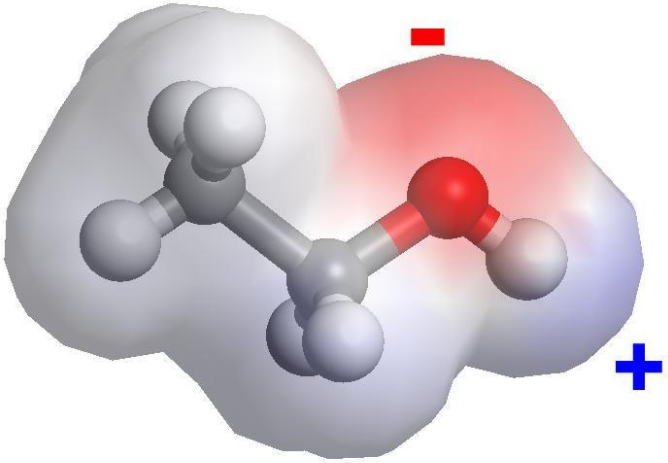


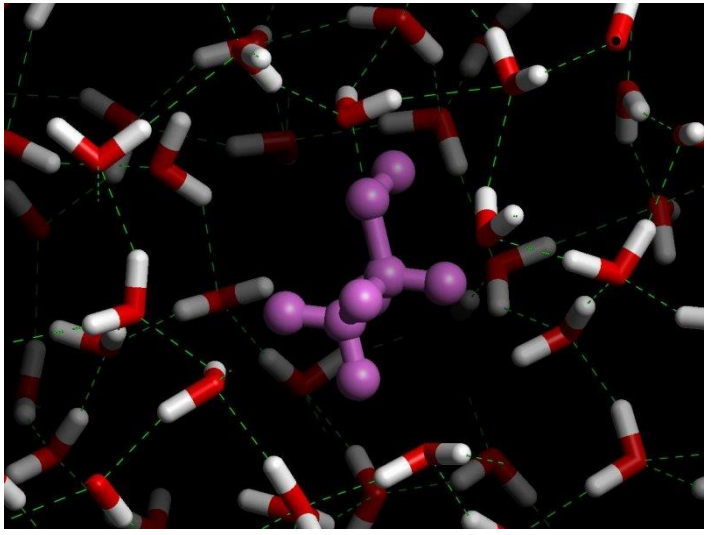
fest (Eis)

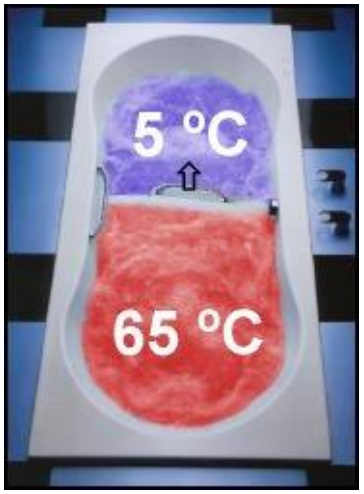
Alkohol - Wasser - Gemisch











?

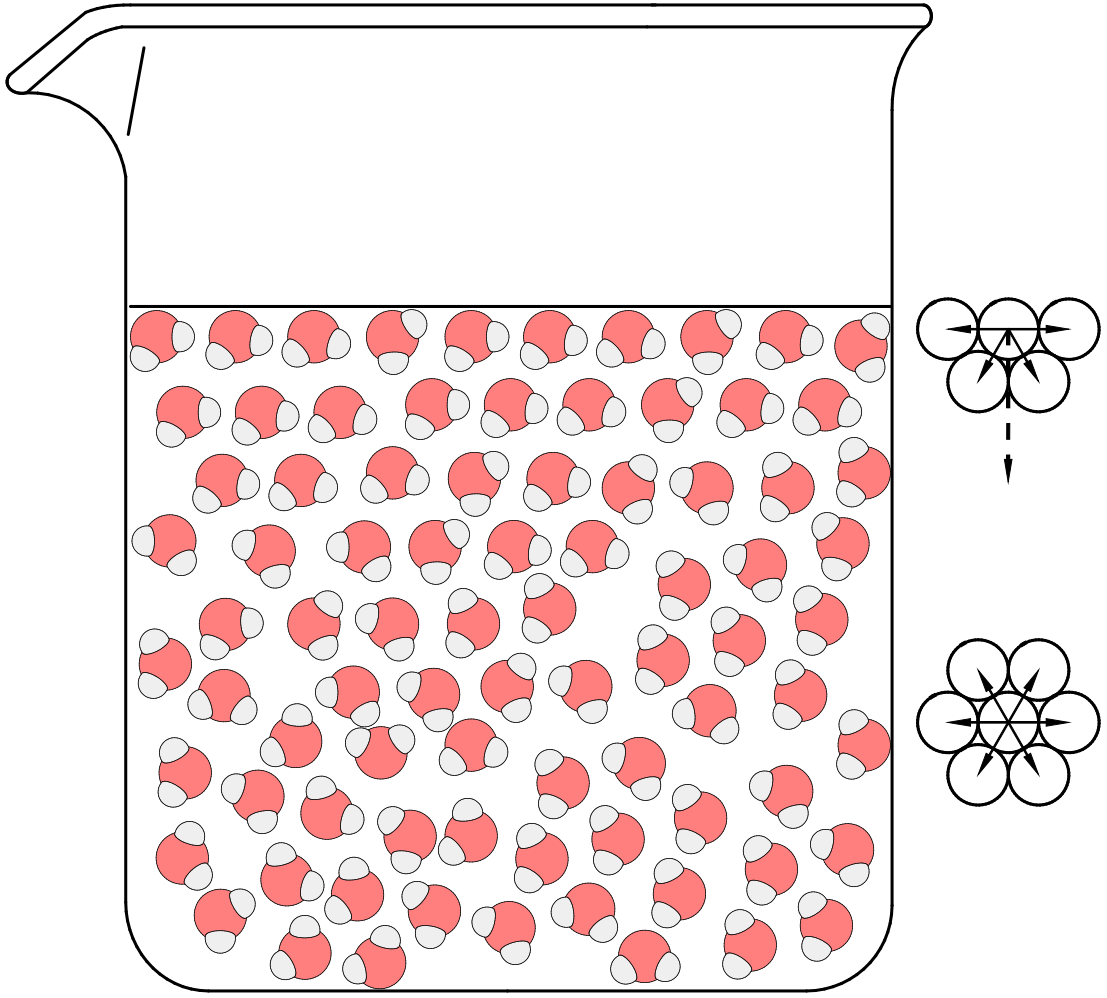
1. Hauptsatz der Thermodynamik:

In einem abgeschlossenen System (kein Energie-austausch mit der Umgebung) bleibt die innere Energie ***erhalten***.

2. Hauptsatz der Thermodynamik:

Jedes abgeschlossene makroskopische System strebt nach dem wahrscheinlichsten Zustand.
Das ist der Zustand, der durch die meisten mikro-skopischen Realisierungsmöglichkeiten, also durch die größte Entropie ***(Unordnung)*** gekennzeichnet ist.

Oberflächenspannung



Oberflächen:

Hohe Ordnung der Wassermoleküle

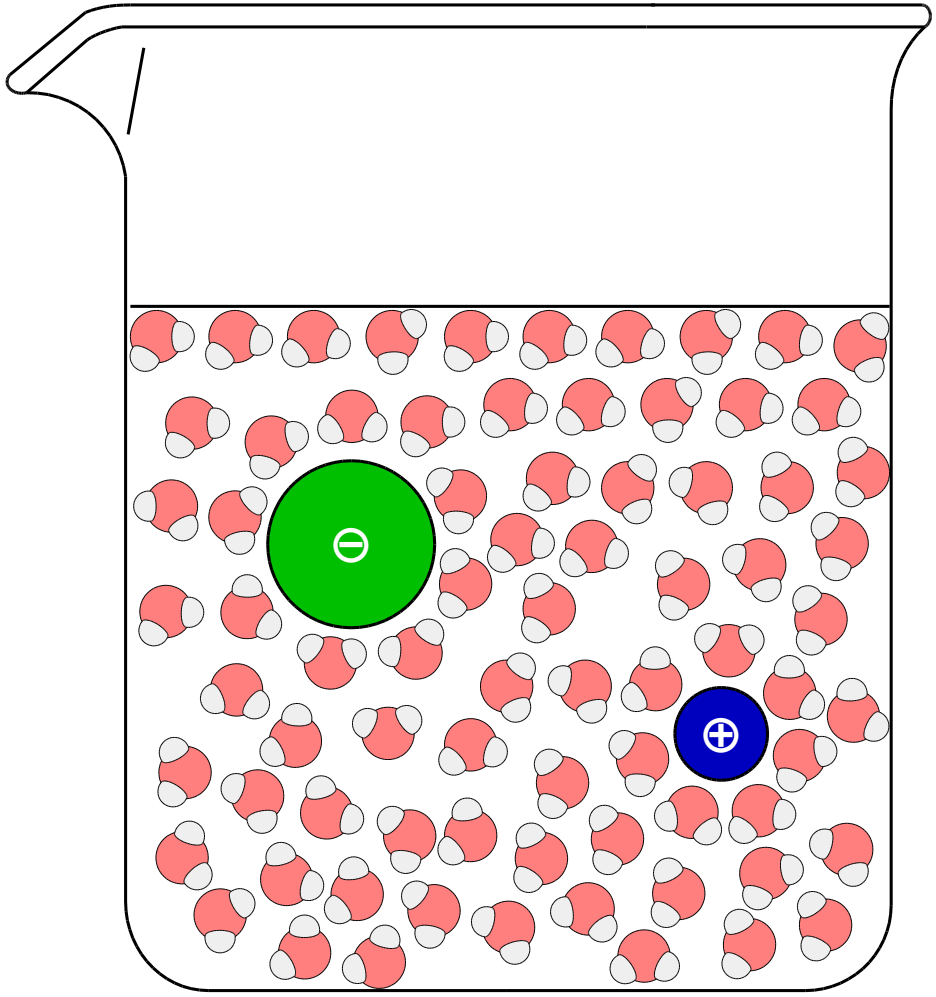
⇒ Entropie nimmt ab

⇒ Ungünstiger Zustand

⇒ Wasser meidet Oberflächen

⇒ z.B. kugelförmige Tropfen

Ionen in wässriger Lösung



Ionen:

Hohe Ordnung der Wassermoleküle in der Hydrathülle

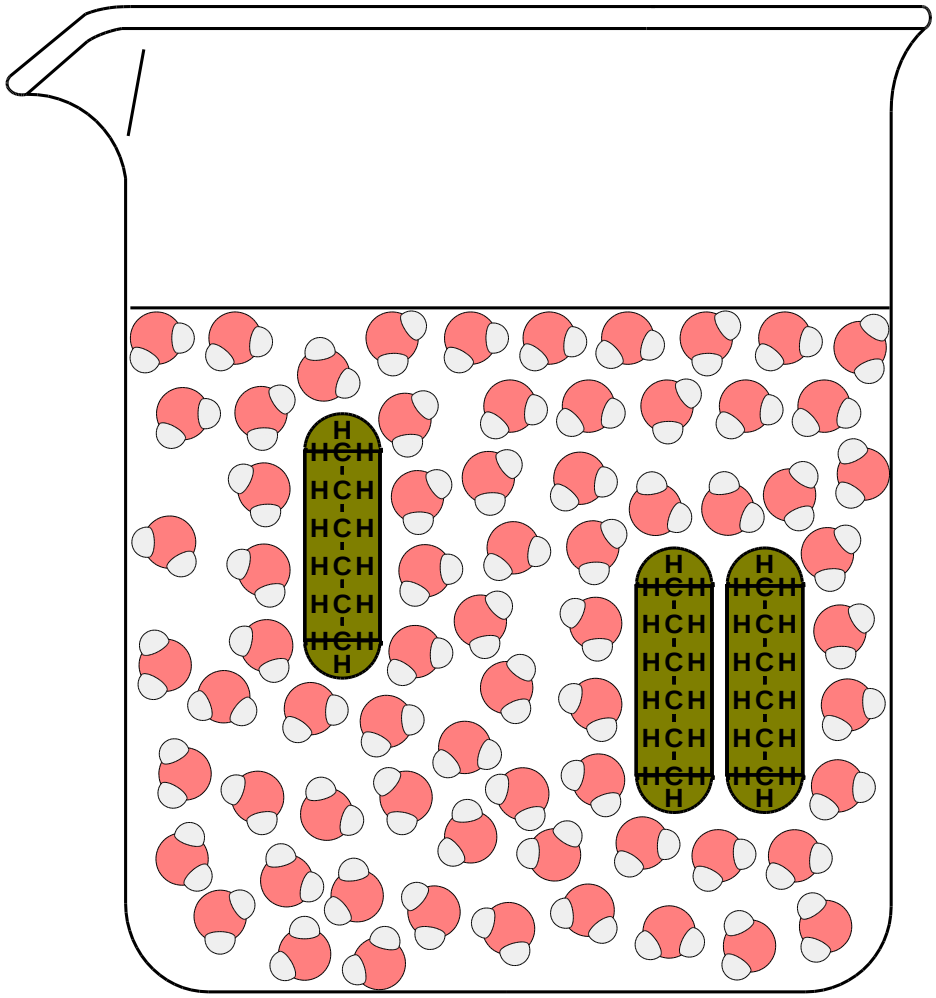
⇒ Entropie nimmt ab

⇒ Ungünstiger Zustand

Aber! Energiegewinn durch Hydratation

⇒ Ionen bleiben gelöst, wenn die Gitterenergie des Kristalls nicht zu groß ist

Öl-Wasser Emulsion



Öltröpfchen:

Hohe Ordnung der Wassermoleküle um die Ölmoleküle

⇒ Entropie nimmt ab

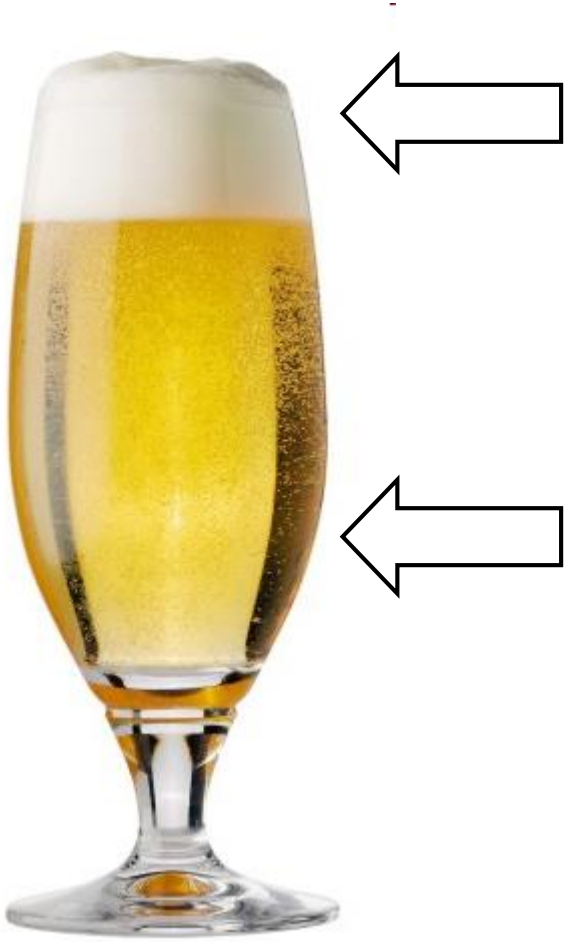
⇒ Ungünstiger Zustand

Kein Ausgleich durch Hydratationsenergie

⇒ Zusammenlagerung der Ölmoleküle (auch bei gleicher Dichte wie Umgebung)

⇒ Wasser meidet auch innere Oberflächen

Ist Bierschaum in Ordnung?



Bier (Schaum):

- sehr dünne Flüssigkeitsfilme
- sehr viel Oberfläche
- hohe Ordnung der Wassermoleküle
- große Zwangsbedingungen

=> niedrige Entropie

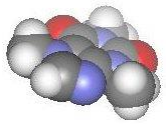
Bier (Flüssigkeit):

- großes Volumen für Wassermoleküle
- kaum Oberfläche
- niedrige Ordnung der Wassermoleküle
- kleine Zwangsbedingungen

=> hohe Entropie

Der Schaum zerfällt! ☹

Weil damit die Entropie des Bierglases inklusive Inhalt insgesamt größer wird. Na denn Prost! ☺



Hydrophilie, Hydrophobie

Hydrophilie:

Die Neigung einer Substanz, in Wasser einzudringen und die Struktur des Wassers zu unterstützen.

hydrophil = lipophob = polar

OH, COOH, NH_2, C=O, geladene Gruppen etc.

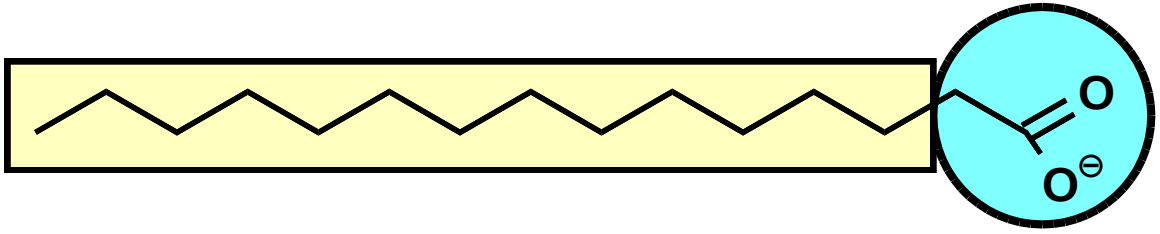
hydrophob = lipophil = unpolar

$-(CH_2)_n-$, Aromaten etc.

Tenside sind *amphiphile* Verbindungen,

d.h. sie zeigen an einem Ende stark *polaren* Charakter *(hydrophil)*, am anderen Ende sind sie *unpolar (hydrophob)*.

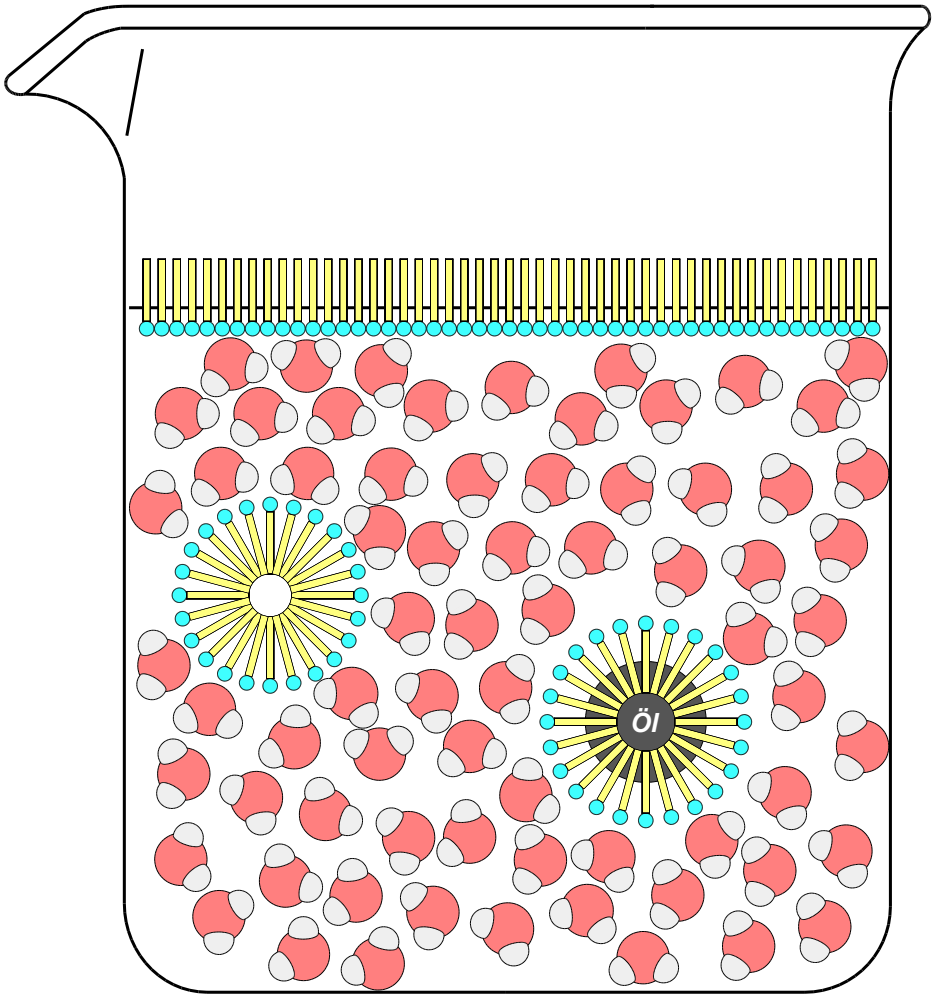
Andere Bezeichnungen: Detergentien, Emulgatoren.



unpolar
lipophil
hydrophob

polar
lipophob
hydrophil

Tenside als Lösungsvermittler



Herabsetzung der Oberflächenspannung:

⇒ Verkleinerung der Tröpfchengrößen, besseres Verfließen

⇒ größere Benetzung von anderen Materialien

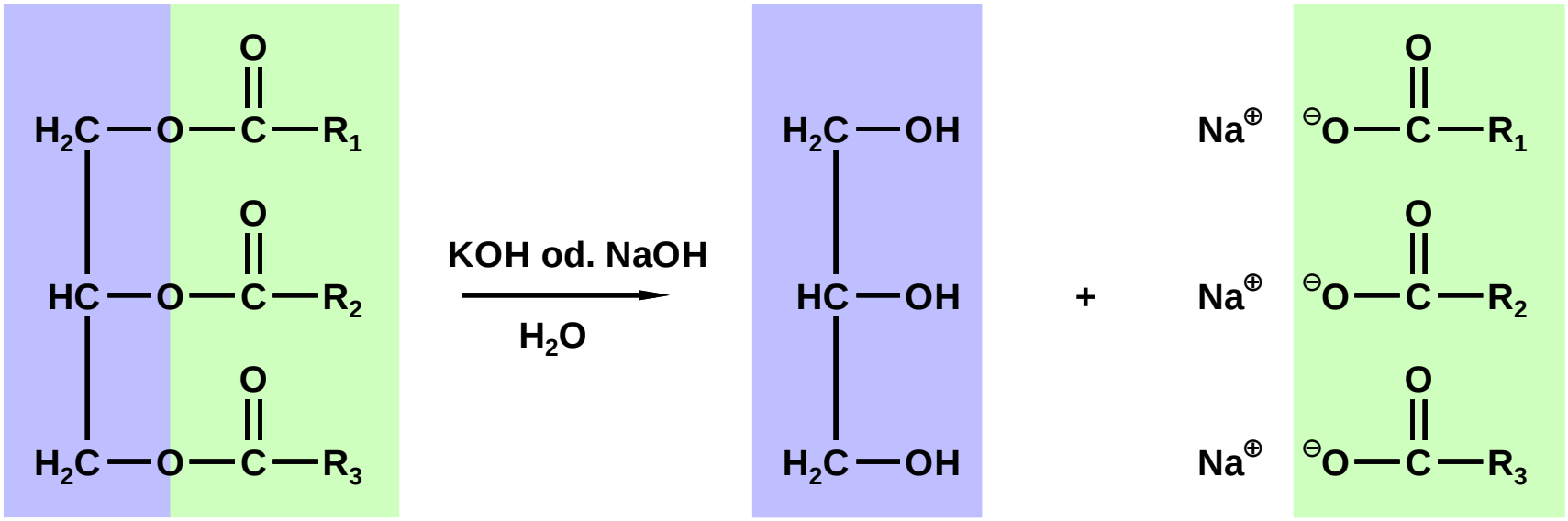
Micellenbildung:

⇒ Zusammenlagerung der Tenside zu „zellartigen“ Körpern

Solubilisierung:

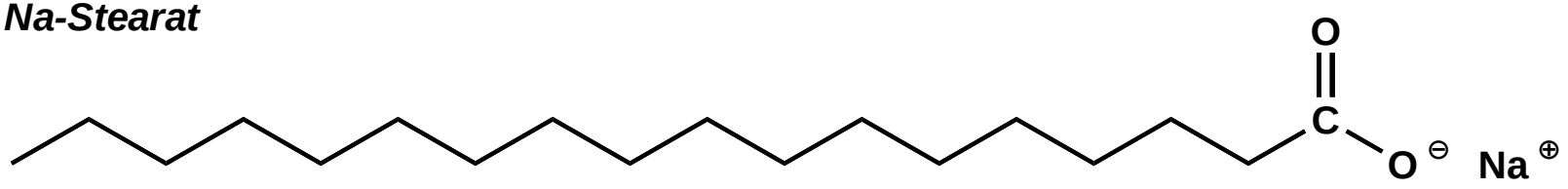
⇒ Einschluss und Transport von hydrophobem Material

Verseifung eines Fetts



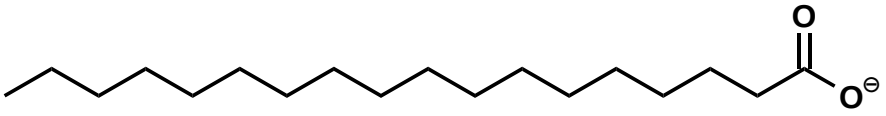
Fett *Glycerin* *Fettsaure Salze (Seifen)*

Na-Stearat

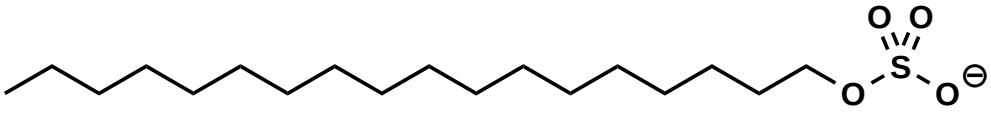


Einige gebräuchliche Tenside (Tabelle 1)

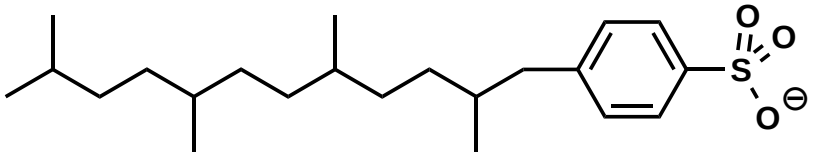
Anionische Tenside



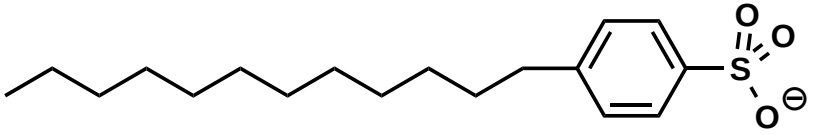
Stearat (Seife)



Fettalkoholsulfat

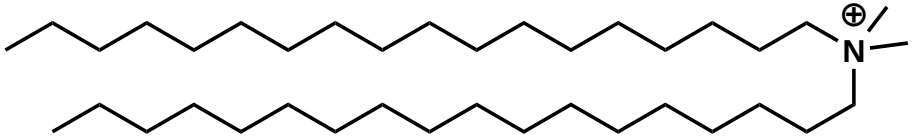


Tetrapropylenbenzolsulfonat (TPS)



Dodecylbenzolsulfonat (DBS)

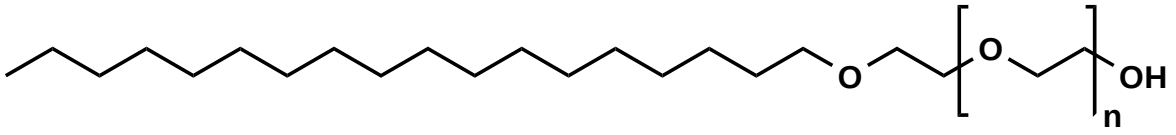
Kationische Tenside



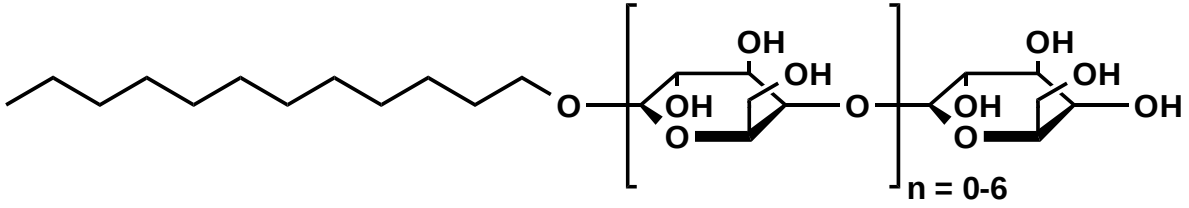
Dimethyldistearylammoniumchlorid

Einige gebräuchliche Tenside (Tabelle 2)

Nichtionische Tenside

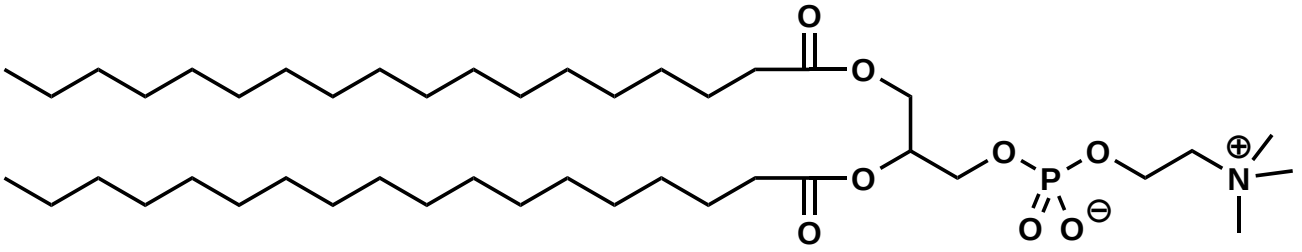


Fettalkoholpolyglycolether



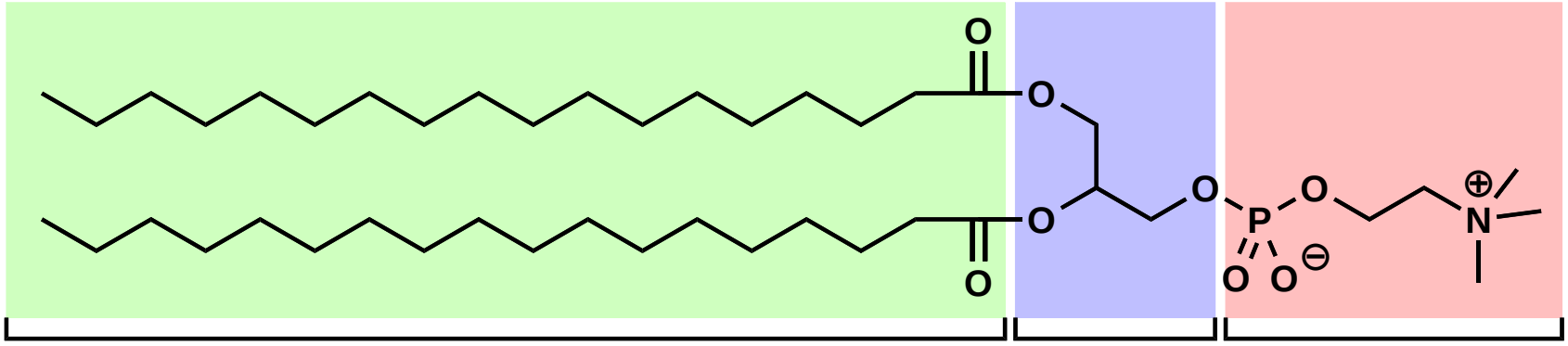
Alkylglycoside (wie z.B. Plantaren®)

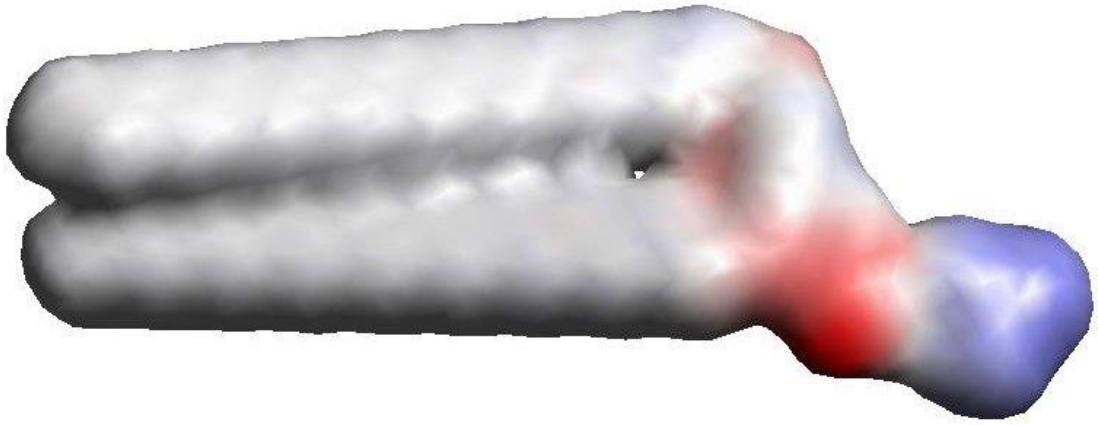
Phospholipide



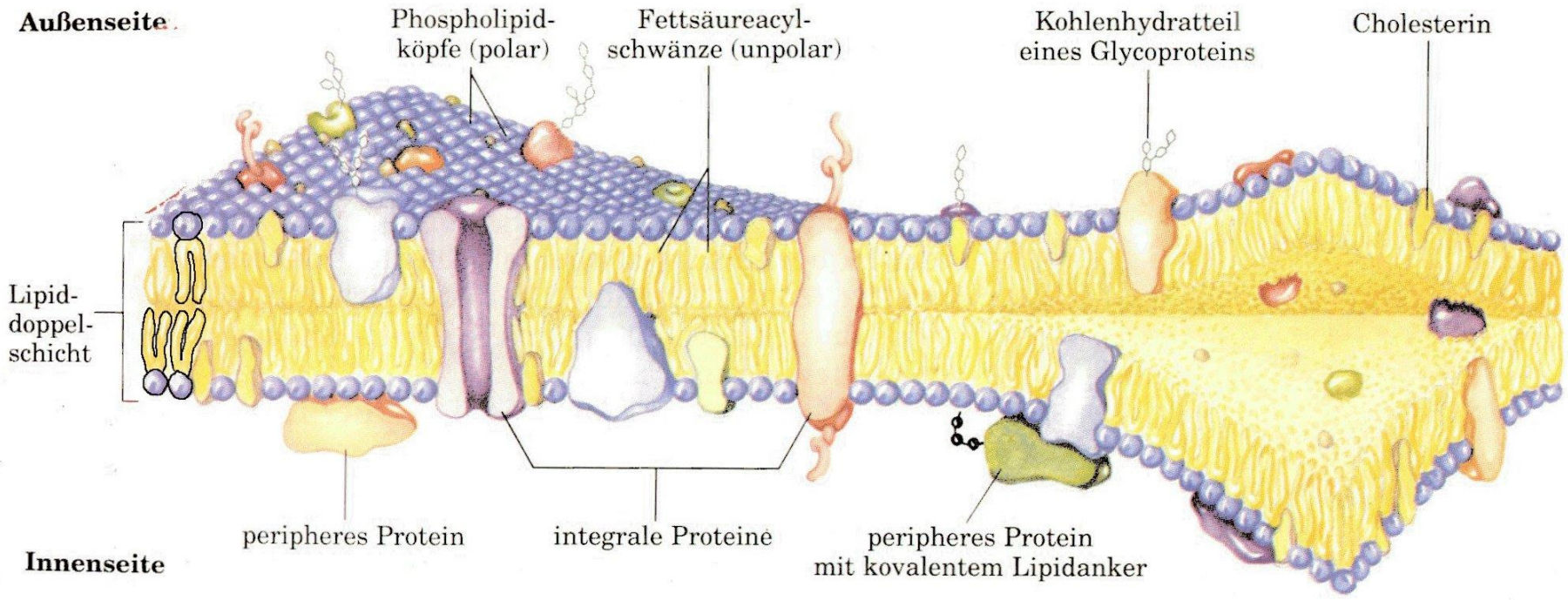
Distearylphosphatidylcholin

Phospholipid z.B. Distearylglycerophosphocholin:

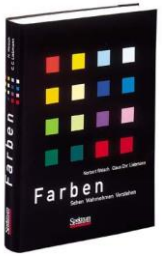




Zellmembran



Organische Farbstoffe und Pigmente



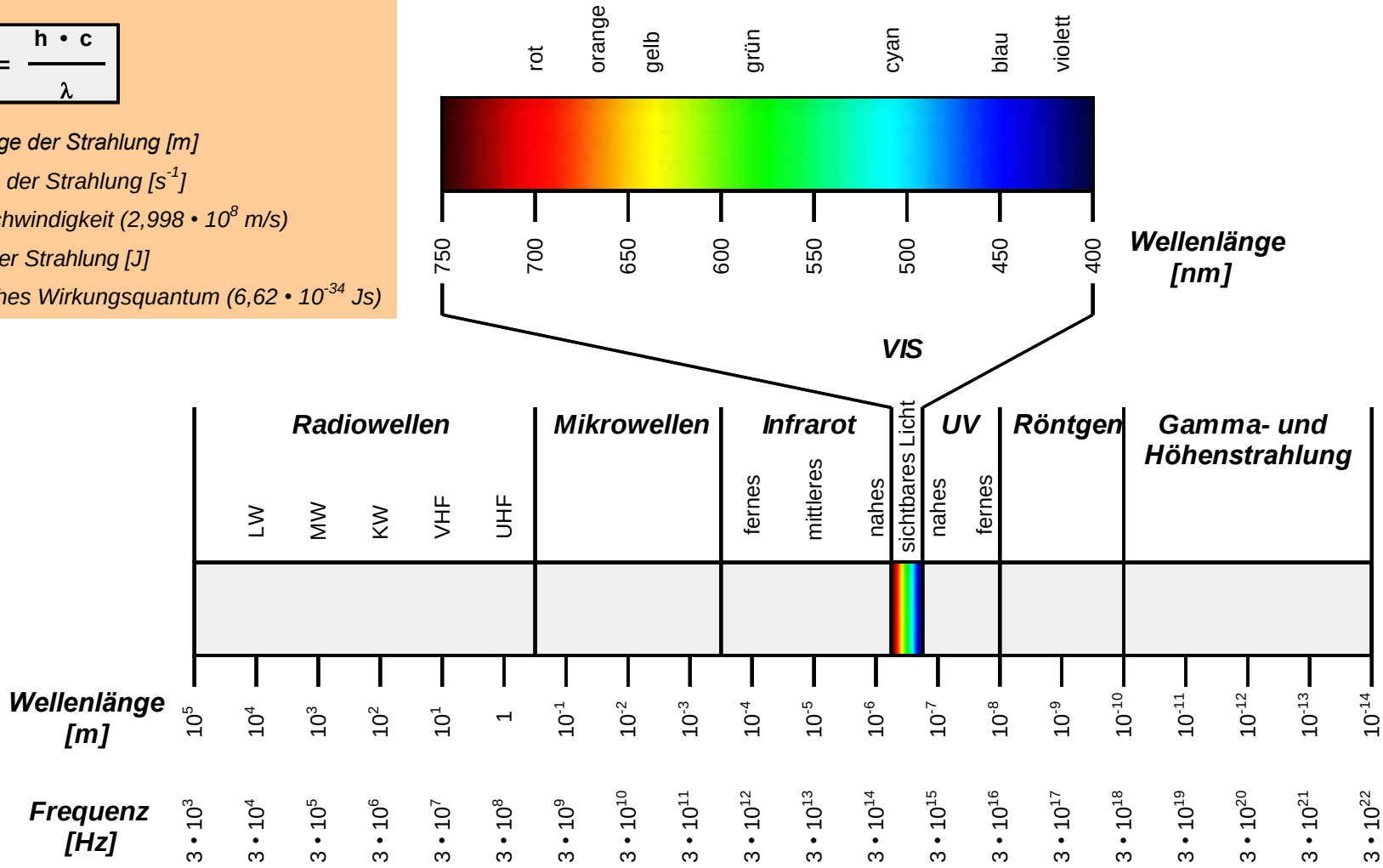
Farben
Norbert Welsch,
Claus Chr. Liebmann
Spektrum Akademischer Verlag
ISBN 3827413834
€ 39,80

Elektromagnetisches Spektrum

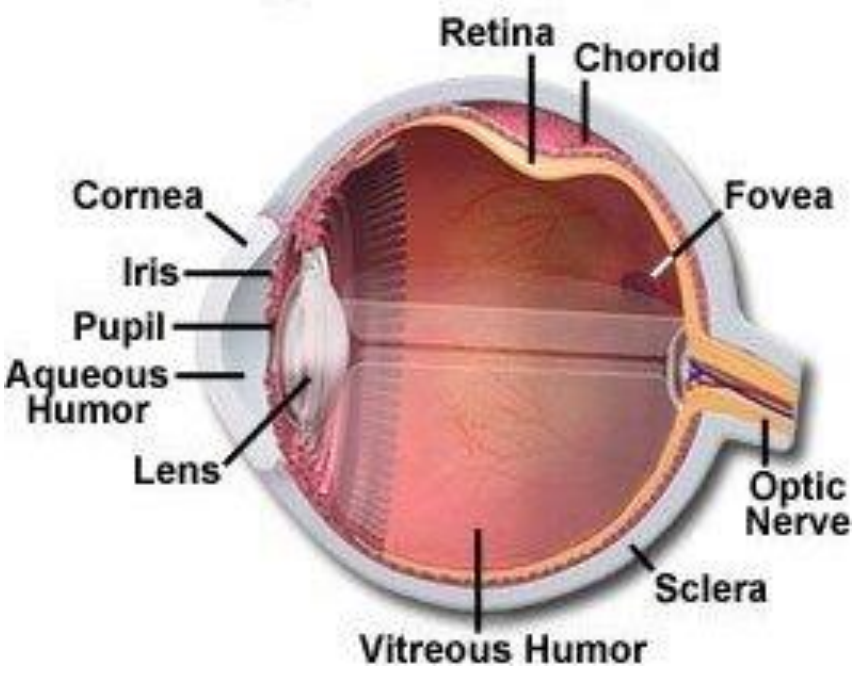
$$\lambda \cdot \nu = c$$

$$E = h \cdot \nu = \frac{h \cdot c}{\lambda}$$

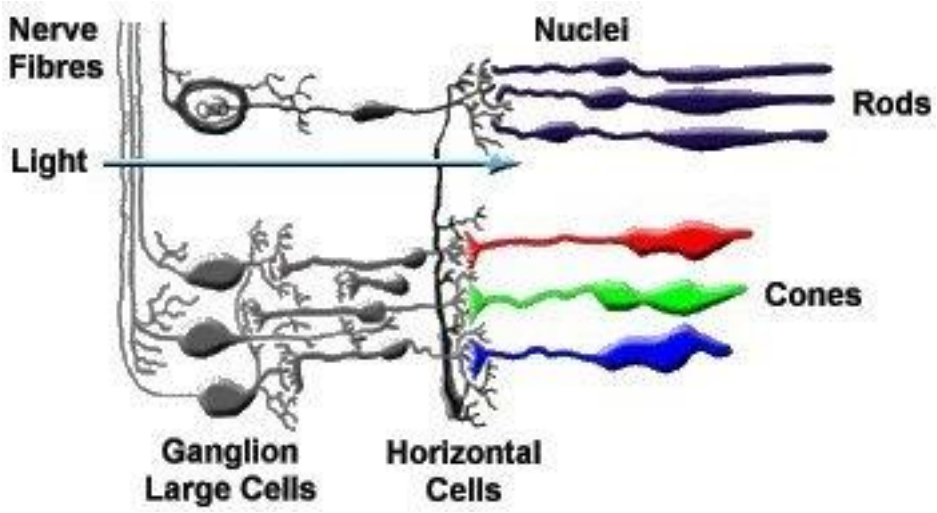
- λ : *Wellenlänge der Strahlung [m]*
- ν : *Frequenz der Strahlung [s^{-1}]*
- **c** : *Lichtgeschwindigkeit (2,998 • 10^8 m/s)*
- **E** : *Energie der Strahlung [J]*
- **h** : *Plancksches Wirkungsquantum (6,62 • 10^{-34} Js)*



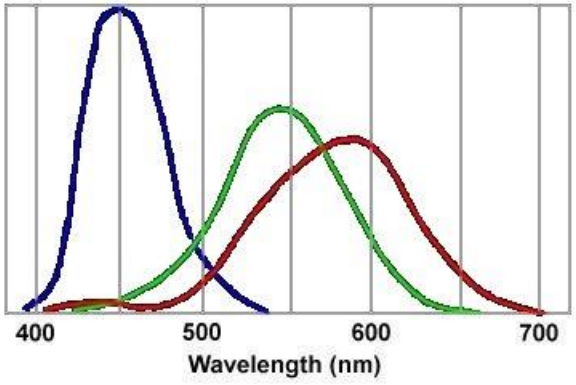
Anatomie des Auges:



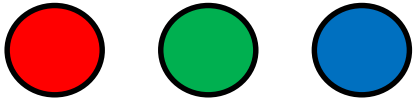
Retina:



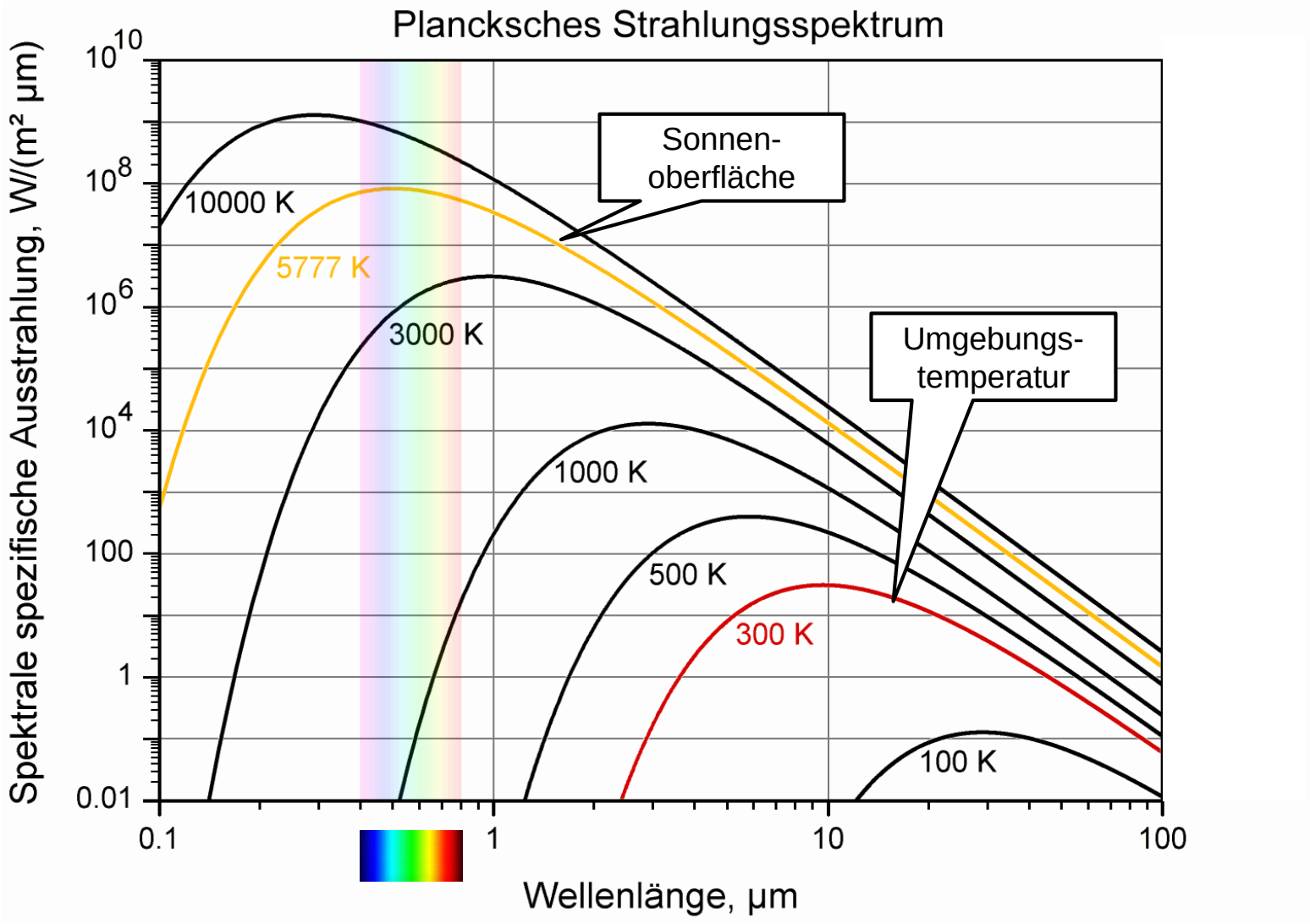
Empfindlichkeit der Zäpfchen:



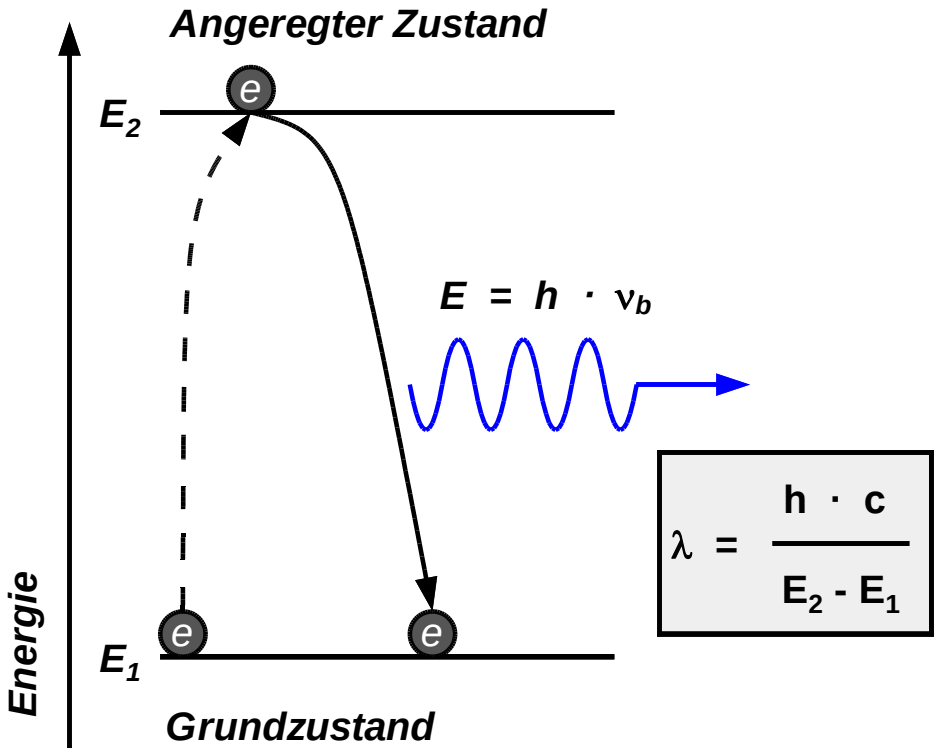
Rot – Grün – Blau (RGB):



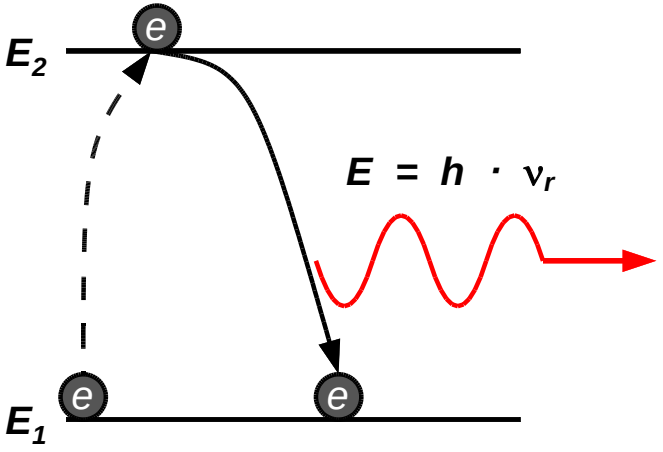
1. Wie Licht entsteht (thermisch, kontinuierlich)



2. Wie Licht entsteht (diskrete Spektrallinien)



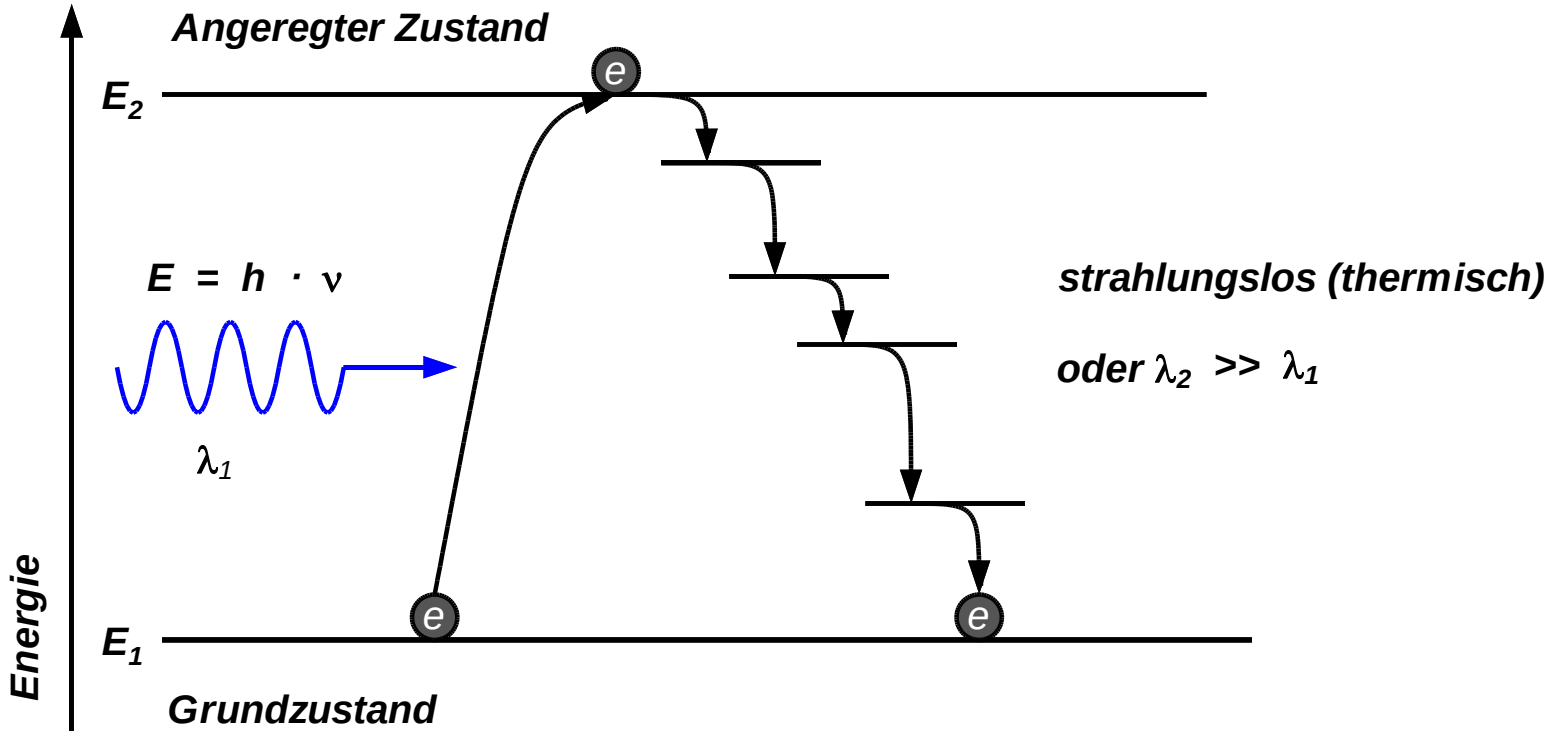
$$\lambda = \frac{h \cdot c}{E_2 - E_1}$$



Großer Energieunterschied E_2-E_1:
=> kleine Wellenlänge (hohe Frequenz)
=> Emission am "blauen Ende"

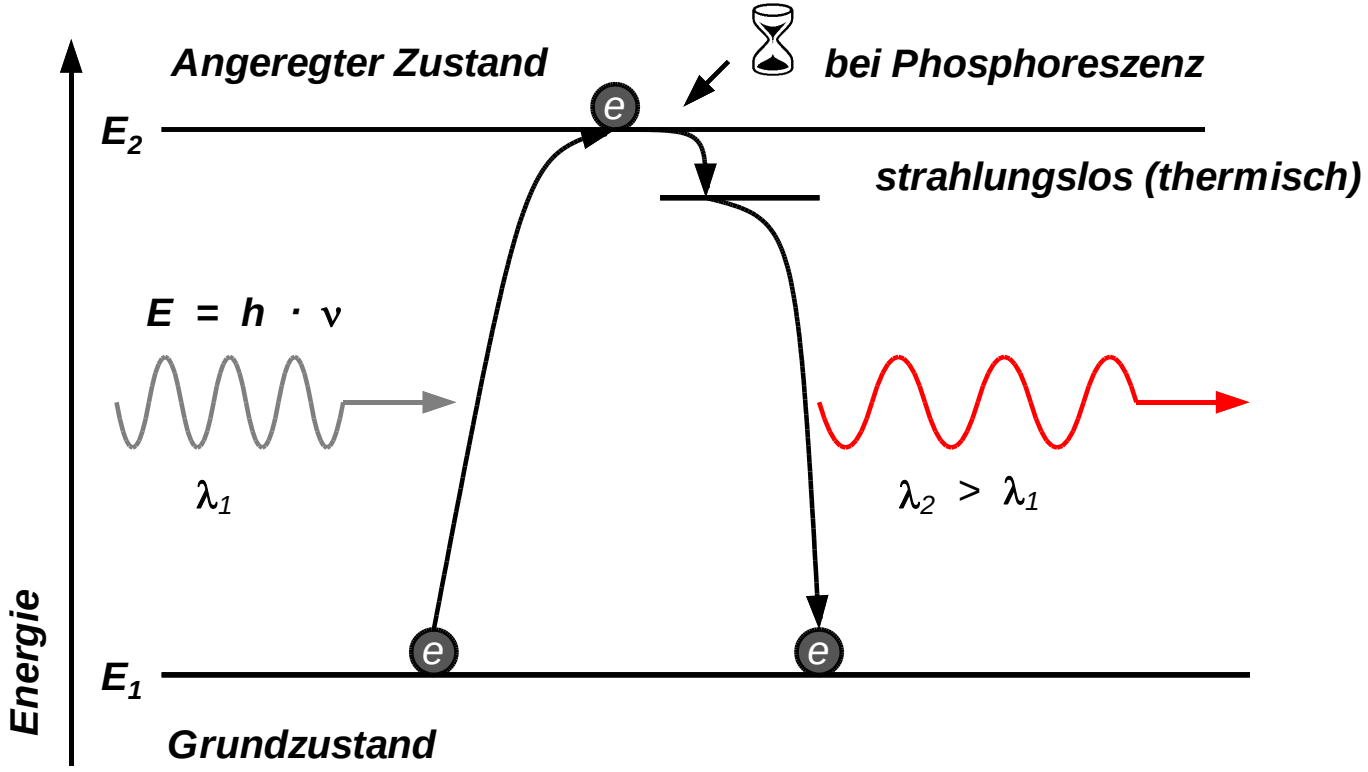
Kleinerer Energieunterschied E_2-E_1:
=> größere Wellenlänge (niedrigere Frequenz)
=> Emission am "roten Ende"

Wie Licht verschwindet (Absorption)



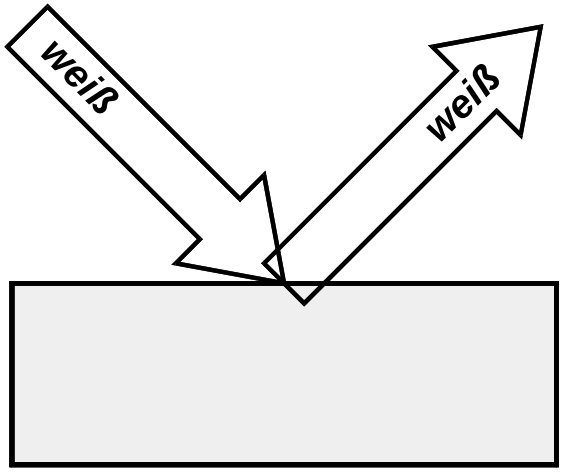
Eingestrahltes Licht bestimmter Wellenlänge wird nach der Absorption in kleinen Paketen "strahlungslos" an die Umgebung abgegeben.
=> Diese Anteile fehlen im reflektierten Licht

Fluoreszenz und Phosphoreszenz



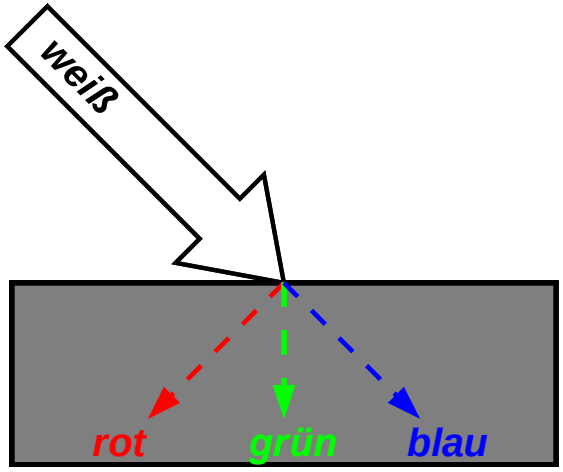
Eingestrahltes Licht bestimmter Wellenlänge wird nach der Absorption "in der Energie reduziert" und als Licht größerer Wellenlänge reflektiert.
=> So wird z.B. aus UV-Licht blaues oder rotes Licht (Leuchtfarben, Textmarker)

Wie Farbe entsteht (Selektive Absorption)



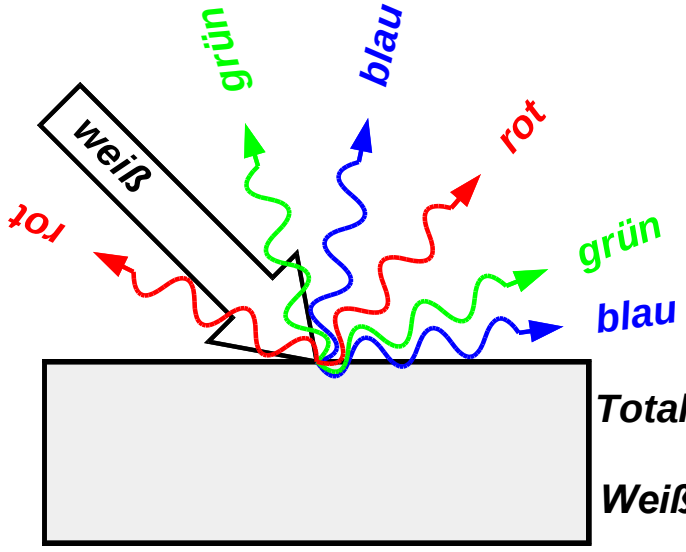
Totale Reflexion

Spiegel



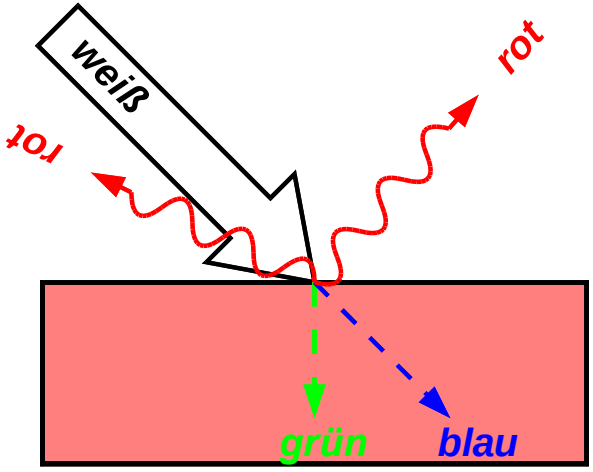
Totale Absorption

Schwarze Fläche



Totale Streuung

Weiße Fläche

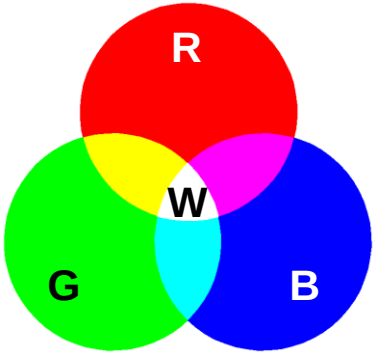


Selektive Absorption

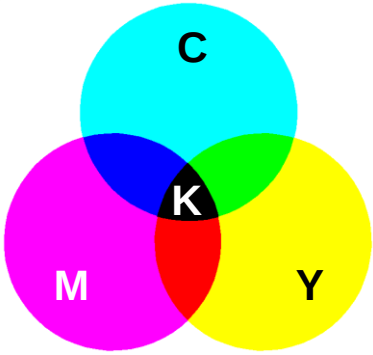
Farbige Fläche

Farbmischung (additiv und subtraktiv)

Addition von Lichtfarben z.B. Scheinwerfer oder Display



Subtraktion von Körperfarben z.B. Wasser- oder Druckerfarben auf weißem Papier

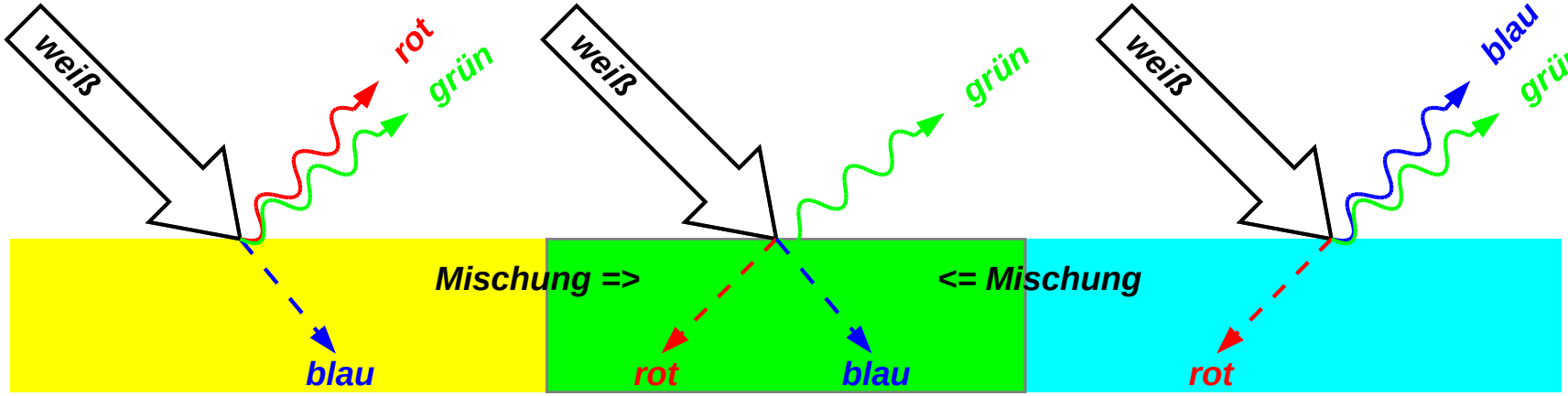


ADDITIVE Mischung von Lichtfarben

rot + grün = gelb

ADDITIVE Mischung von Lichtfarben

blau + grün = cyan



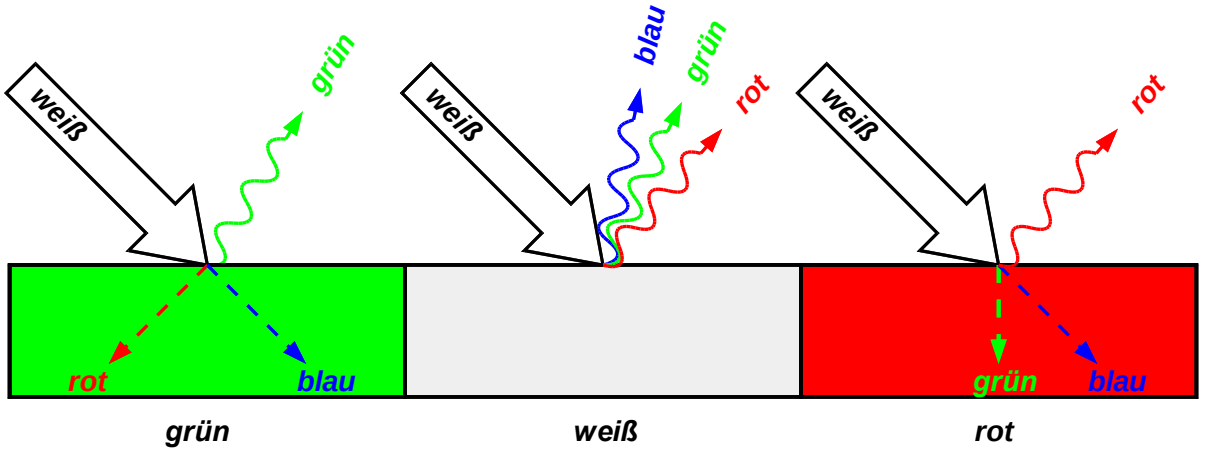
Selektive Absorption von Blau
weiß - blau = gelb

SUBTRAKTIVE Mischung von Körperfarben
gelb + cyan = grün

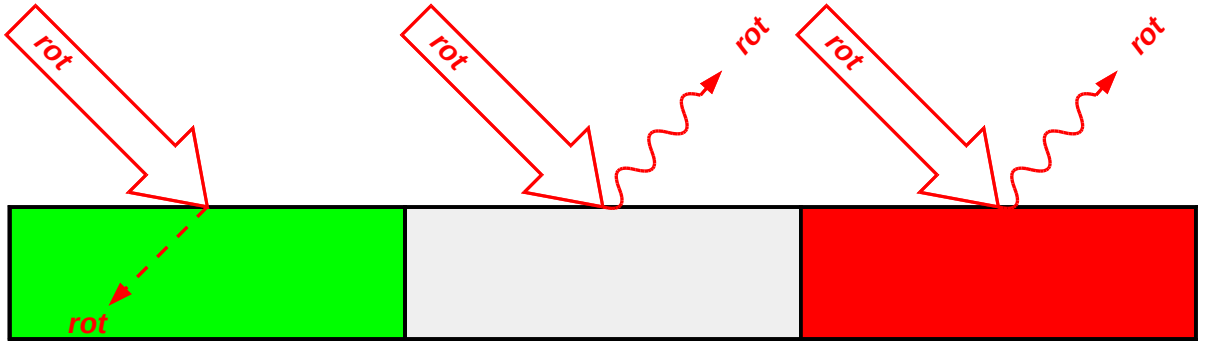
Selektive Absorption von Rot
weiß - rot = cyan

Italien im Rotlicht

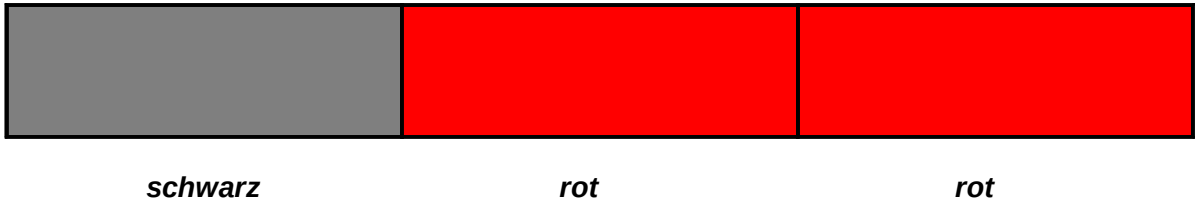
Weißes Licht:

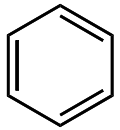


Rotes Licht:



Sichtbar:



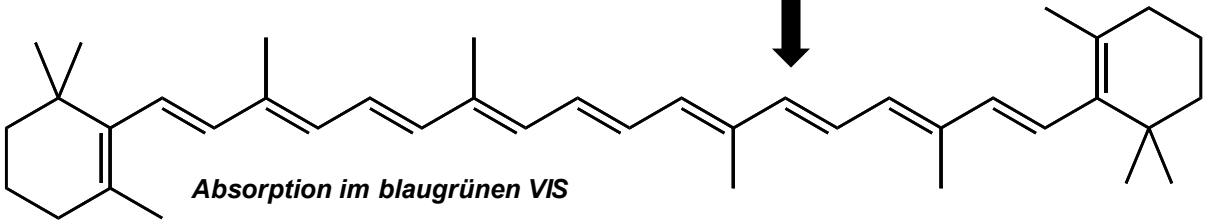


Benzol

Absorption nur im UV

⇨ *FARBLOS*

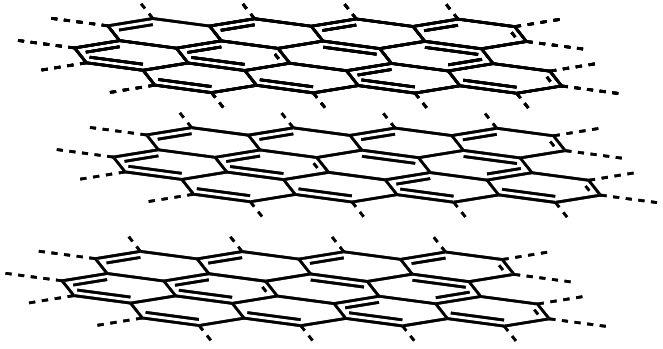
Chromophor:
großes konjugiertes
π-Elektronensystem



β-Carotin

Absorption im blaugrünen VIS

⇨ *ORANGE*

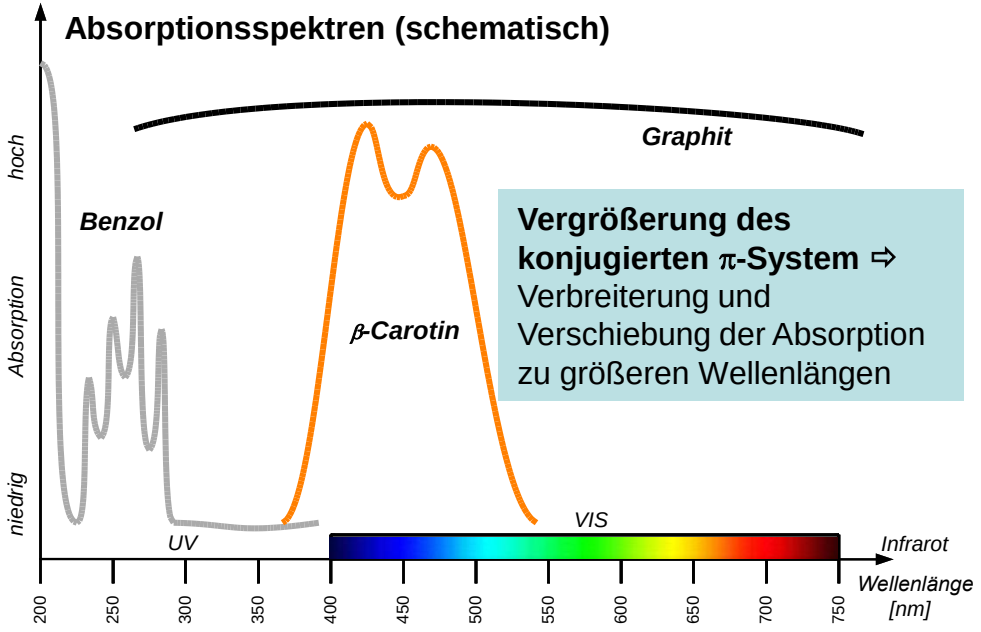


Graphit

Absorption im gesamten VIS

⇨ ***SCHWARZ***

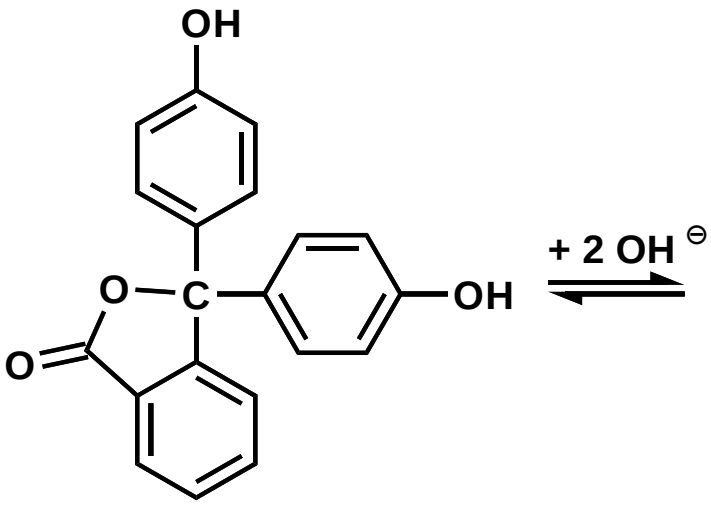
Absorptionsspektren (schematisch)



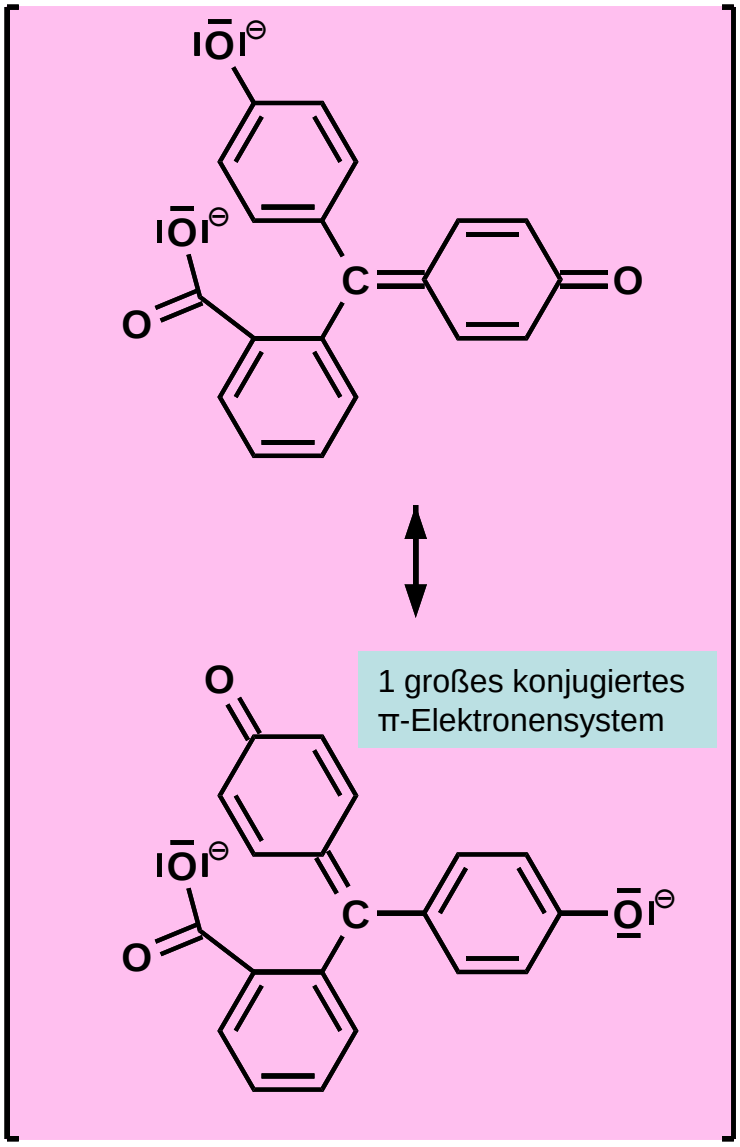
Vergrößerung des konjugierten π-System ⇨
Verbreiterung und
Verschiebung der Absorption
zu größeren Wellenlängen

Säure/Base-Indikator Phenolphthalein

3 kleinere konjugierte π-Elektronensysteme



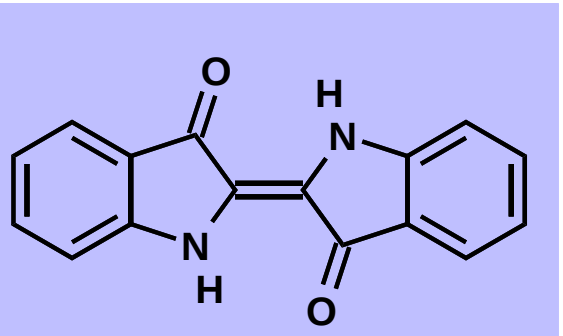
Sauer / Neutral
farblos



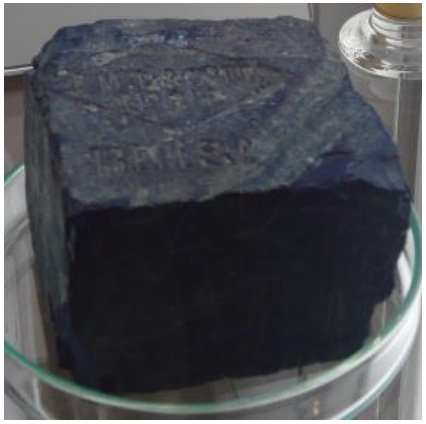
1 großes konjugiertes π-Elektronensystem

Basisch
rot

(Natürliche) Organische Farbstoffe: Indigo



Indigotin

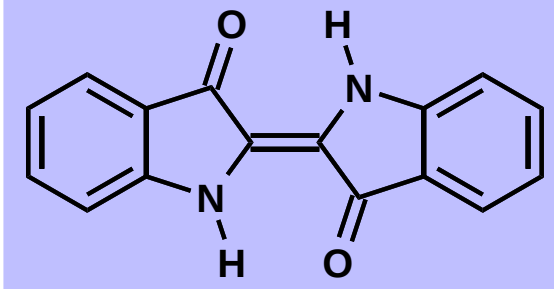


Indigo
natürlich und
künstlich

Indigopflanze
Indigoferia tinctoria

Färberwaid
Isatis tinctoria L.

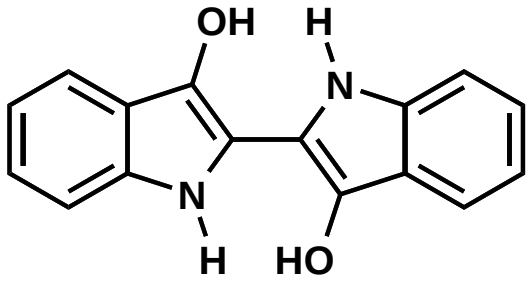
Küpenfärben mit Indigo



Indigotin (blau)
(nicht wasserlösl.)

Reduktion

Na-Dithionit
$Na_2S_2O_4$
(früher mit Urin)



Leukindigo (Indigweiß)
als Na-Salz ("farblos", wasserlösl.)

Pflanzl./tier. Garne "färben"

Weißes Tuch

An der Luft aufhängen

Oxidation

Blaues Tuch

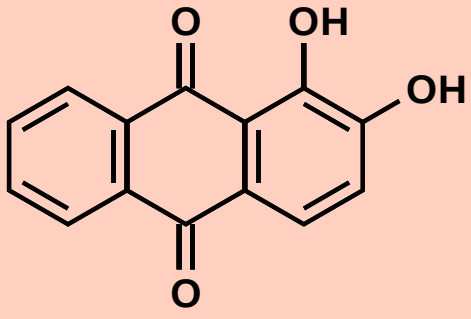
Indigo ist der Jeans-Farbstoff

Küpe

Beizenfärberei mit Krapp

Färberröte (Krapp)
Rubia tinctoria L.

Uniform eines Offiziers der Königlichen Polnischen Garde aus dem Jahr 1732



Alizarin

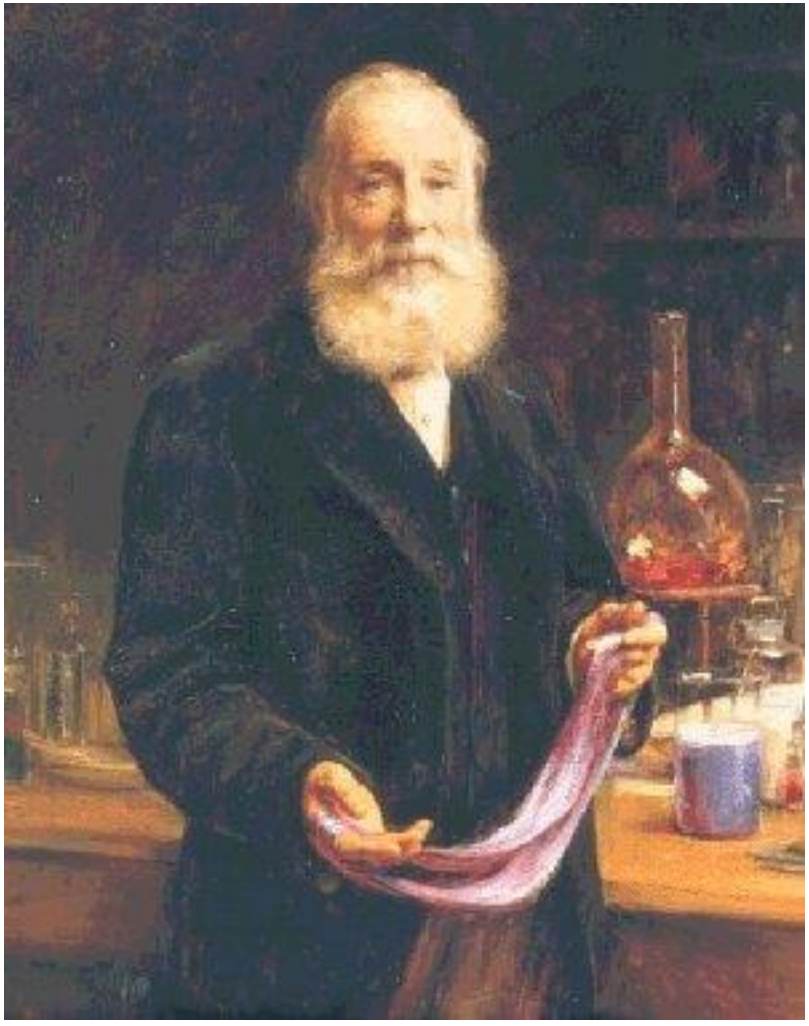
Beizenfärberei (Verlackung)

Alaun $KAl(SO_4)_2$

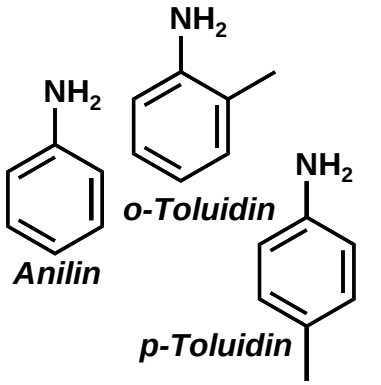
Alizarin-Aluminium-Komplex (tiefroter Krapp-Lack)

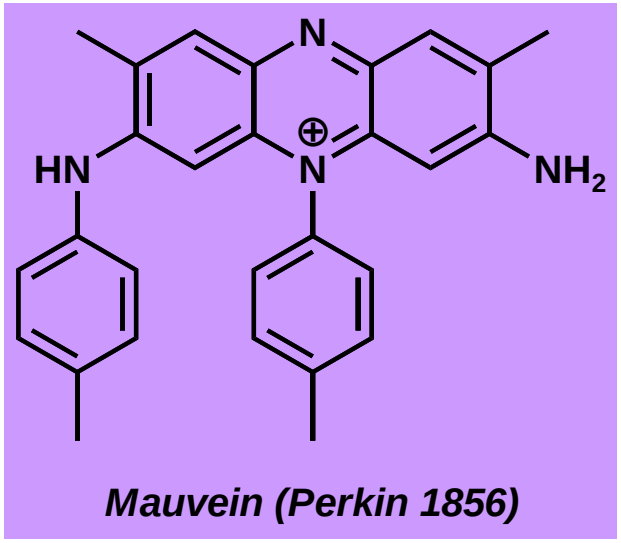
vereinfachte Darstellung

Teerfarben: William Perkin



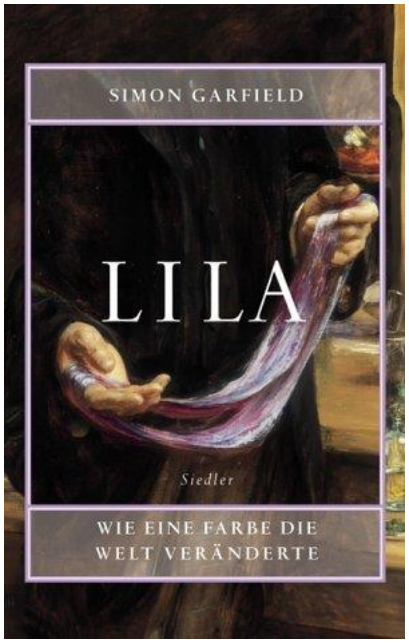
Sir William Henry Perkin
(1838-1907)





Greenford Green
(Harrow, Middlesex, UK)

Teerfarben: Mauvein



Lila - Wie eine Farbe die Welt veränderte
Simon Garfield
Siedler, 2001
ISBN 3886807193
€ 19,95

Stoffprobe für Queen Victoria

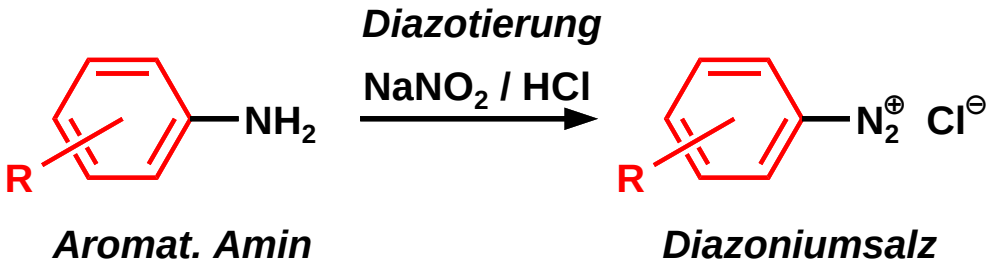
Schal aus dem Jahr 1862

Briefmarke 1901

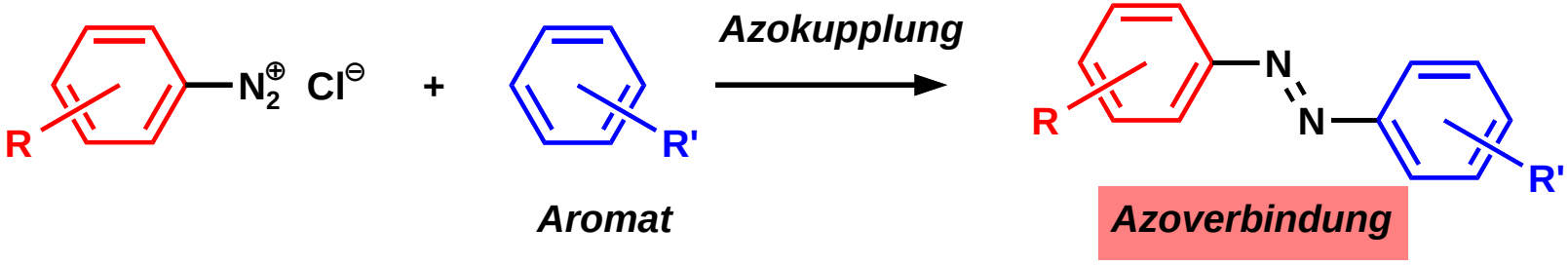
Juliette Récamier

Biedermeiermode:
meist weiß oder schwach gefärbt
rot und blau meist nur für Uniformen

Mauvein



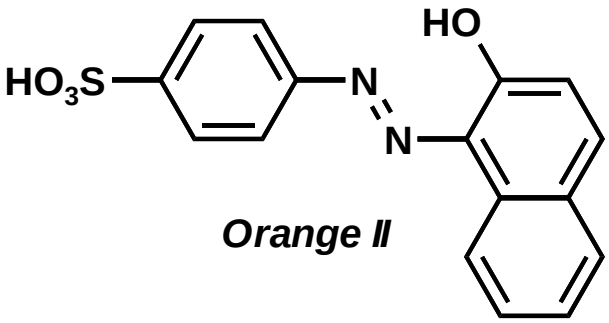
Aromat. Amin *Diazoniumsalz*



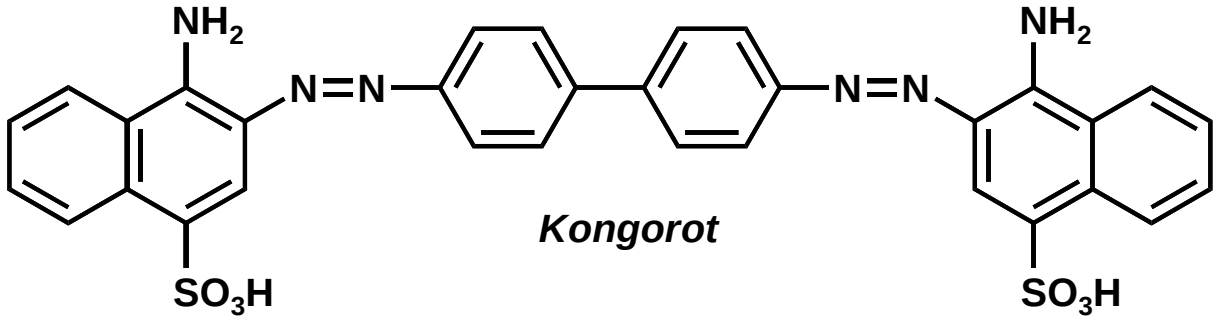
Aromat

Erlaubt die gezielte Synthese von Farbstoffen und Pigmenten

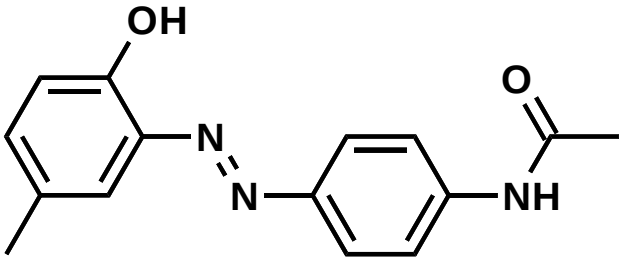
Azofarbstoffe: Beispiele



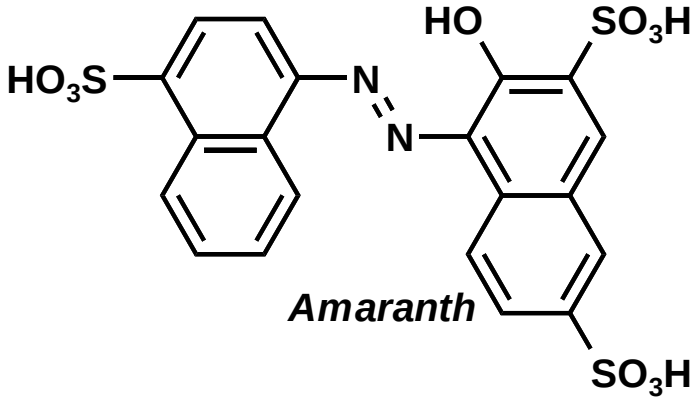
Orange II



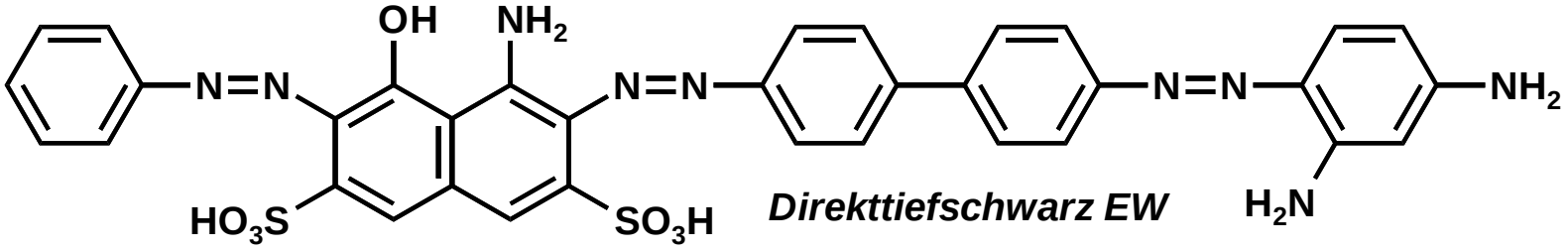
Kongorot



Cellitonechtgelb G

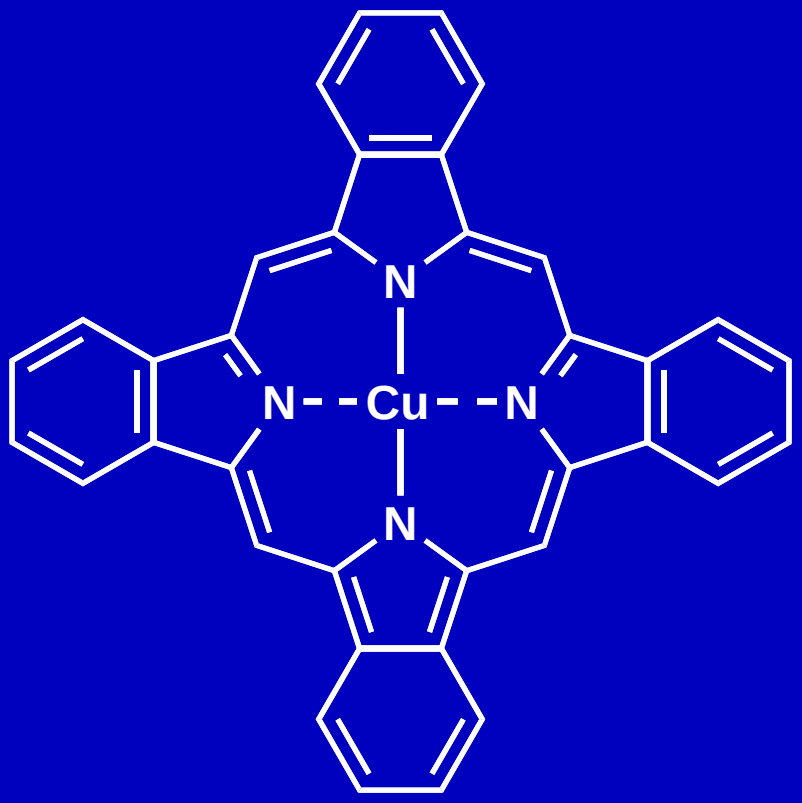


Amaranth



Direkttiefschwarz EW

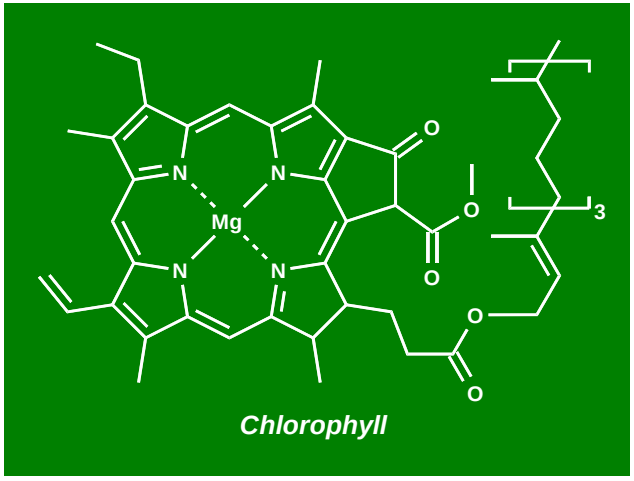
Phthalocyanine



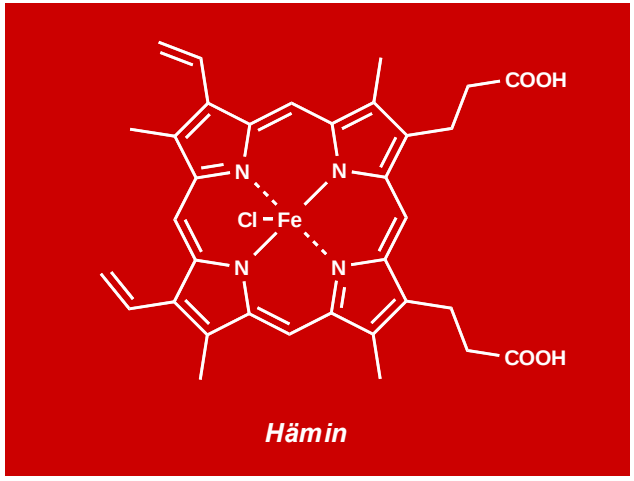
Kupferphthalocyanin

C.I. Pigment Blau 15

Natürliche Verwandten der Phthalocyanine:

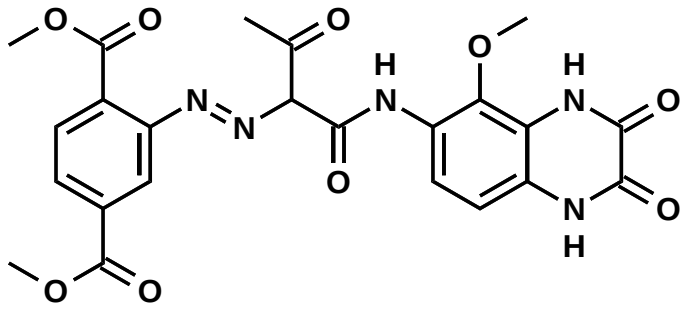


Chlorophyll

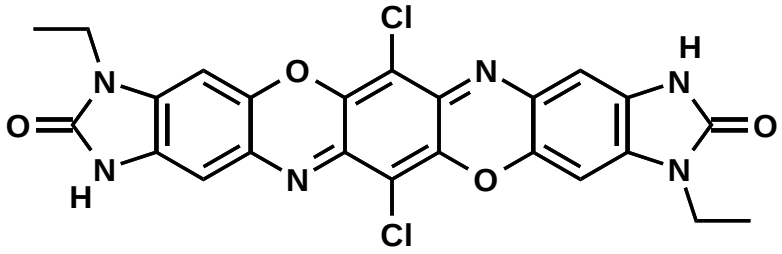


Hämin

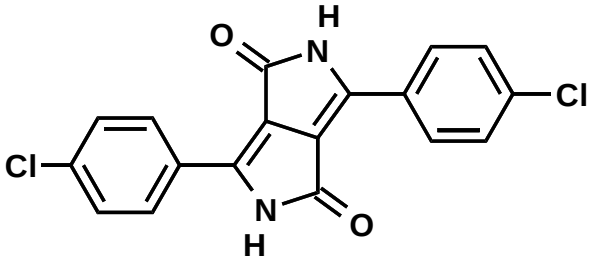
Hochleistungspigmente



Hostaperm-Gelb H5G
C.I. Pigment Yellow 213



Hostaperm-Blau R5R
C.I. Pigment Blue 80



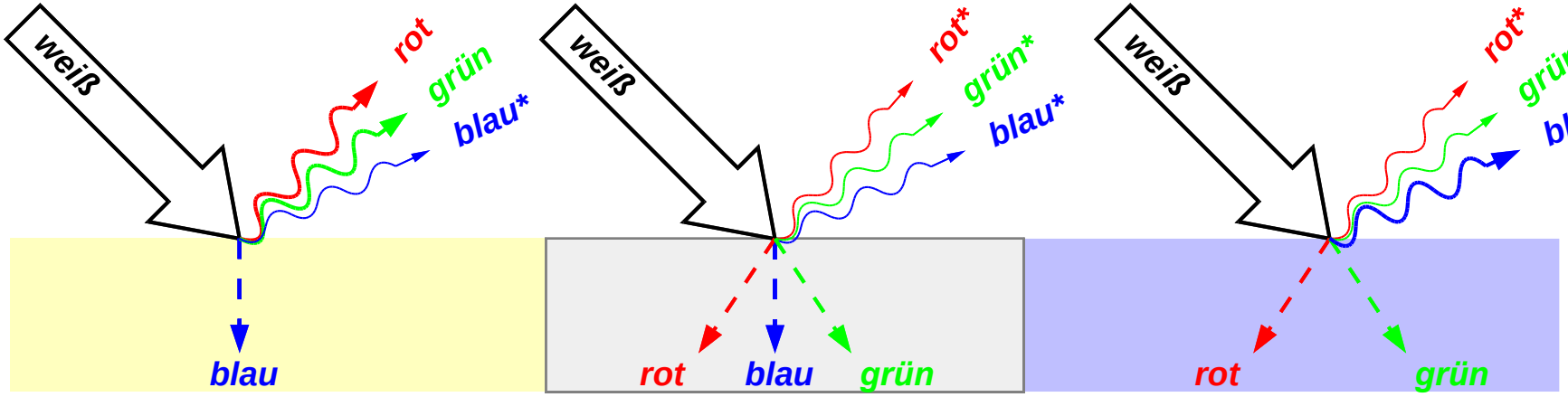
Hostaperm-Rot D2G 70
C.I. Pigment Red 254

Ferrari 812 Superfast 800 PS V12

Blauwäsche gegen vergilbte Wäsche

rot + grün + blau= schwachgelb*

rot + grün* + blau = schwachblau*



Schwache Absorption von Blau
weiß - wenig blau = schwachgelb

schwachgelb +
schwachblau =
hellgrau

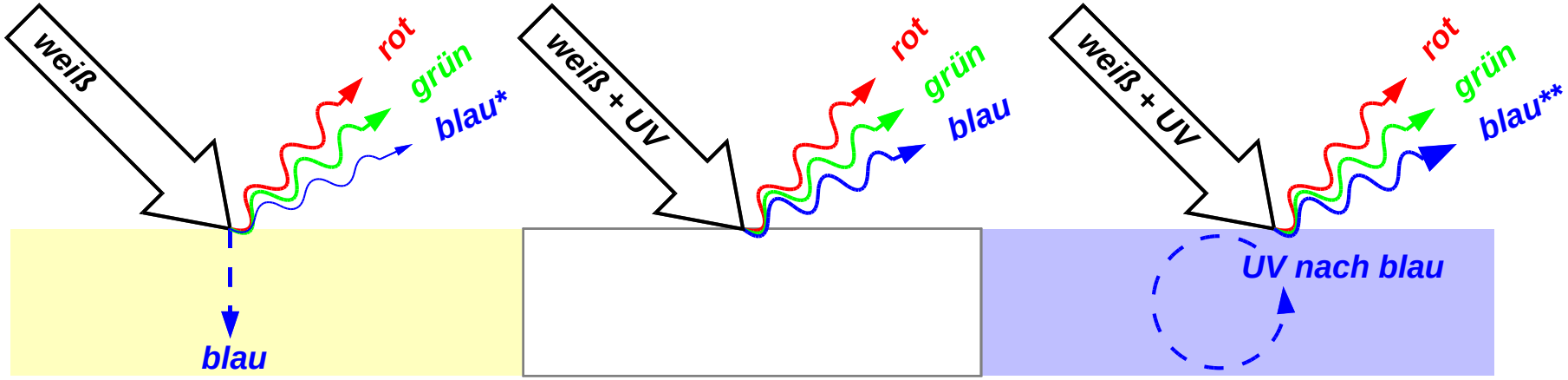
Schwache Absorption
von Rot und Grün
(oder niedrige Konzentration)
weiß - wenig rot - wenig grün =
schwachblau

** = geschwächte Farbanteile*

Optische Aufheller: Prinzip

rot + grün + blau= schwachgelb*

*rot + grün + blau** = überblau*



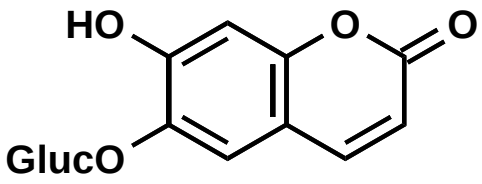
Schwache Absorption von Blau
weiß - wenig blau = schwachgelb

schwachgelb +
überblau = weiß

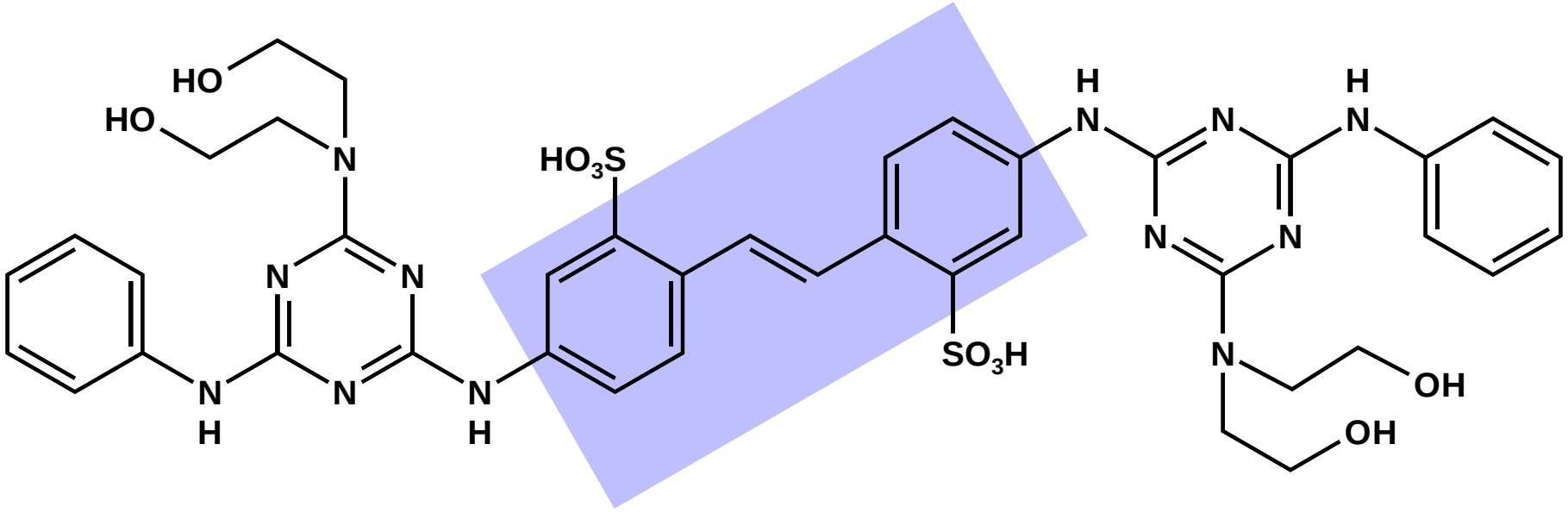
Fluoreszenz
weiß + wenig blau = überblau

** = geschwächte Farbanteile, ** = gestärkte Farbanteile*

Optische Aufheller: Beispiele

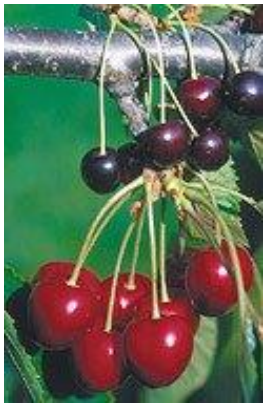


Aesculin (aus z.B. der Roßkastanie)
Glycosid des 6,7-Dihydroxycumarin

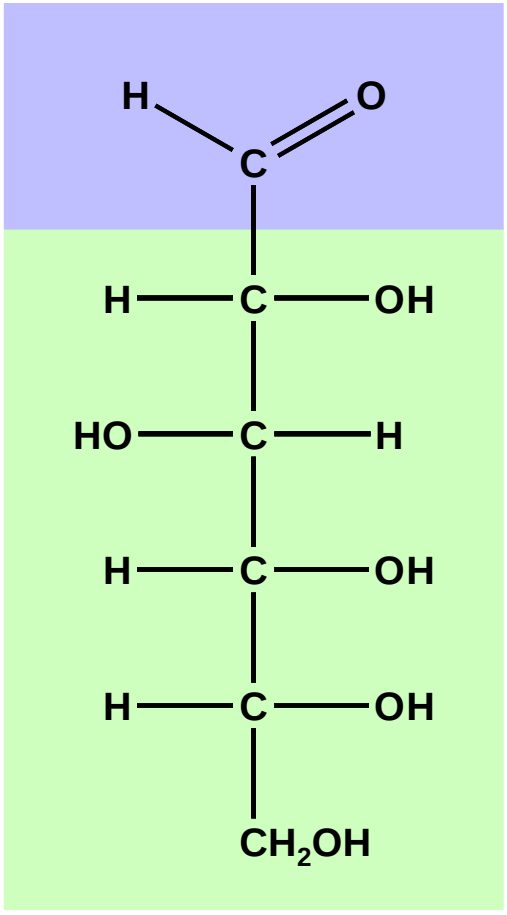


C.I. Fluorescent Brightening Agent 28
(ein Stilben-Derivat)

Allgemeine Summenformel: $C_n(H_2O)_n$



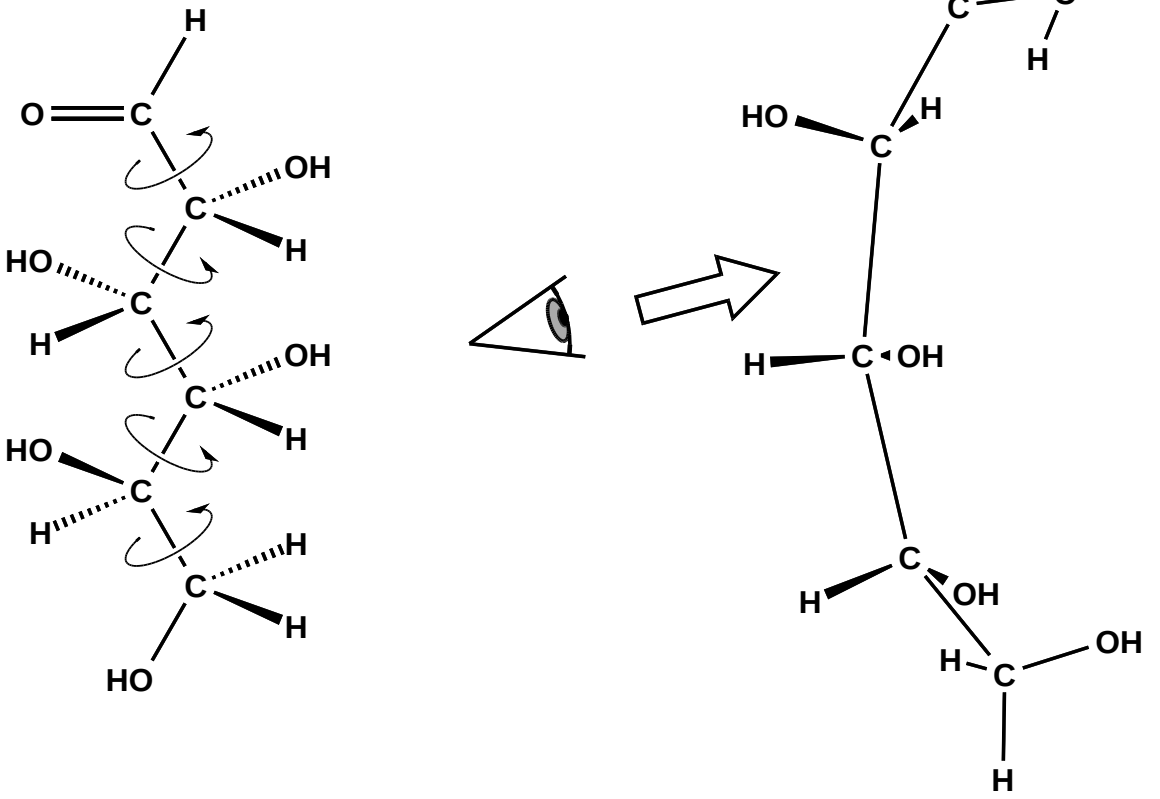
Glucose, der Standardzucker



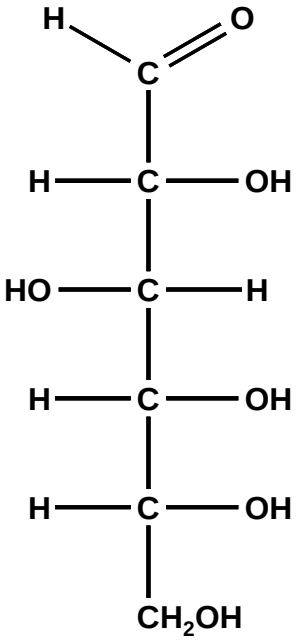
Aldehyd

Polyol

Fischerprojektion



Höchstoxidiertes
C-Atom liegt oben



Vertikale Bindungen
zeigen „nach hinten“

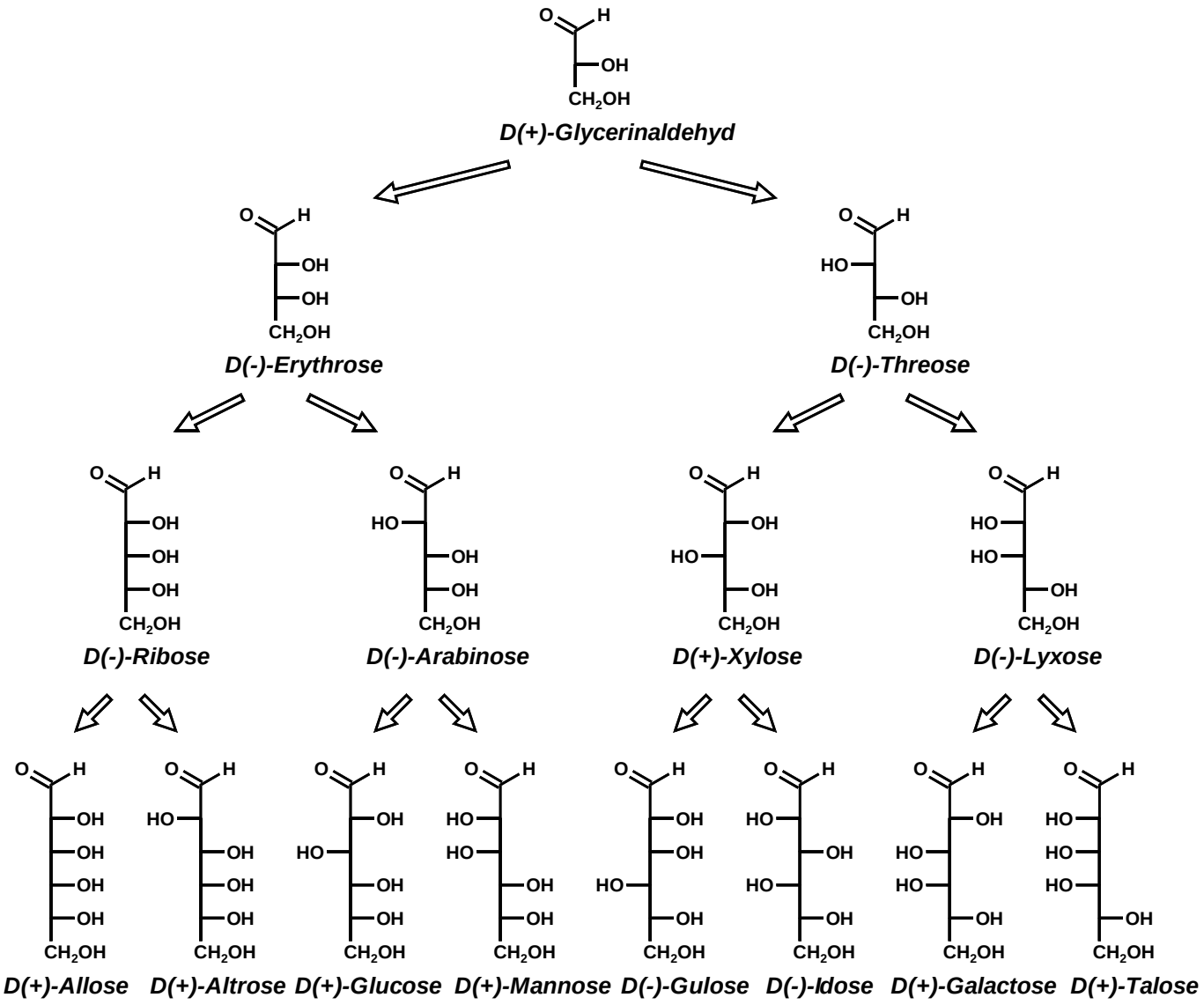
Horizontale Bindungen
zeigen „nach vorne“

		C_4-Epimer	***C_5-Epimer***	***kein Epimer***	***Spiegelbild***
O, H	1	O, H	O, H	O, H	O, H
OH	2	OH	OH	HO	HO
HO	3	HO	HO	HO	OH
OH	4	HO	OH	HO	HO
OH	5	OH	OH	OH	HO
OH	6	OH	OH	OH	OH

C_1 und C_6 sind keine Stereozentren!

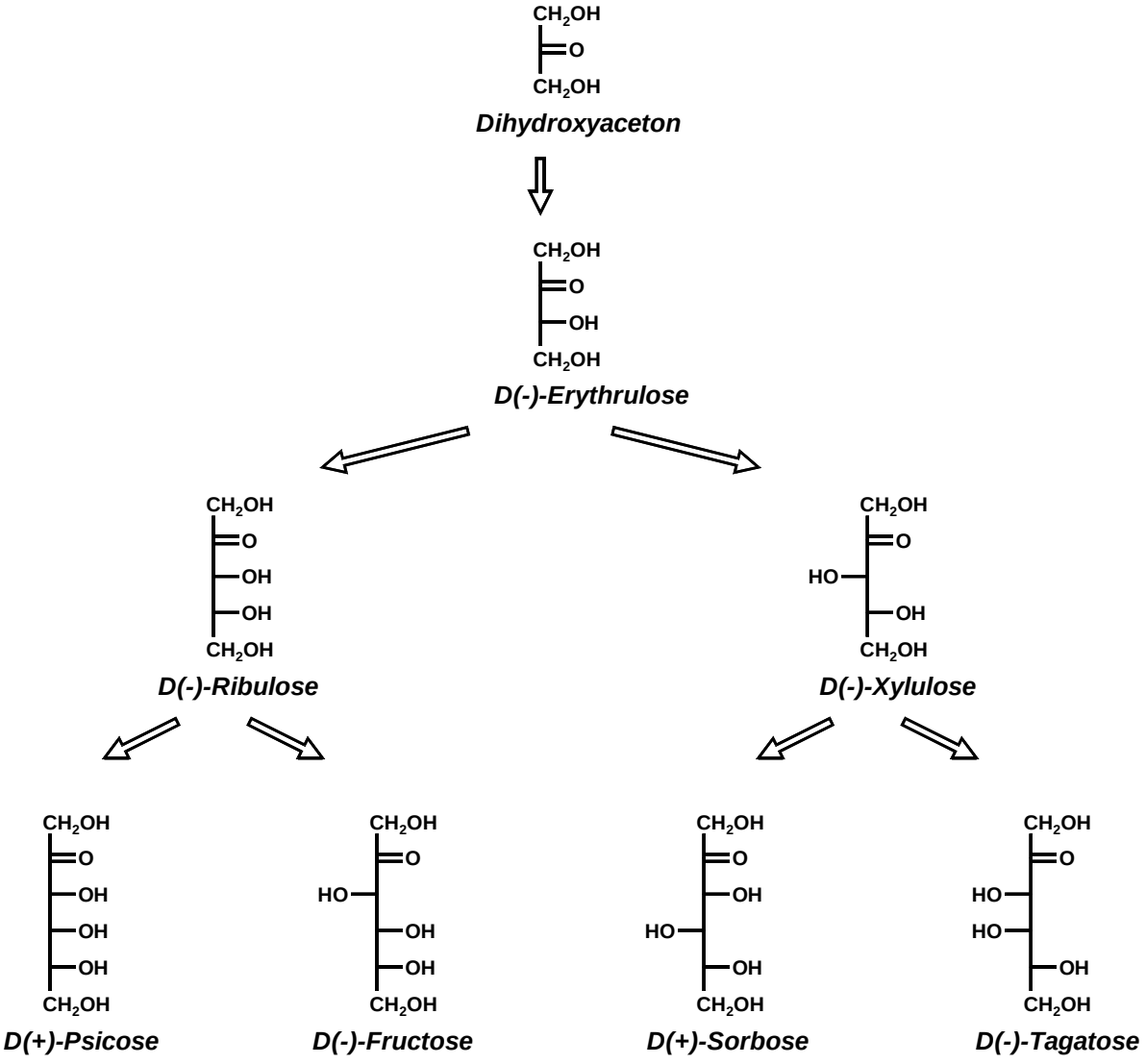
D-Glucose	***D-Galactose***	***L-Idose***	***D-Talose***	***L-Glucose***

D-Aldosen:



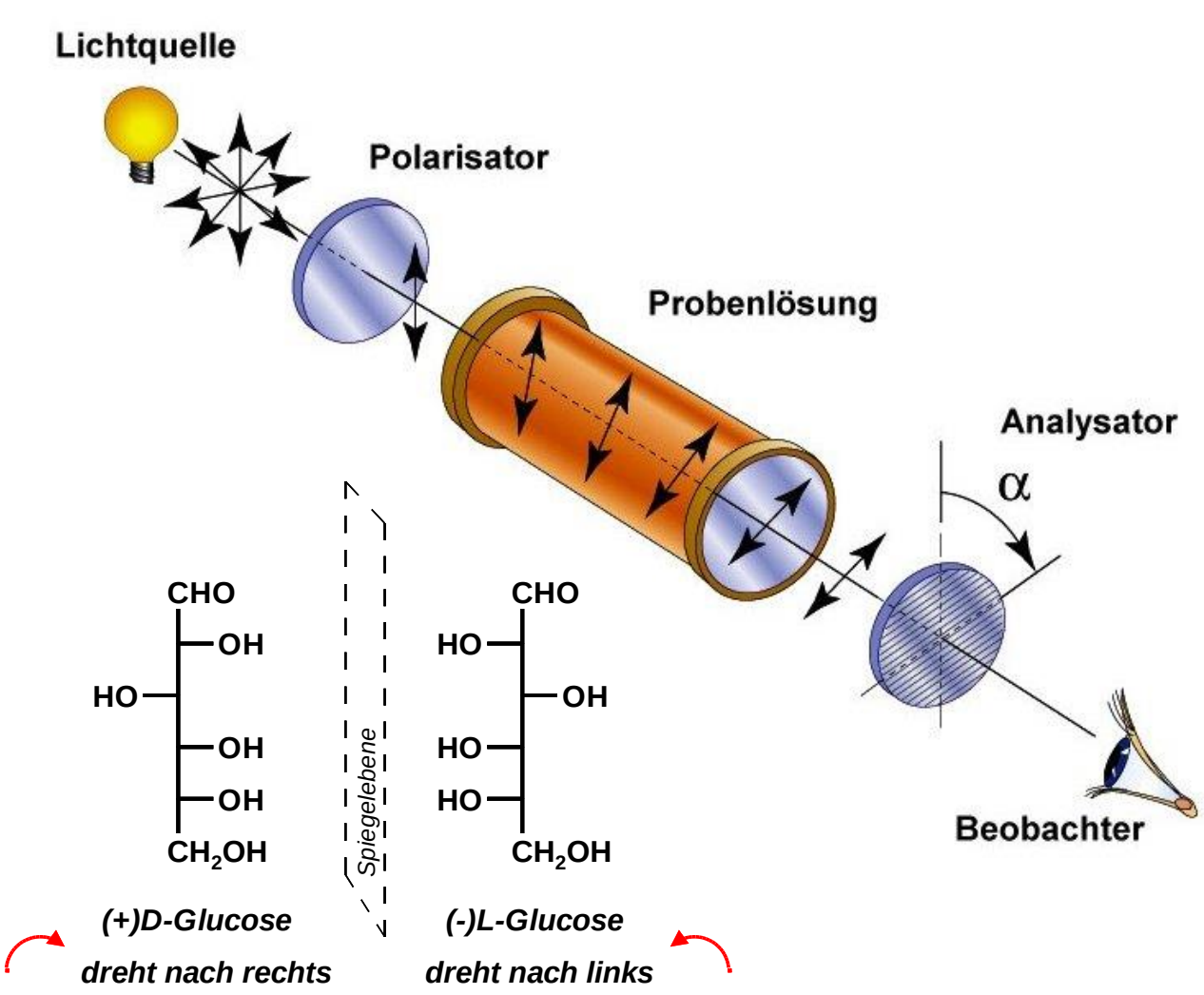
Die L-Aldosen ergeben sich als die Spiegelbilder der D-Aldosen

D-Ketosen:

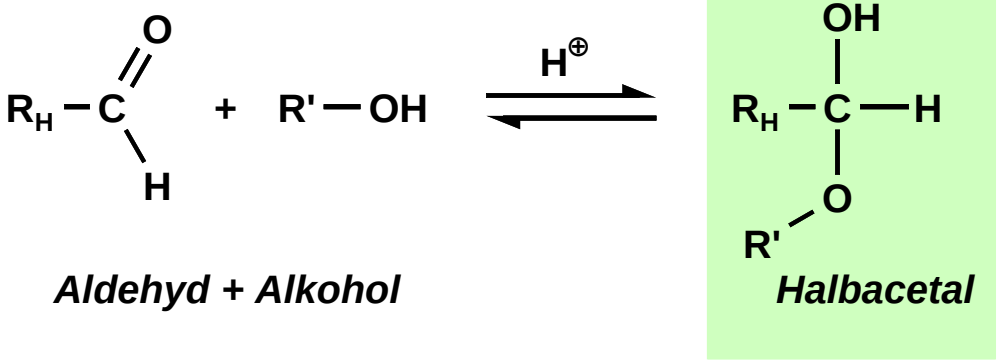


Die L-Ketosen ergeben sich als die Spiegelbilder der D-Ketosen

Polarimeter

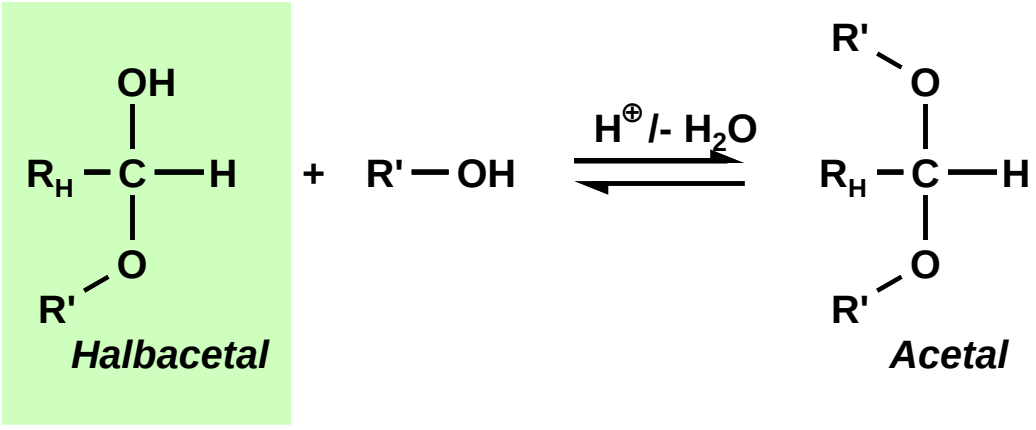


Halbacetal/Acetal-Bildung



Aldehyd + Alkohol

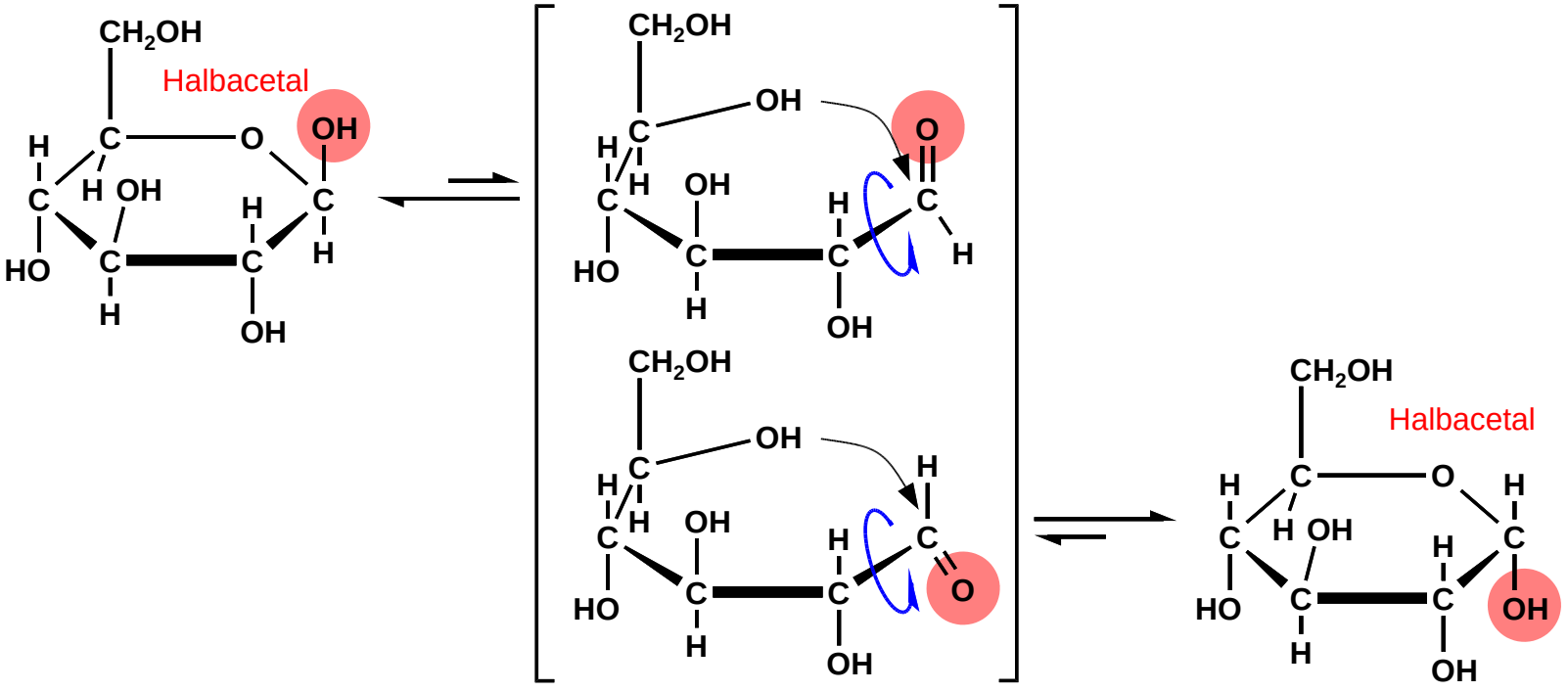
Halbacetal



Halbacetal

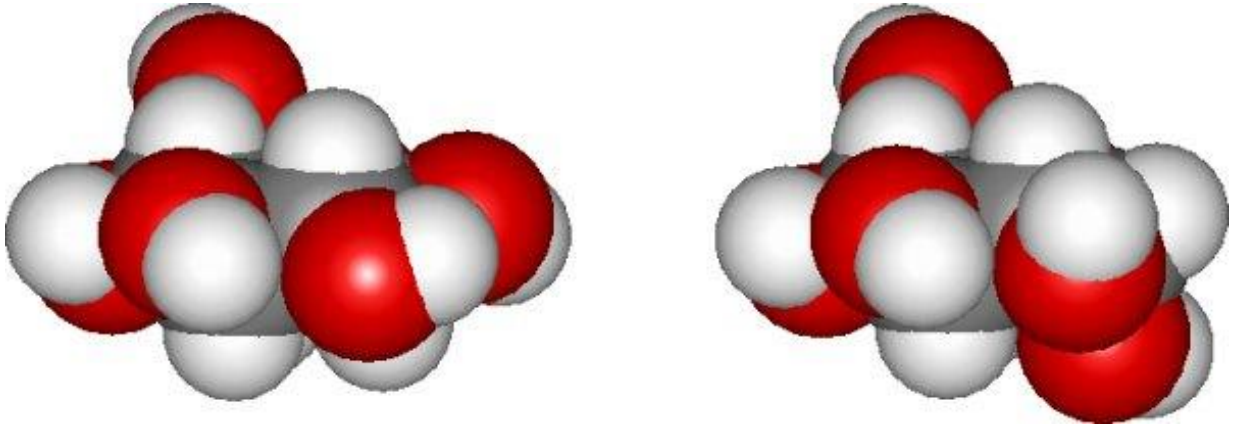
Acetal

Pyranosen: Anomerie

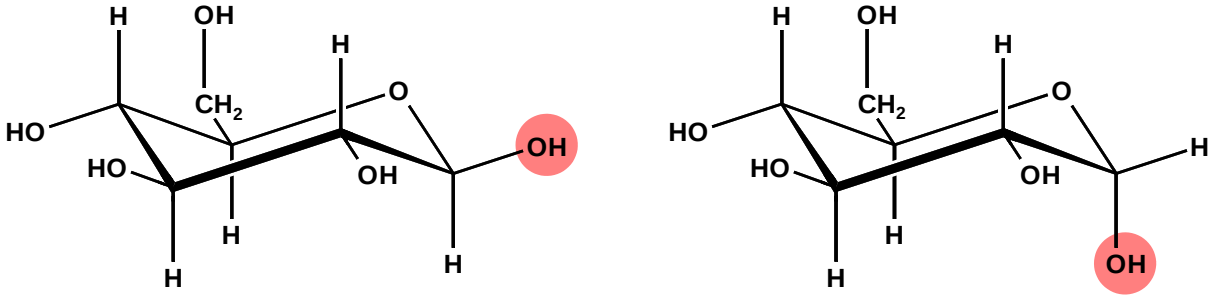


Glucose: 3D-Struktur und Anomerie

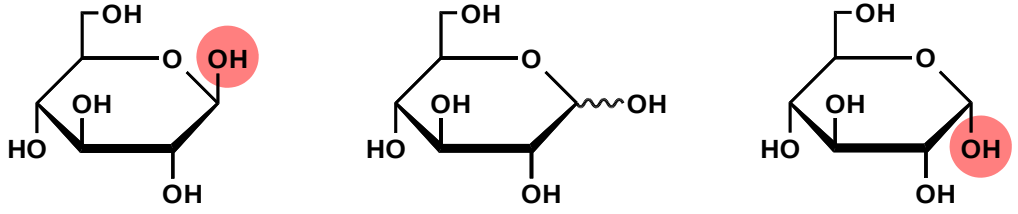
CPK-Modelle



Sesselform



Haworth-Projektion

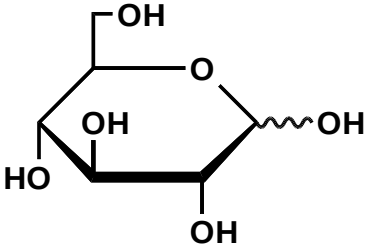


β-D-Glucopyranose

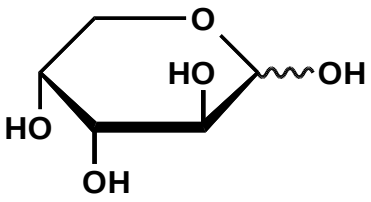
α/β-D-Glucopyranose (unbestimmt)

α-D-Glucopyranose

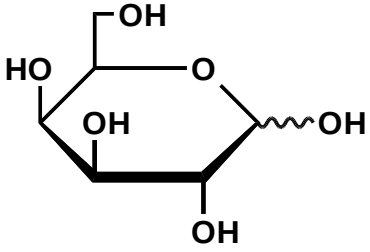
Monosaccharide



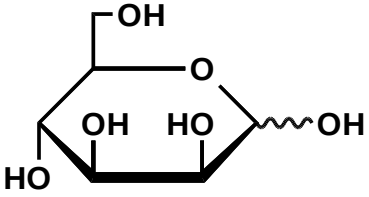
Glucose



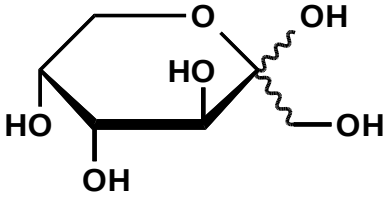
Arabinose



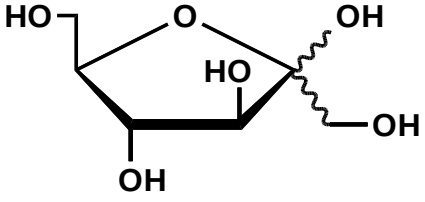
Galactose



Mannose

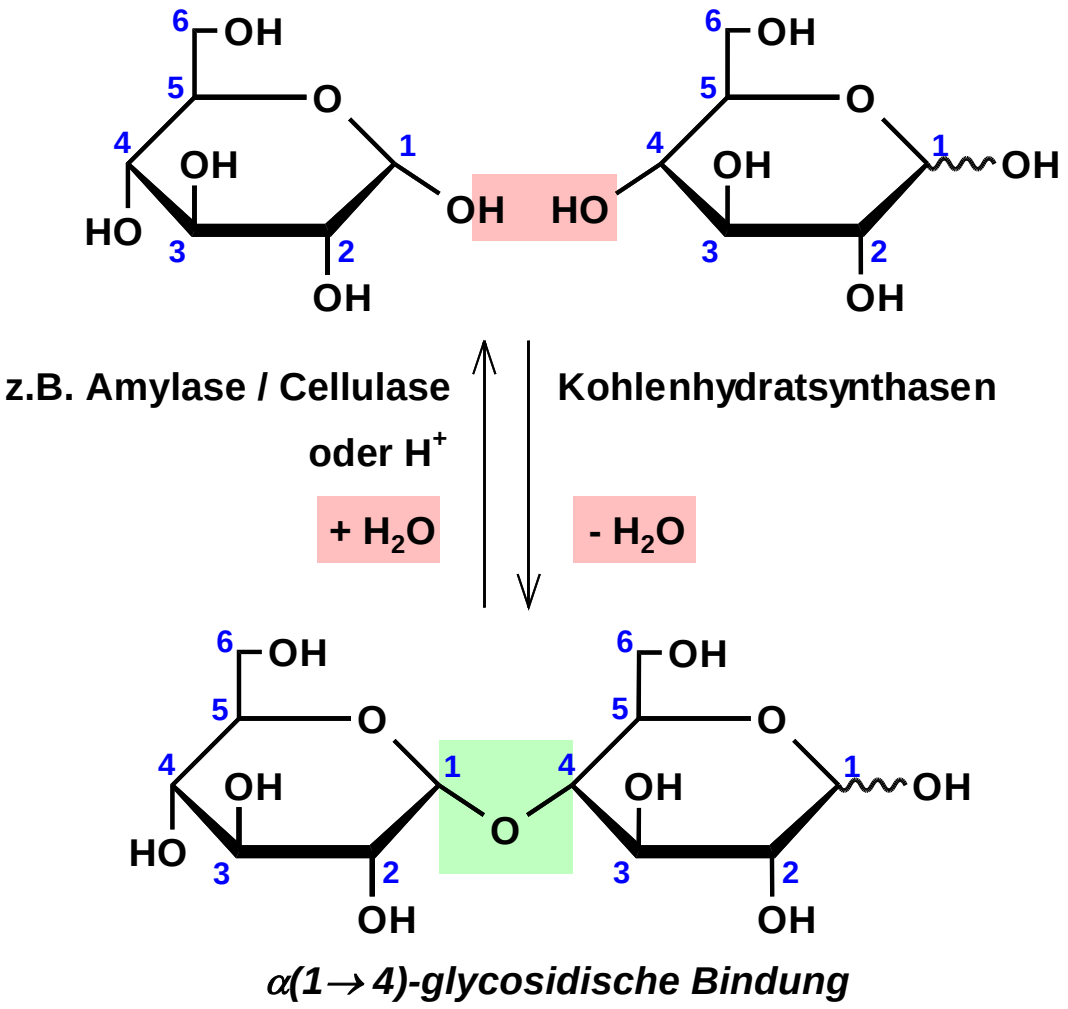


Fructose (Pyranose)



Fructose (Furanose)

Die glycosidische Bindung

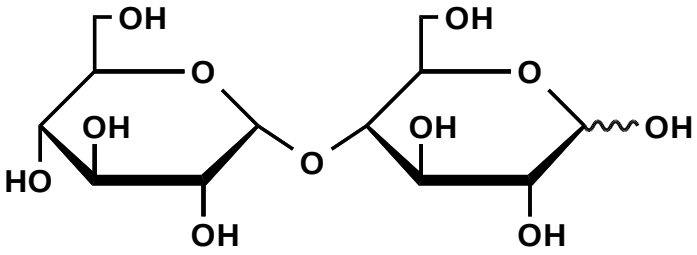


Monosaccharide werden biosynthetisch nach einer Phosphataktivierung über Kohlenhydratnucleotide durch eine glycosidische Bindung (Etherbrücke) zu Oligosacchariden verknüpft.

Nach Bildung des Glycosids ist die "linke" Pyranose in der aktuellen Form stabilisiert, d.h. es gibt keine Öffnung des Rings und damit an dieser Stelle keine Umwandlung von α- in β-Form und umgekehrt.

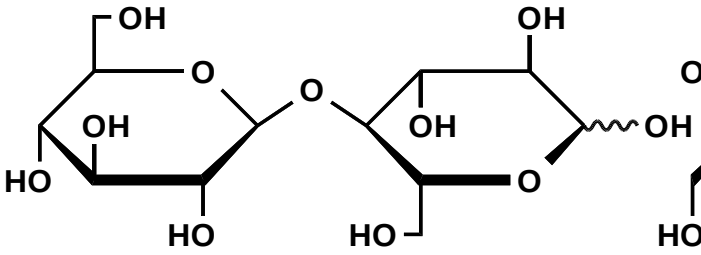
Die Spaltung der Glycoside kann auch durch Einwirkung von Säuren erfolgen.

Disaccharide



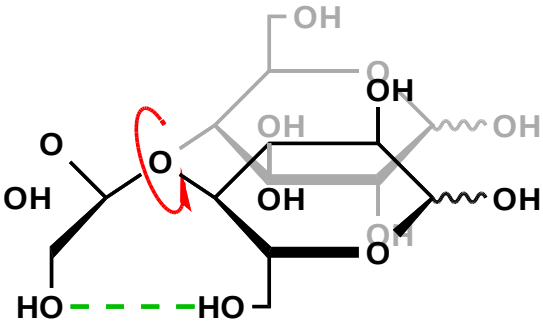
α-D-Glucose *α/β-D-Glucose*

Maltose

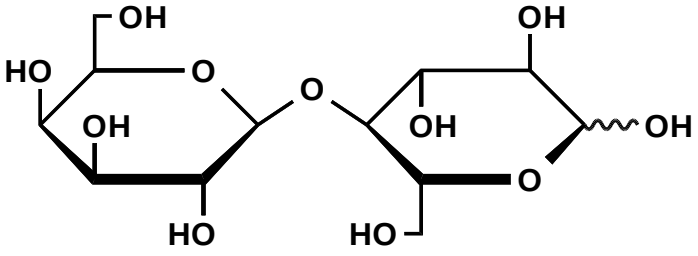


β-D-Glucose *α/β-D-Glucose*

Cellobiose

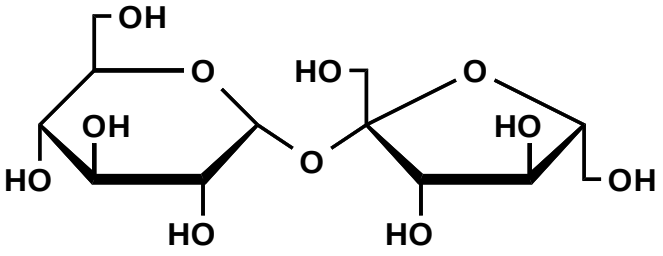


Rotation der 2. Glucose
Ausbildung von H-Brücken



β-D-Galactose *α/β-D-Glucose*

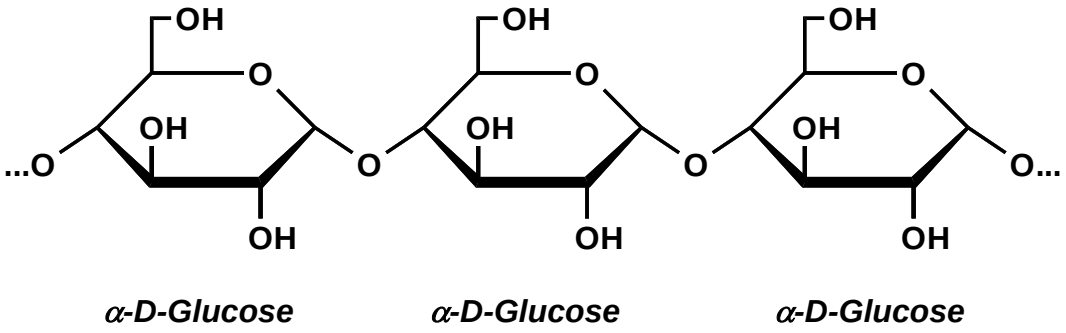
Lactose

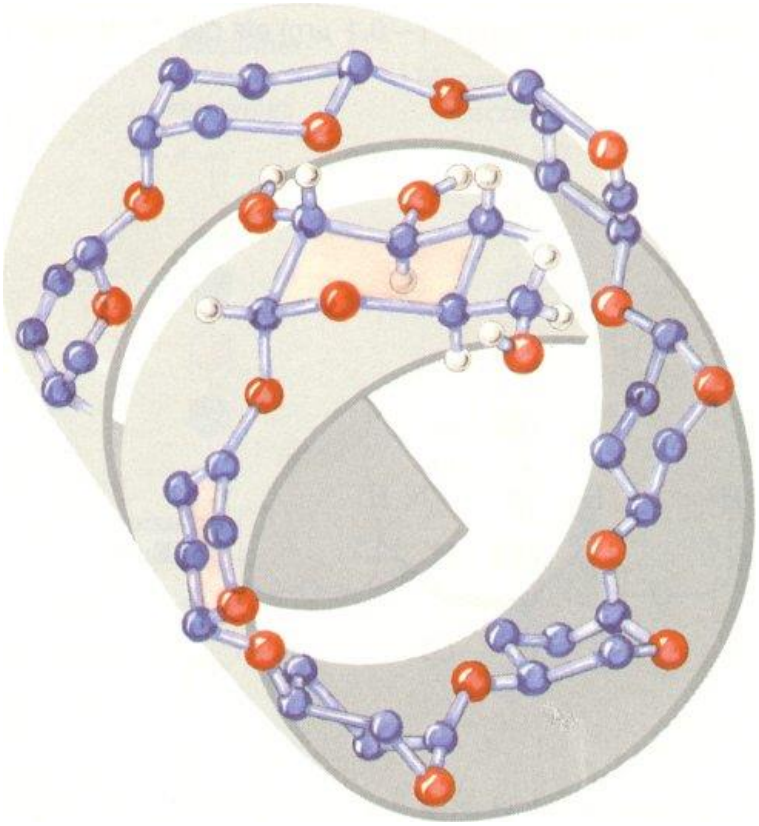


α-D-Glucose *β-D-Fructose*

Saccharose

Polysaccharide: Stärke (Amylose)

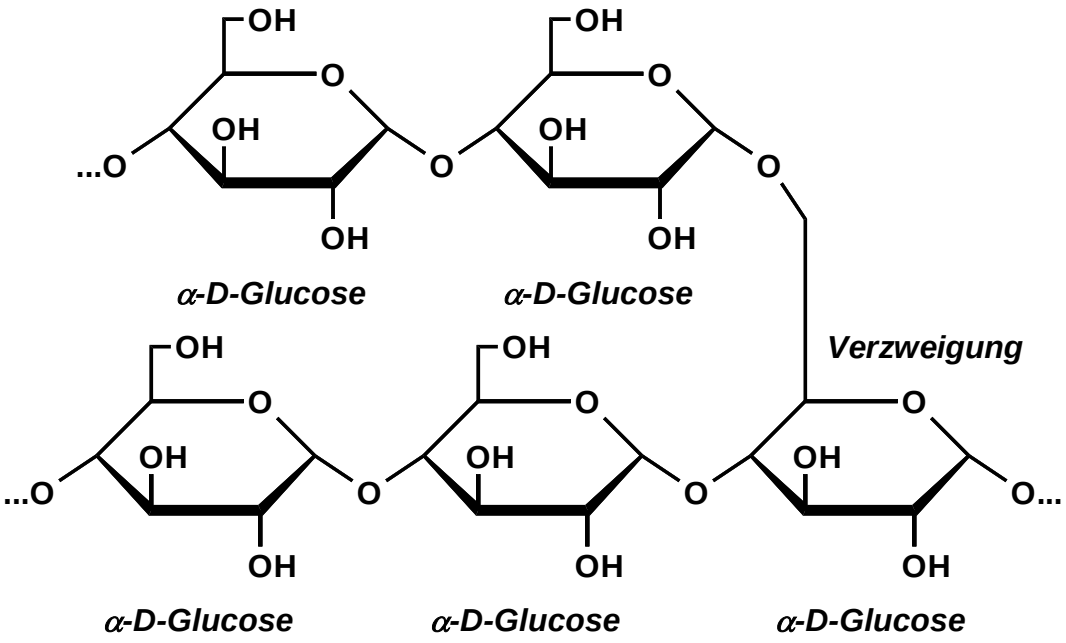


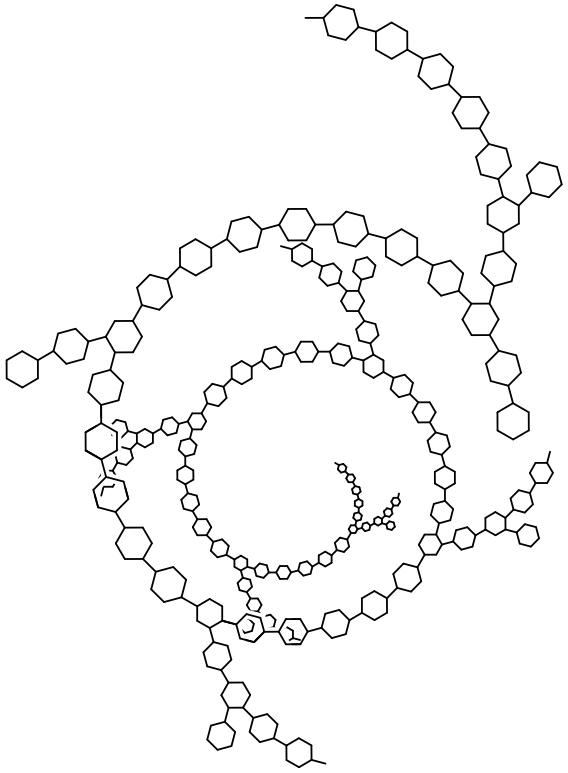


Lineares α (1 → 4) Glucose-Polymer

Länge: ca. 200 Monomere

Polysaccharide: Stärke (Amylopectin)

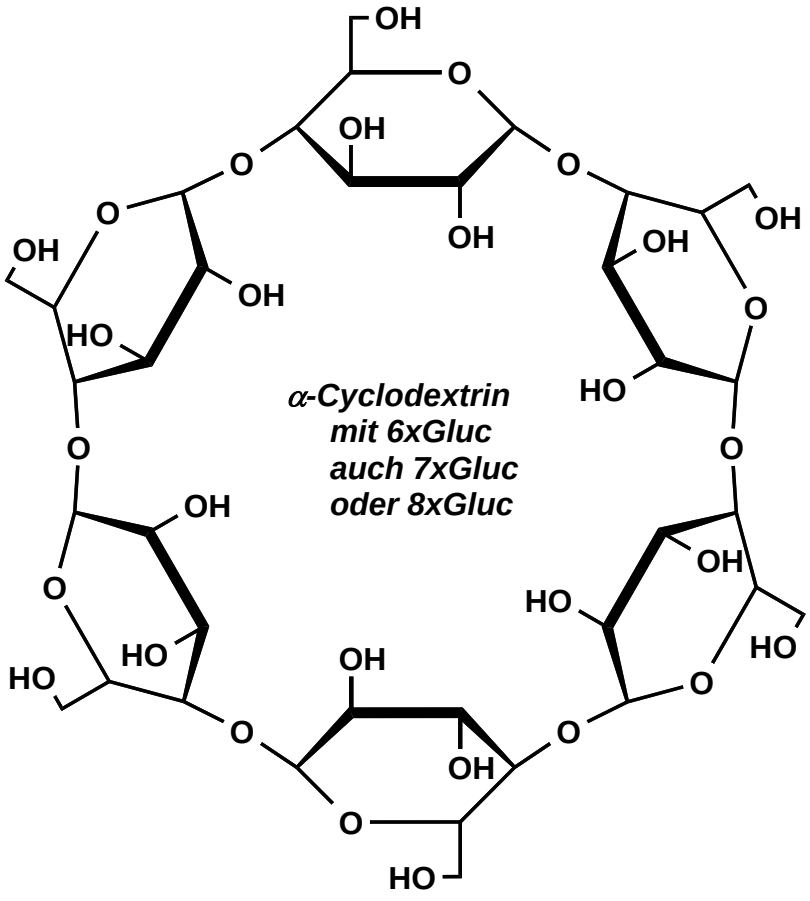




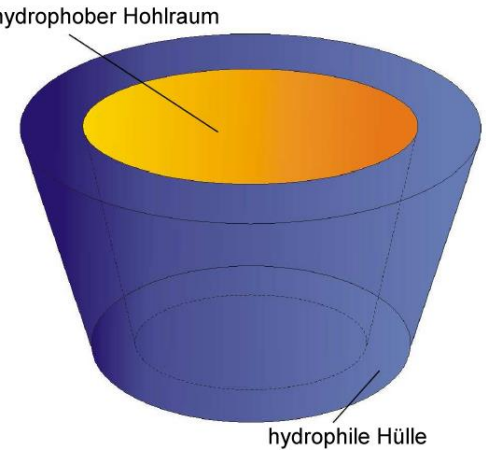
Verzweigtes α (1 → 4) und α (1 → 6) Glucose-Polymer

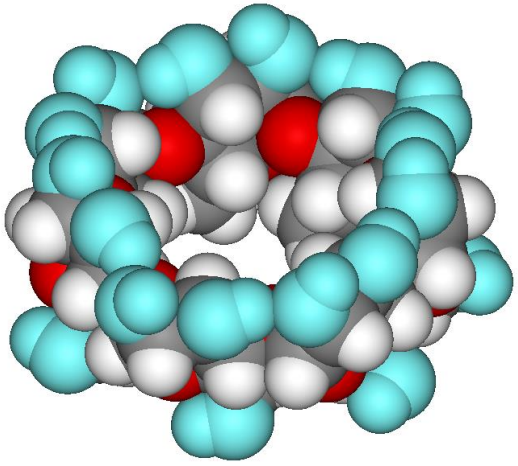
Länge: ca. 10000 Monomere
Bei **Amylopectin** (Pflanzen) α (1 → 6) jede 25. Glucose,
bei **Glycogen** (Tiere) stärker verzweigt weil Jagd und Flucht benötigt schnell Energie.

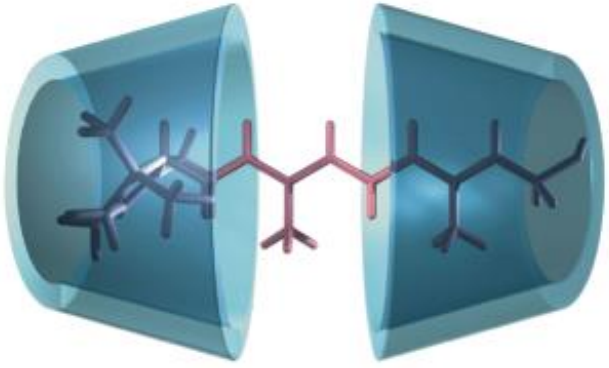
Cyclodextrine



α-Cyclodextrin
mit 6xGluc
auch 7xGluc
oder 8xGluc

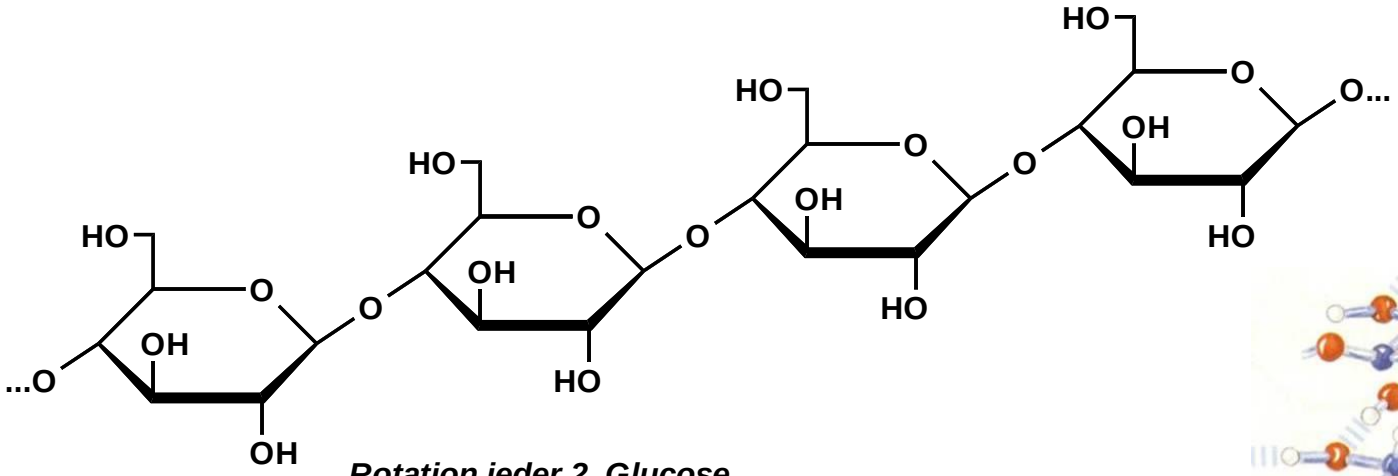




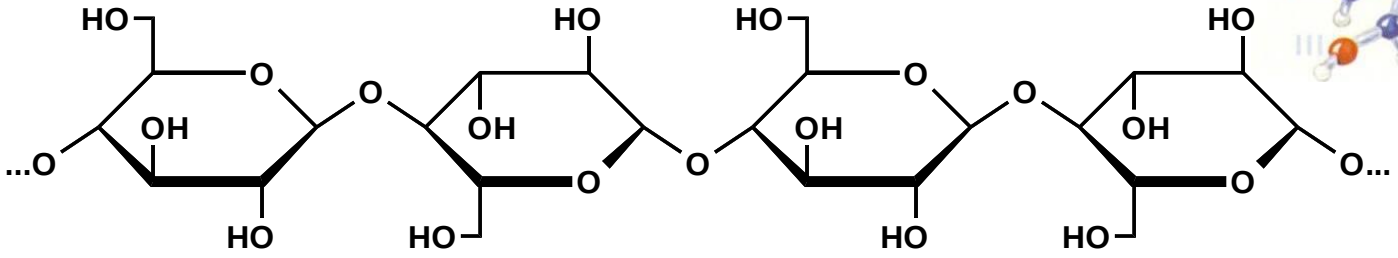


Einkapselung von unpolaren Molekülen
(Medikamente, Aromen, Parfums etc.)

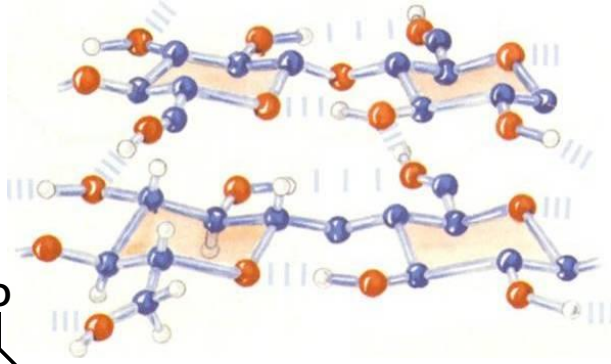
Polysaccharide: Cellulose



Rotation jeder 2. Glucose



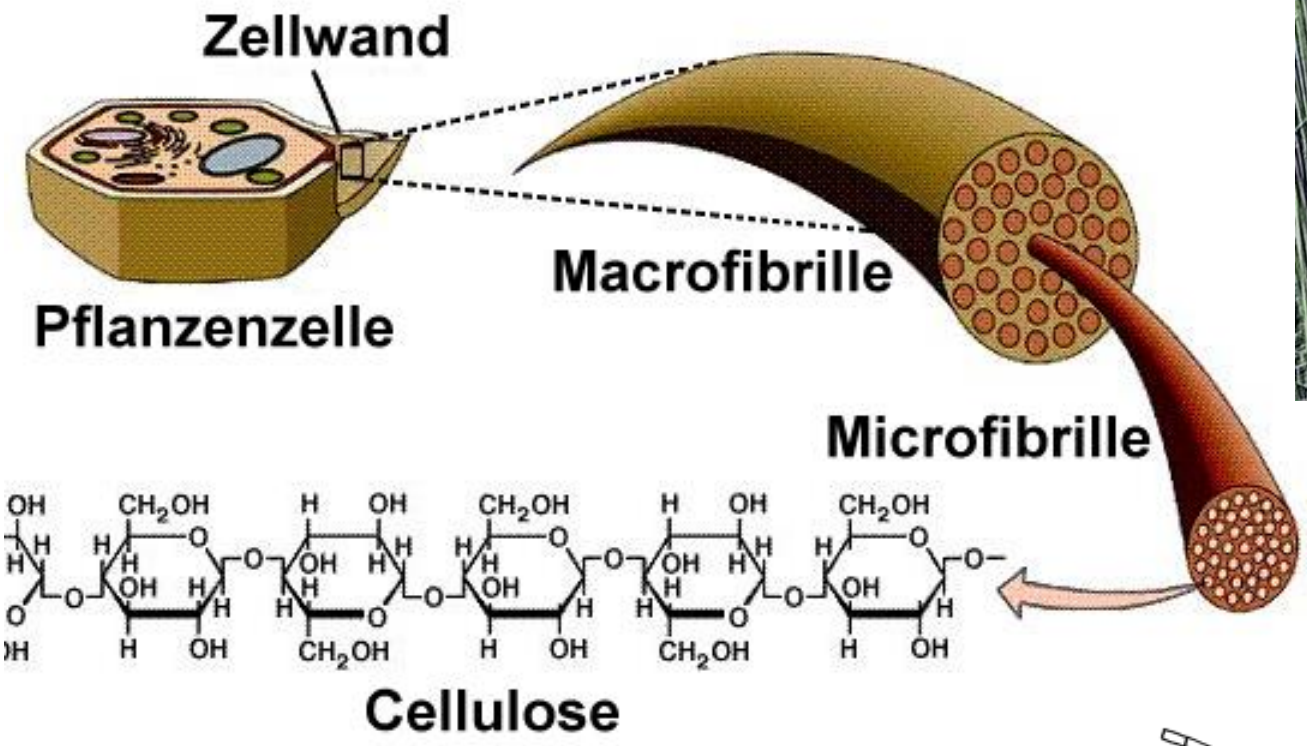
β-D-Glucose *β-D-Glucose* *β-D-Glucose* *β-D-Glucose*

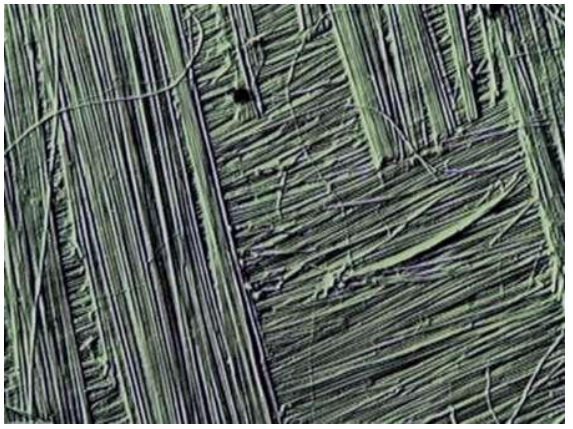


Lineares β (1 → 4) Glucose-Polymer

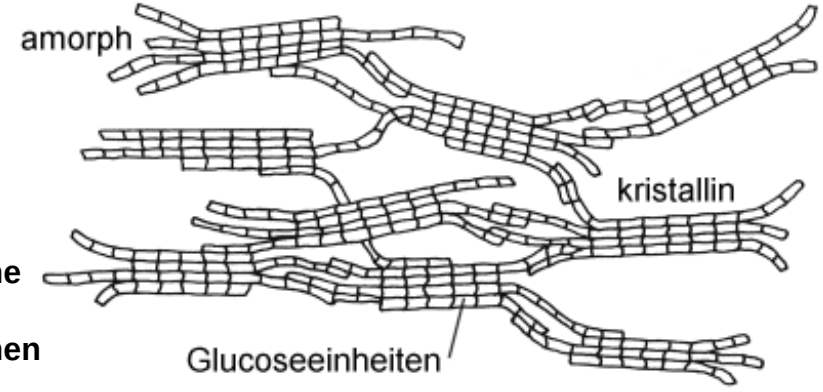
Länge: ca. 1000-15000 Monomere

Struktur der Pflanzenzellwände





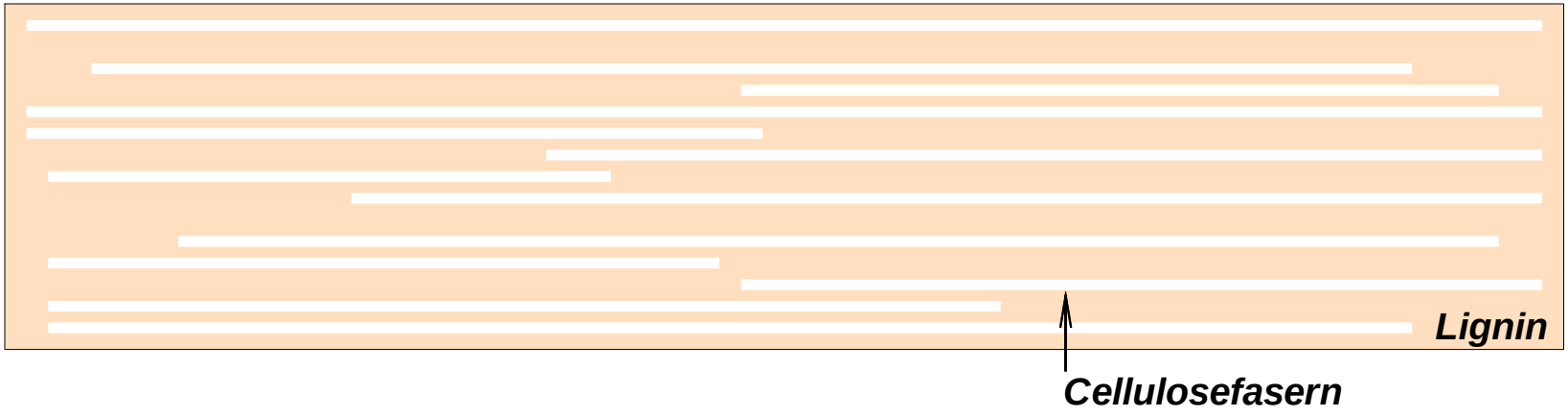
Cellulose



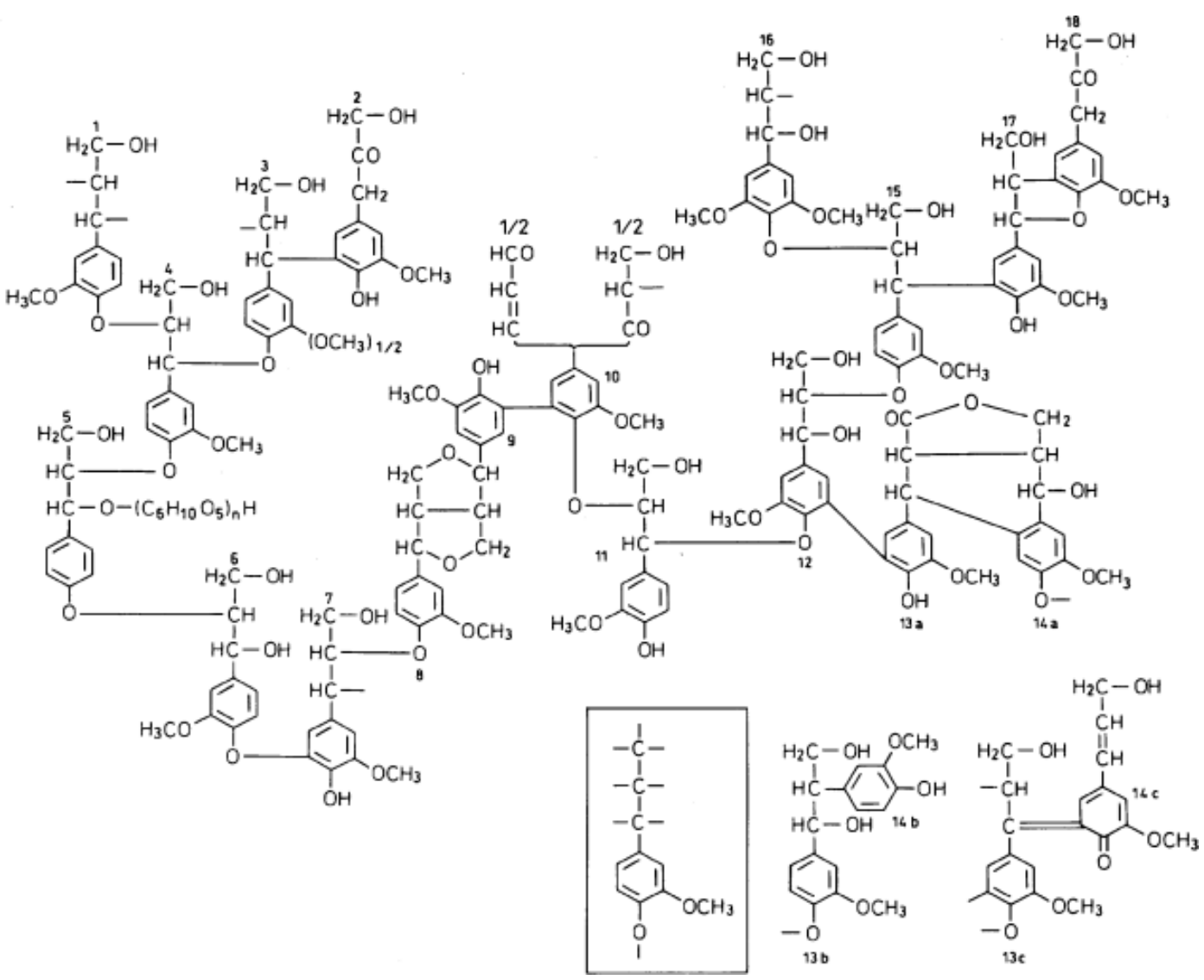
Kristalline Bereiche Wechseln mit amorphen Bereichen

Der Verbundwerkstoff Holz

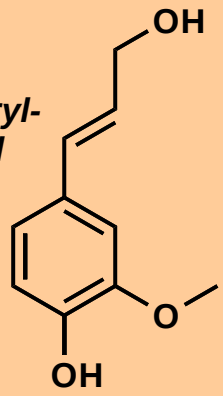
Chemie Lexikon RÖMPP online (Thieme): „Vorkommen: Holz kommt hauptsächlich in Wäldern vor …“



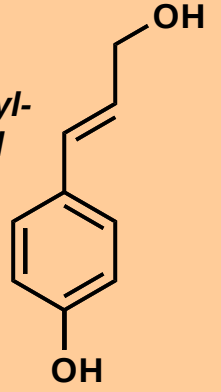
Lignin



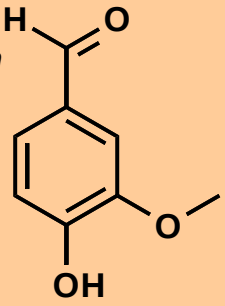
Coniferyl-alkohol

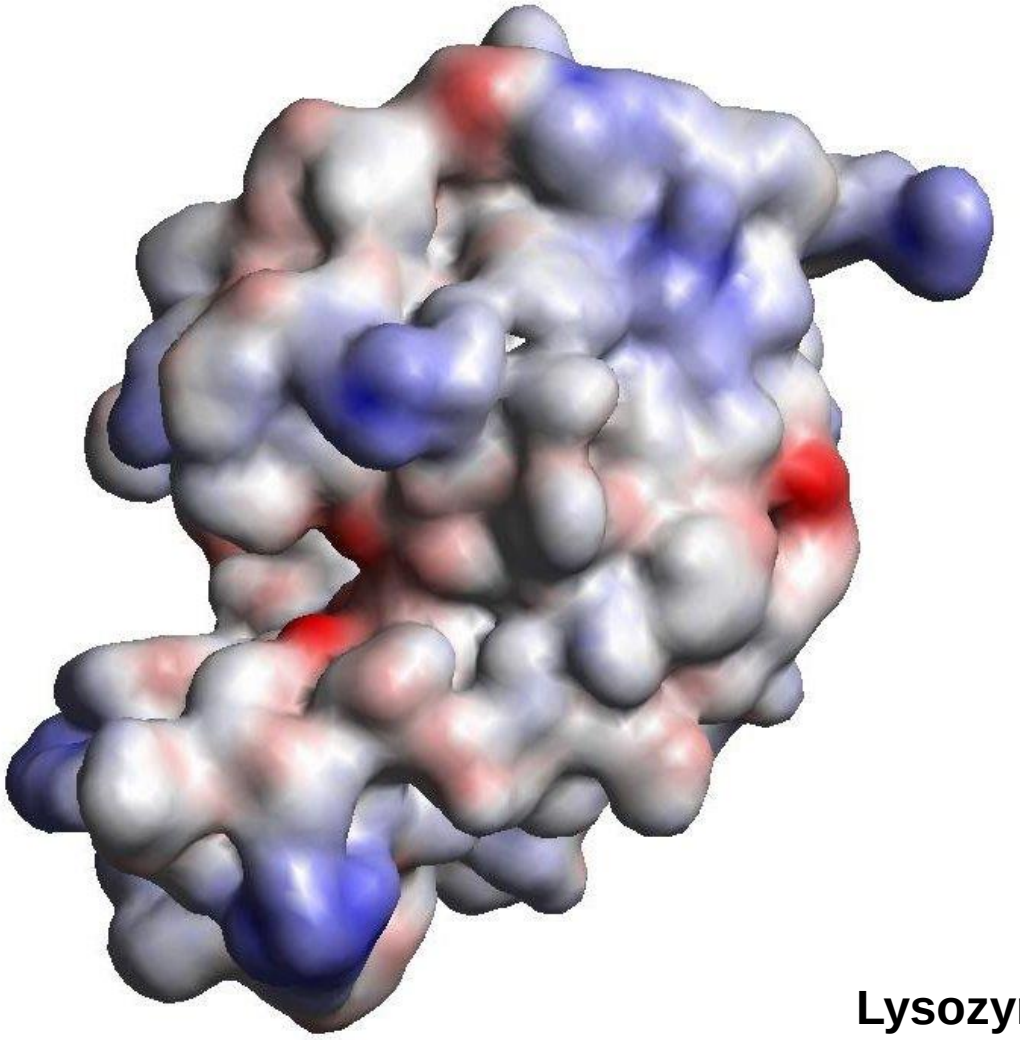


Cumaryl-alkohol



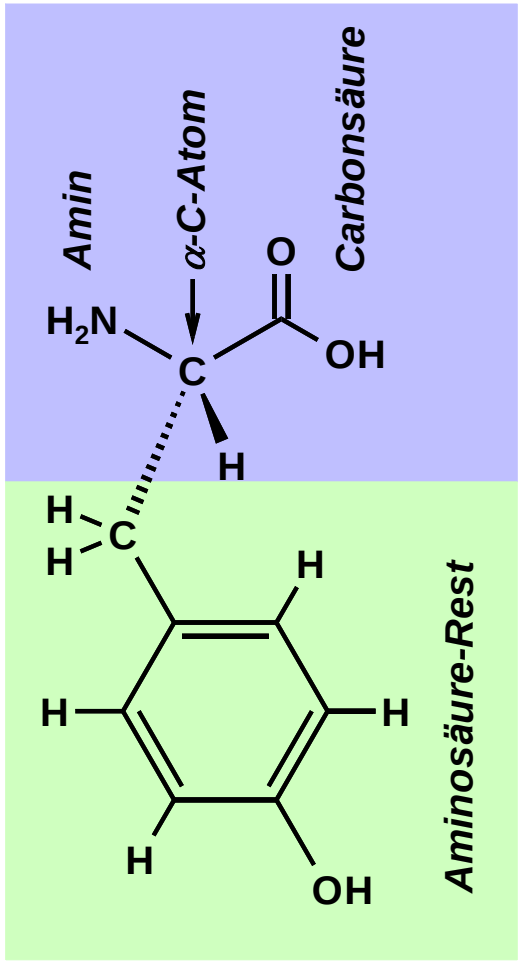
Vanillin



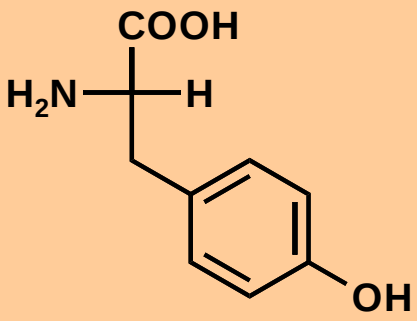


Lysozym

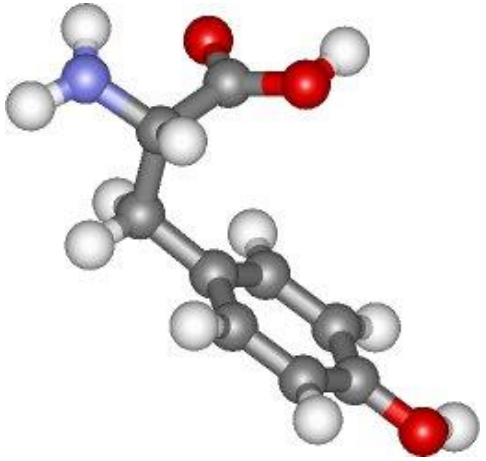
Tyrosin, eine Aminosäure

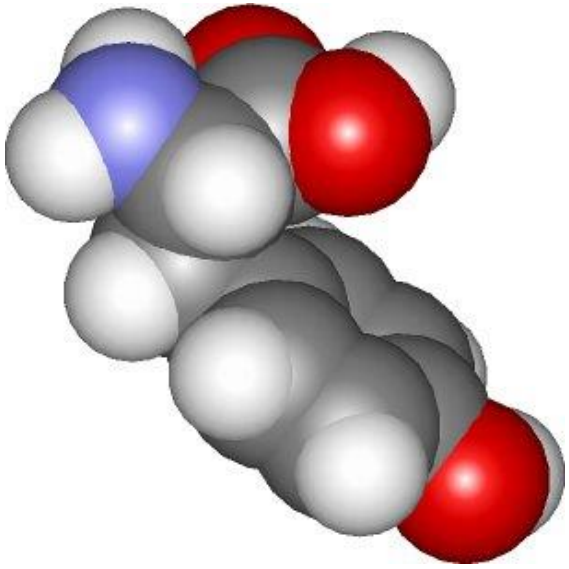


Fischerprojektion:

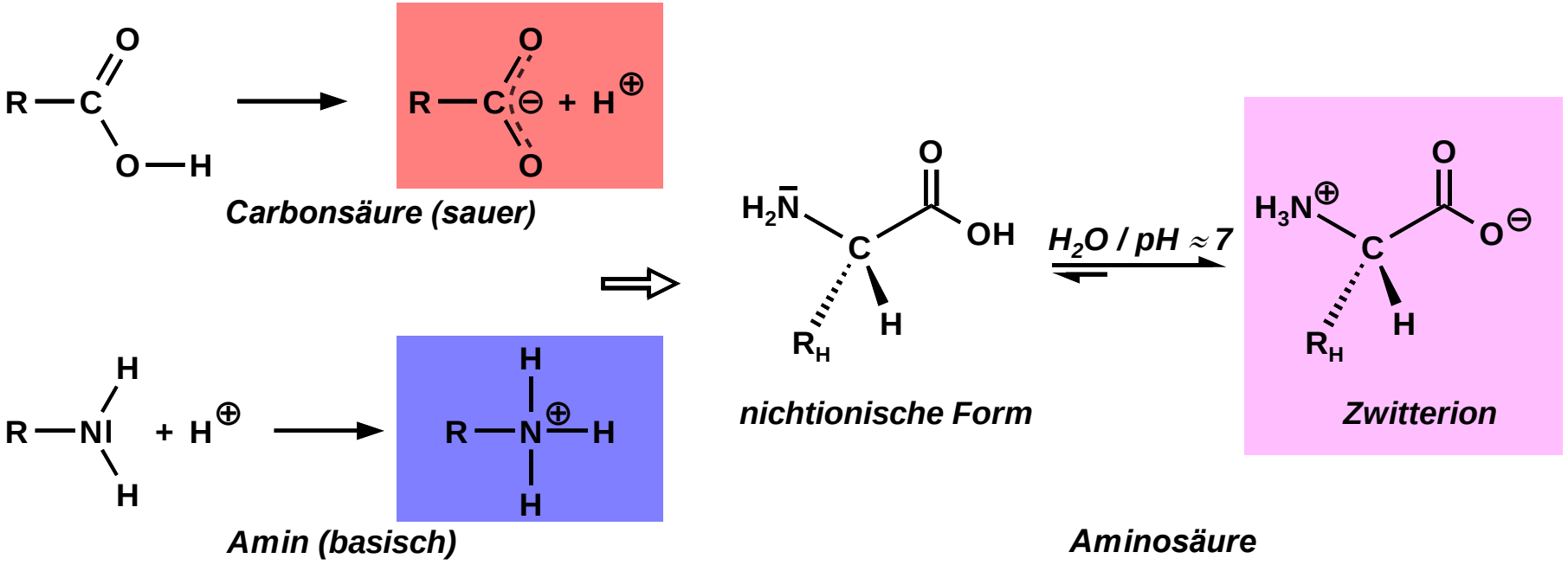


L-Konfiguration



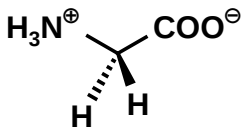
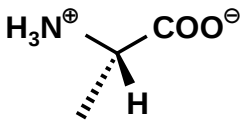
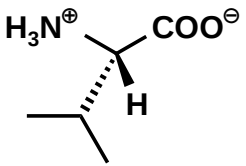
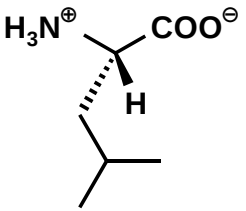
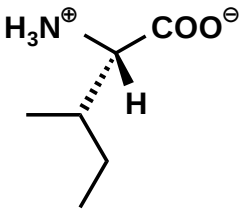
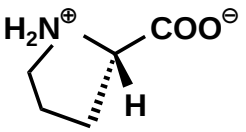


Zwitterionen

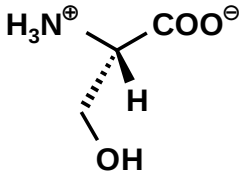
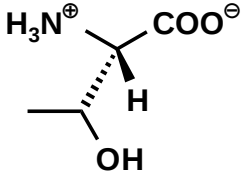
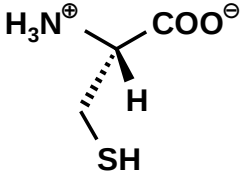
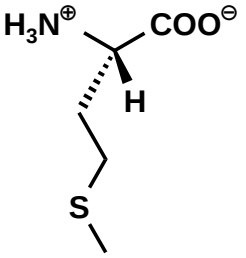
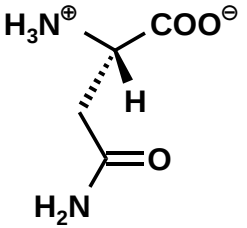
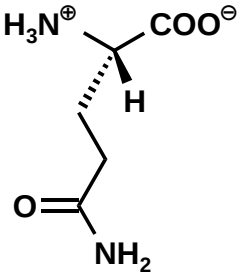


Aminosäuren (Tabelle 1)

Unpolar, aliphatisch:

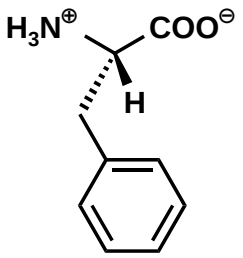
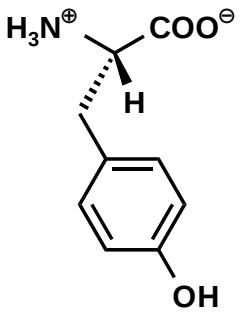
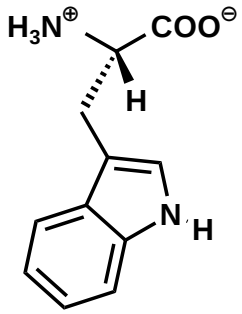
Glycin	Alanin	Valin	Leucin	Isoleucin	Prolin
					
Gly G	Ala A	Val V	Leu L	Ile I	Pro P

Polar, ungeladen:

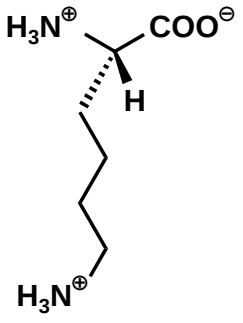
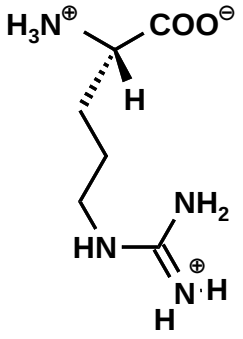
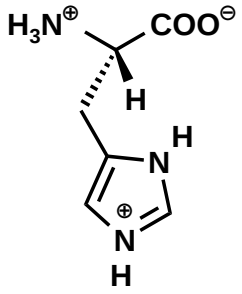
Serin	Threonin	Cystein	Methionin	Asparagin	Glutamin
					
Ser S	Thr T	Cys C	Met M	Asn N	Gln Q

Aminosäuren (Tabelle 2)

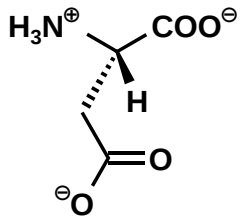
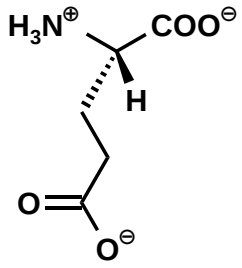
Aromatisch:

Phenylalanin	Tyrosin	Tryptophan
		
Phe F	Tyr Y	Trp W

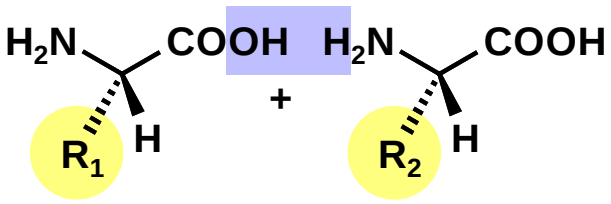
Positiv geladen:

Lysin	Arginin	Histidin
		
Lys K	Arg R	His H

Negativ geladen:

Aspartat	Glutamat
	
Asp D	Glu E

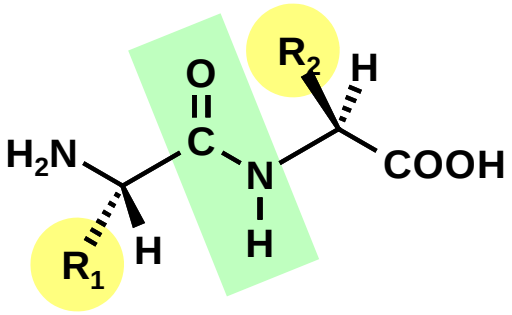
Die Peptidbindung



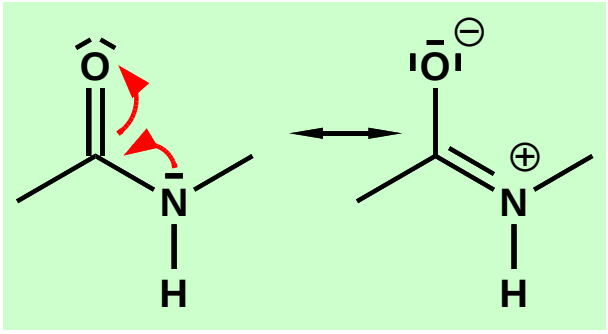
Aminosäuren

Aktiv. / -H_2O
oder Enzym

H^+/H_2O/ΔT
oder Enzym



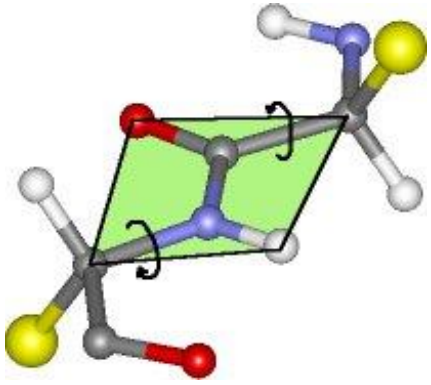
Peptid



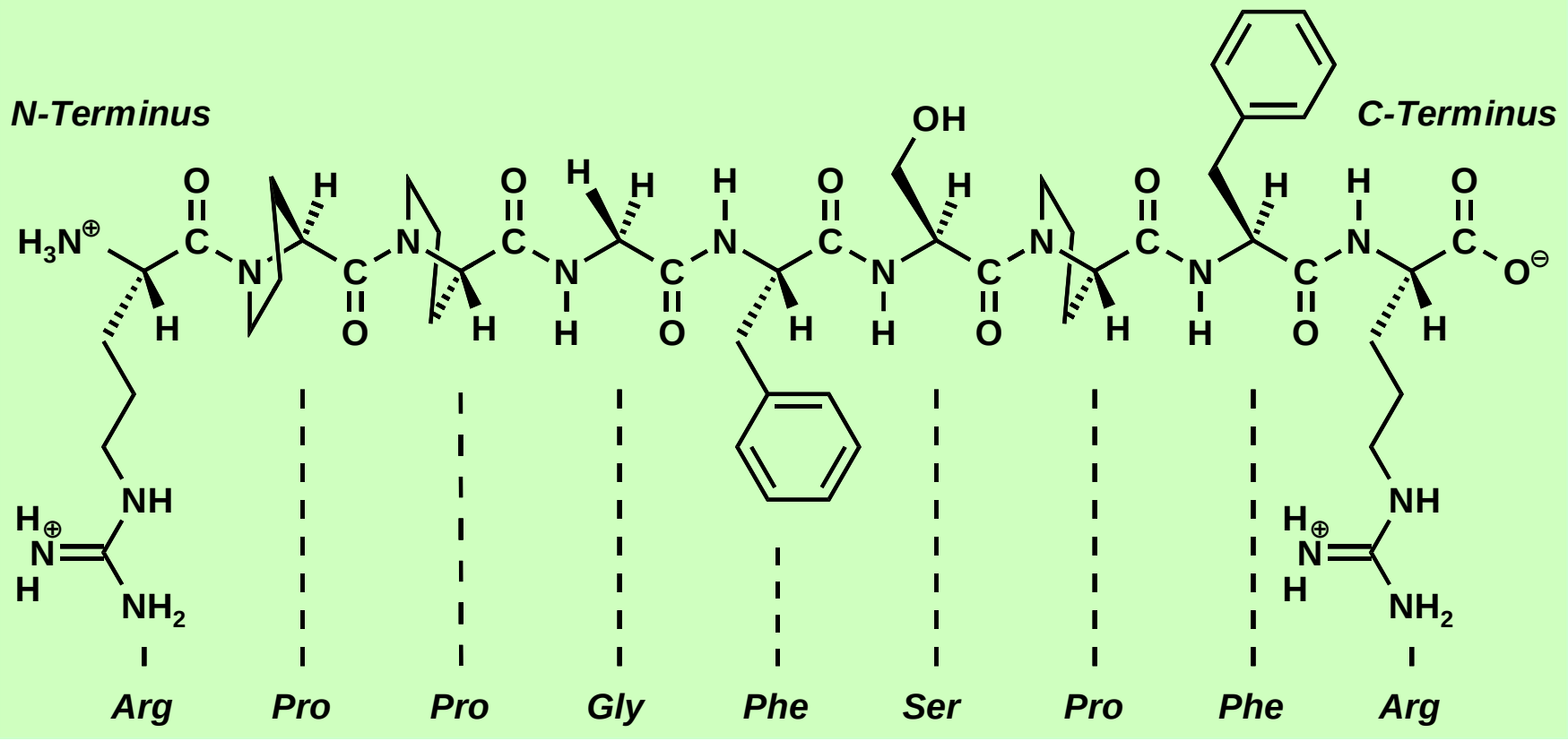
C-N-Bindungsordnung ≈ 1,5

Die Peptidbindung hat einen Doppelbindungscharakter und ist starr.

Eine Rotation ist nur um die Bindungen zu den α-C-Atomen möglich.



Bradykinin, Aminosäuresequenz



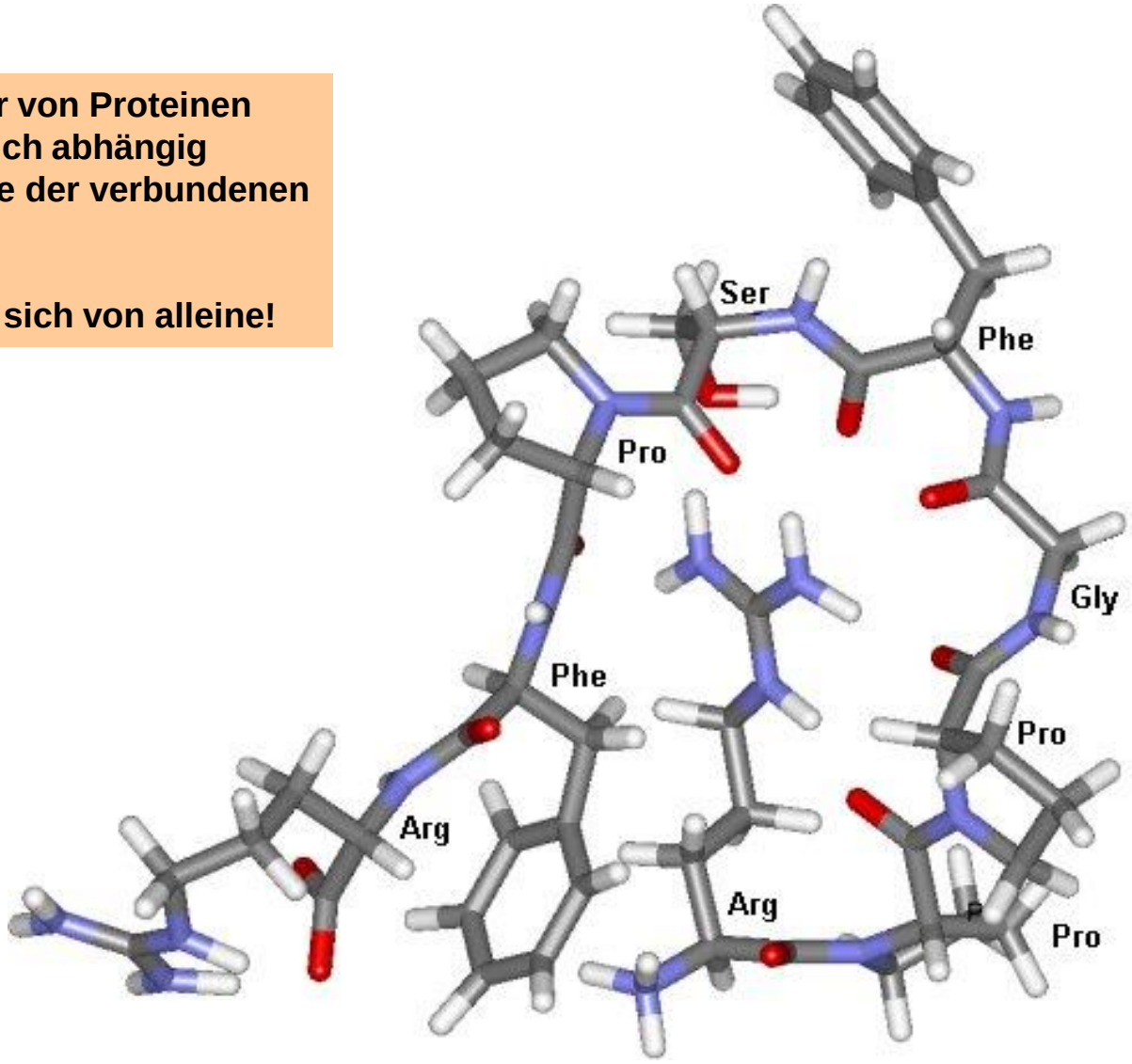
Aminosäuresequenz: **Arg-Pro-Pro-Gly-Phe-Ser-Pro-Phe-Arg**

RPPGFSPFR

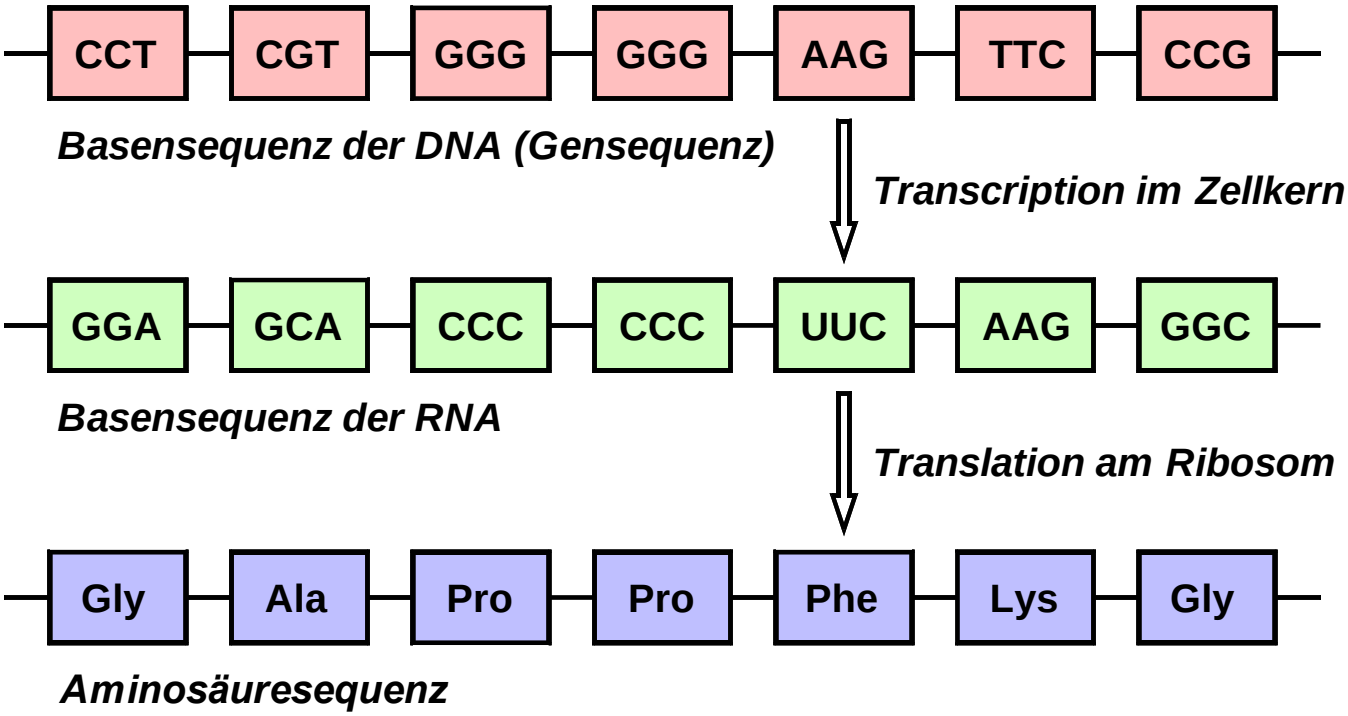
Bradykinin, 3D-Struktur

Die 3D-Struktur von Proteinen ist ausschließlich abhängig von der Abfolge der verbundenen Aminosäuren.

Proteine falten sich von alleine!



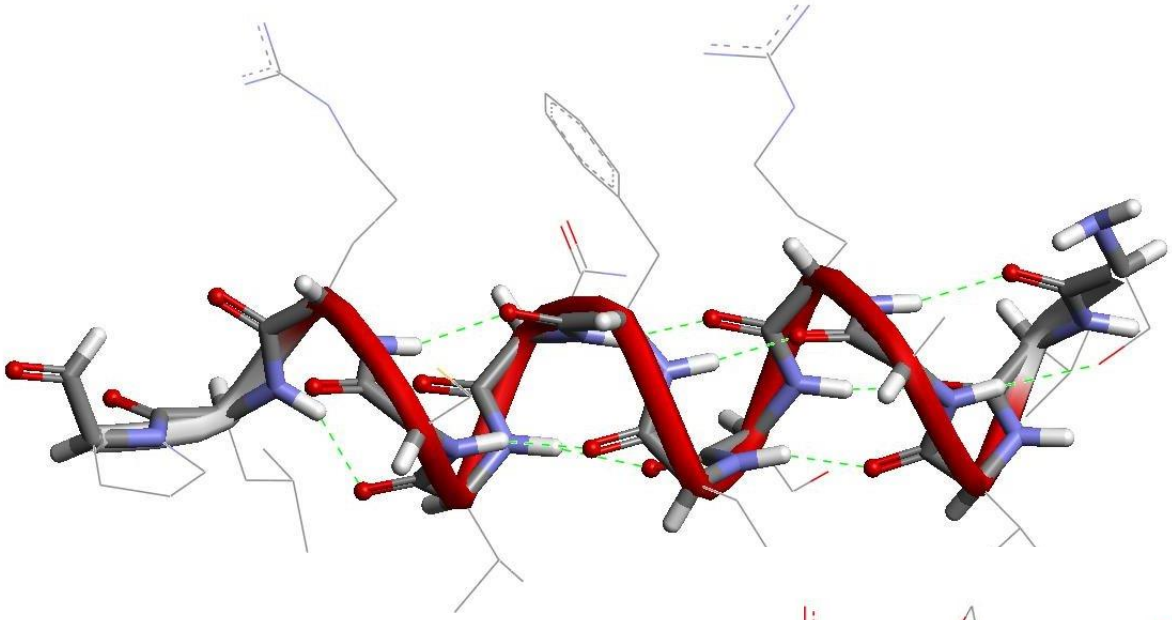
Proteinstruktur-Hierarchie: Primärstruktur



Lysozym:
Sequenz mit
129 Aminosäuren

```
LYS VAL TYR GLY ARG CYS GLU LEU ALA ALA ALA MET LYS ARG LEU GLY LEU ASP ASN TYR
ARG GLY TYR SER LEU GLY ASN TRP VAL CYS ALA ALA LYS PHE GLU SER ASN PHE ASN THR
HIS ALA THR ASN ARG ASN THR ASP GLY SER THR ASP TYR GLY ILE LEU GLN ILE ASN SER
ARG TRP TRP CYS ASN ASP GLY ARG THR PRO GLY SER LYS ASN LEU CYS ASN ILE PRO CYS
SER ALA LEU LEU SER SER ASP ILE THR ALA SER VAL ASN CYS ALA LYS LYS ILE ALA SER
GLY GLY ASN GLY MET ASN ALA TRP VAL ALA TRP ARG ASN ARG CYS LYS GLY THR ASP VAL
HIS ALA TRP ILE ARG GLY CYS ARG LEU
```

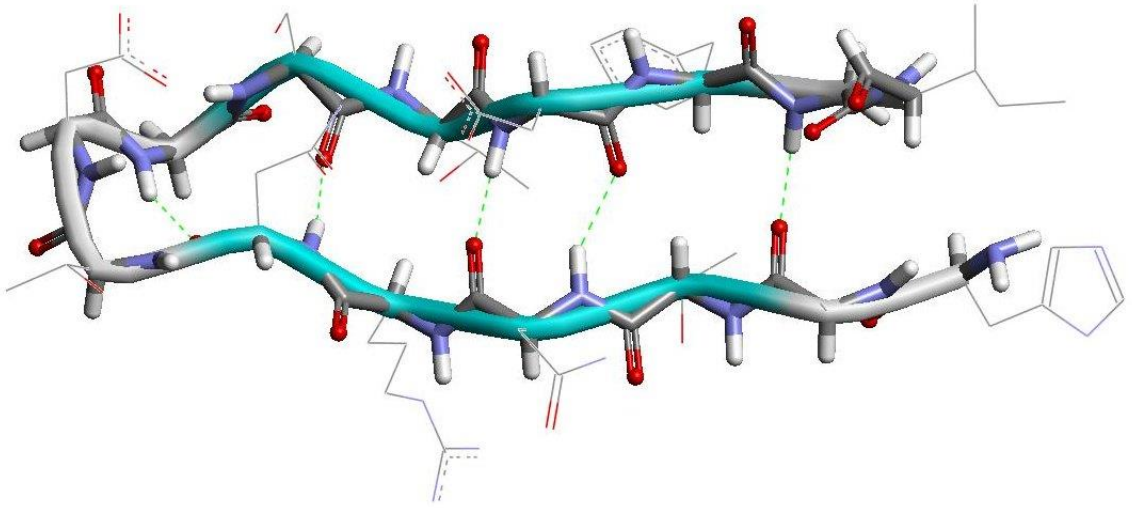
Proteinstruktur-Hierarchie: Sekundärstruktur



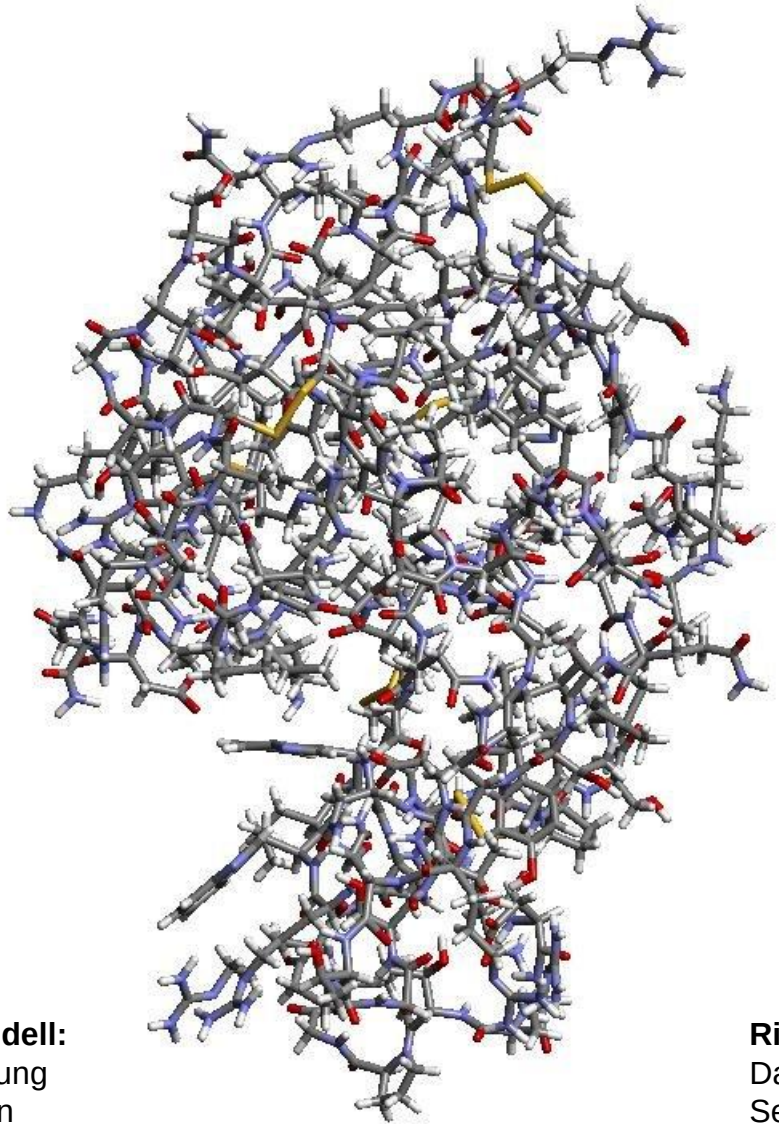
⇦ α-Helix

β-Faltblatt
(hier: hairpin)

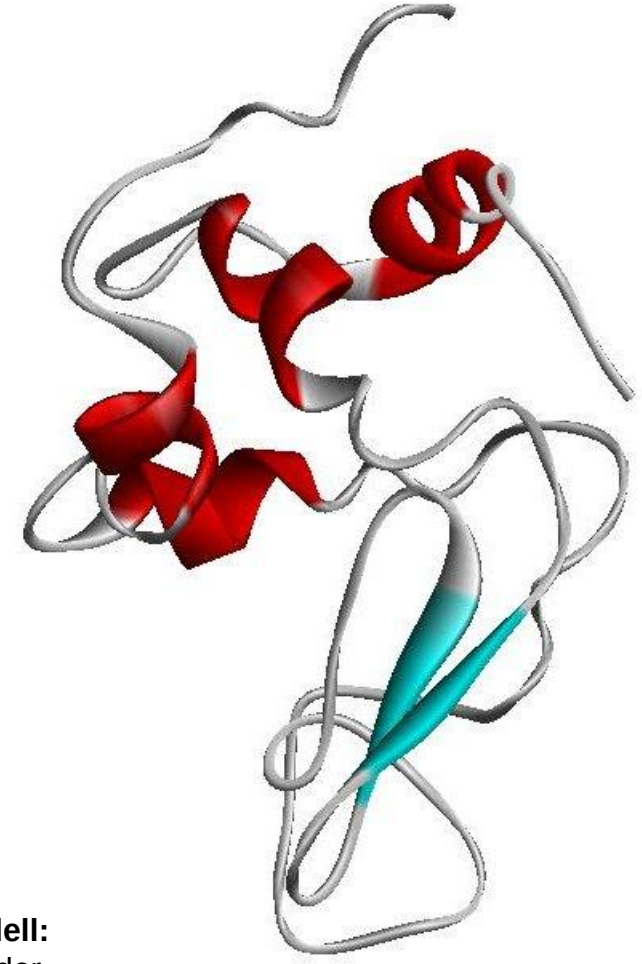
⇨



Proteinstruktur-Hierarchie: Tertiärstruktur

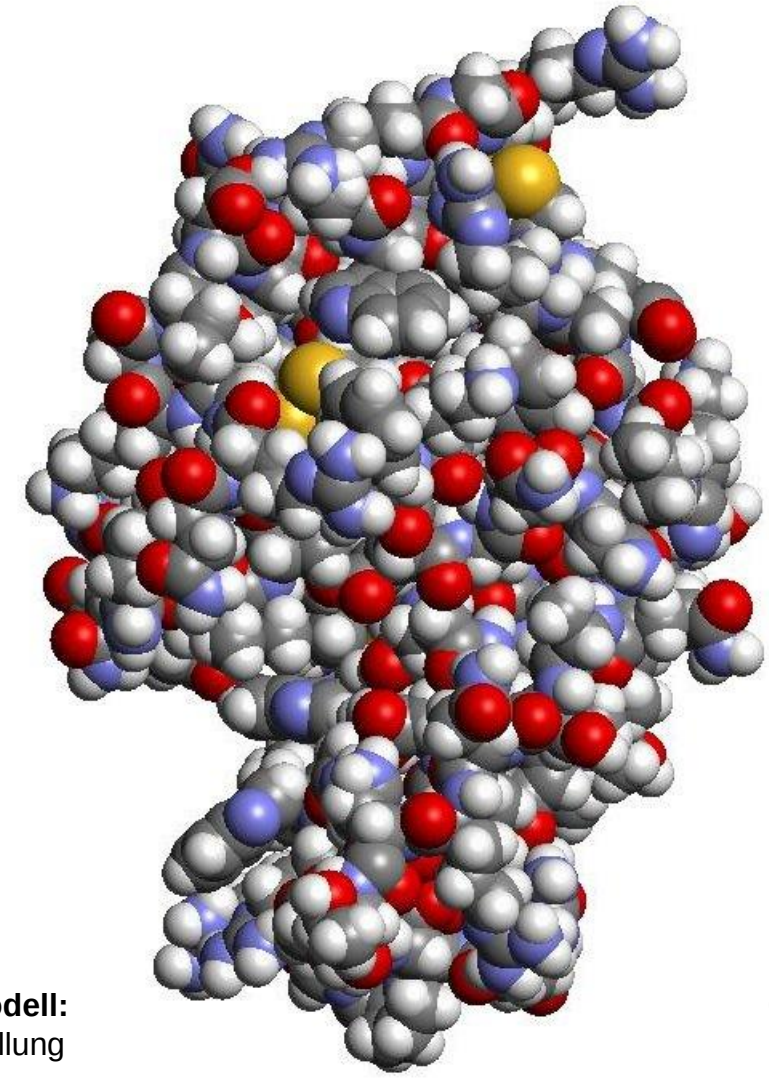


Bindungsmodell:
Stick-Darstellung
der Bindungen

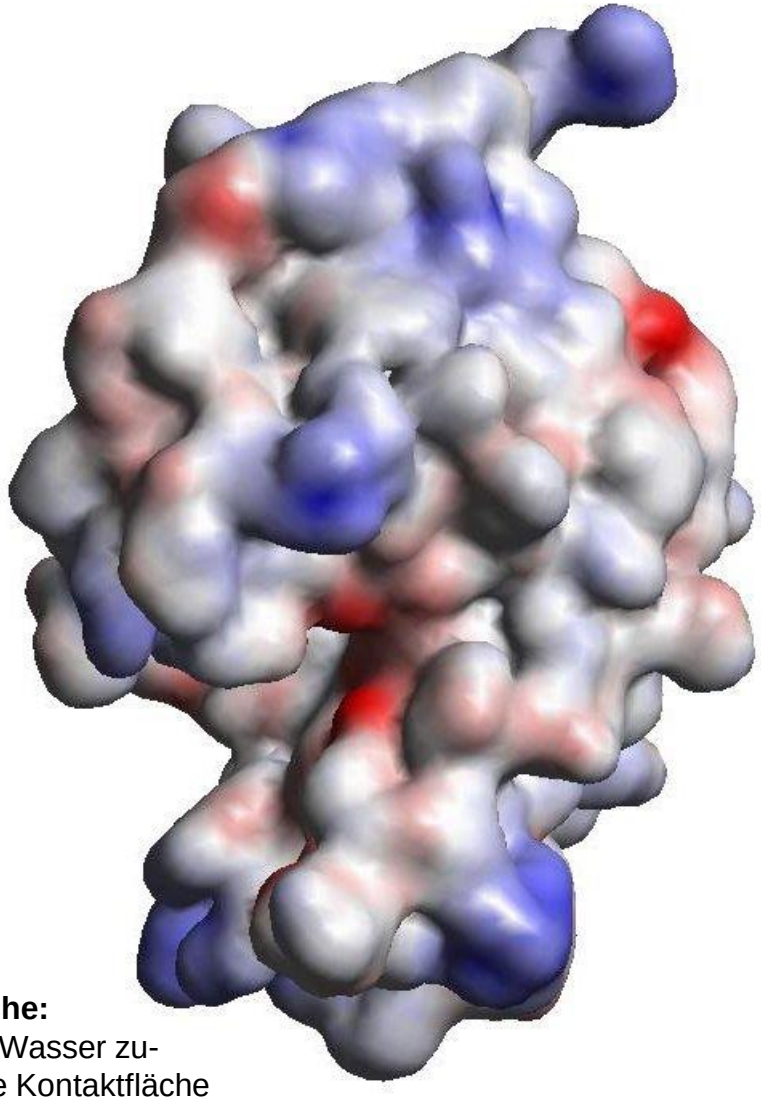


Ribbonmodell:
Darstellung der
Sekundärstrukturen

Proteinstruktur: Oberfläche

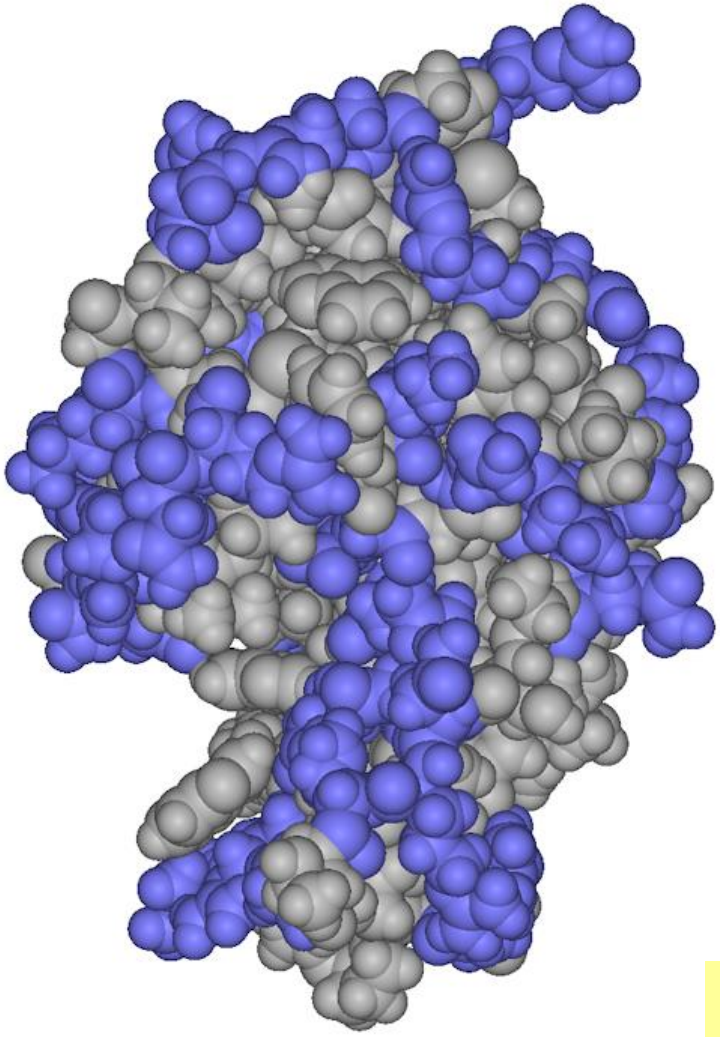


Kalottenmodell:
CPK-Darstellung
der Atome

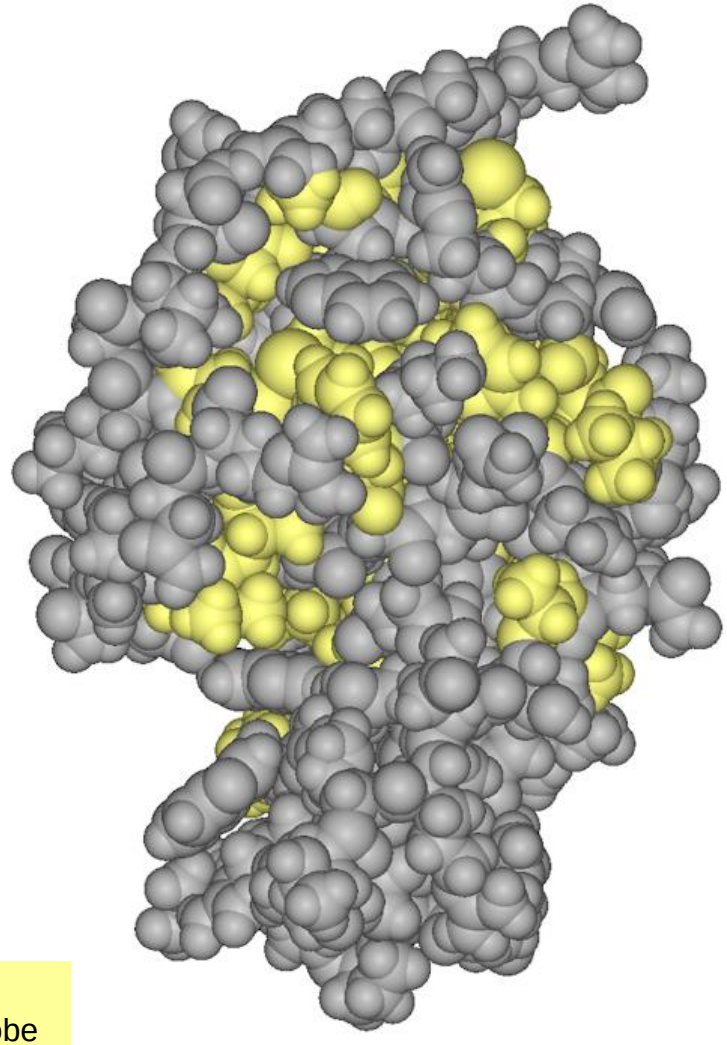


Oberfläche:
Die dem Wasser zu-
gängliche Kontaktfläche

Proteinstruktur: Hydrophilie und Hydrophobie

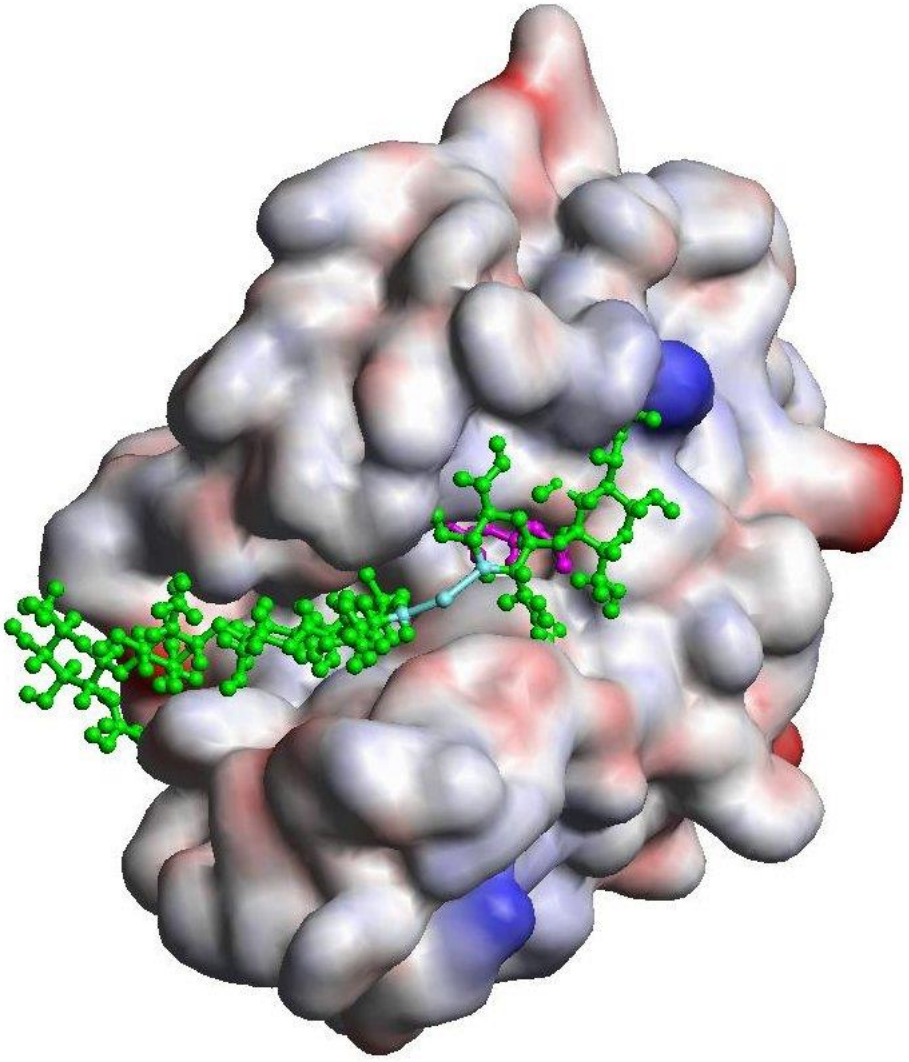


Außen:
Hydrophile
Aminosäuren



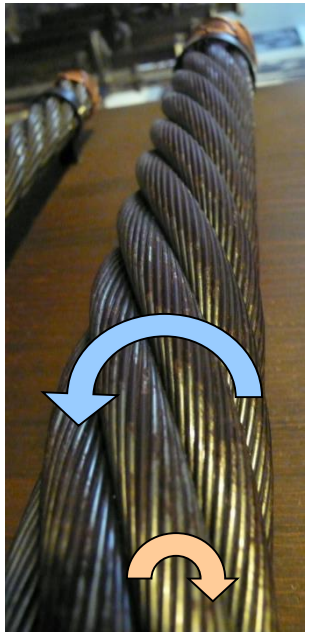
Innen:
Hydrophobe
Aminosäuren

Das Schlüssel-Schloss-Prinzip

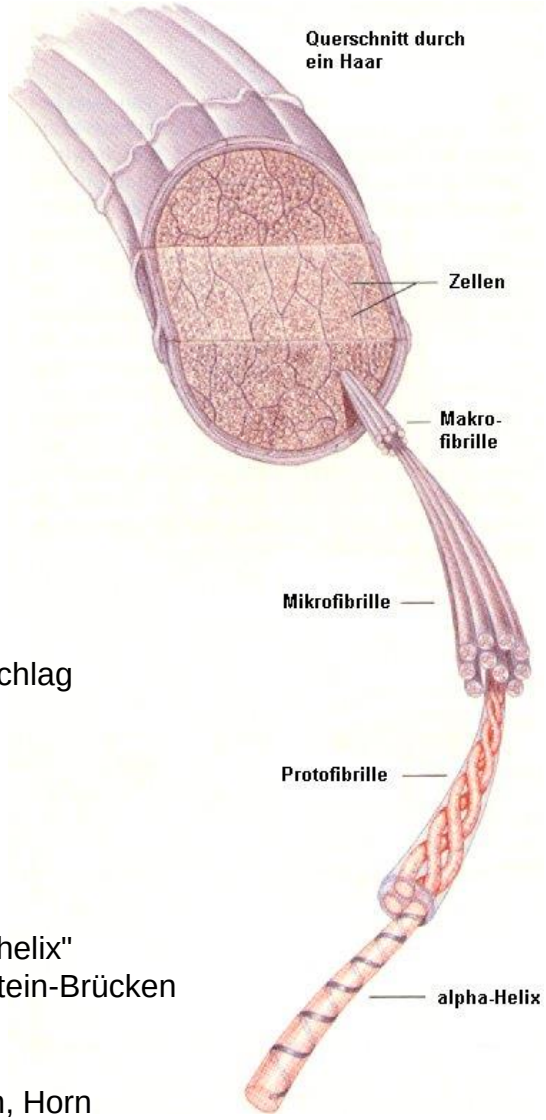


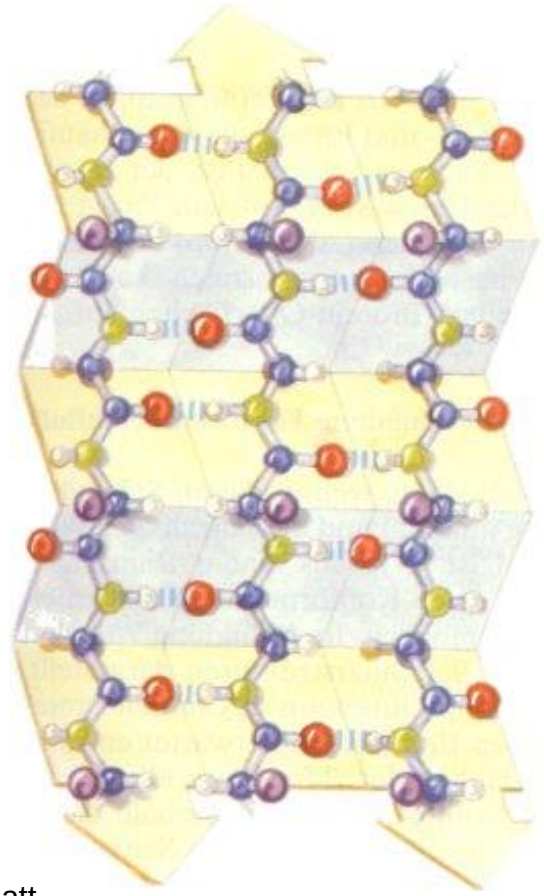
Lysozym
mit seinem Substrat
$(N\text{-Acetylglucosamin})_6$

Faserproteine: Keratine



Drahtseil mit Gegenschlag



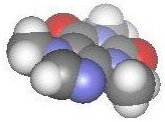


α-Keratin:
2 oder 3 α-Helices in linksgängiger "Superhelix" stabilisiert durch Cystein-Brücken

Vorkommen:
Wolle, Haare, Nägeln, Horn

β-Keratin:
antiparalleles β-Faltblatt

Vorkommen:
Federn.
Seide (Seidenfibroin mit $[Gly\text{-}Ser\text{-}Gly\text{-}Ala\text{-}Gly\text{-}Ala]_n$, Spinnennetz

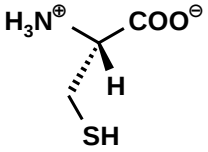


Faserproteine: Keratine (Cystein-Brücken)

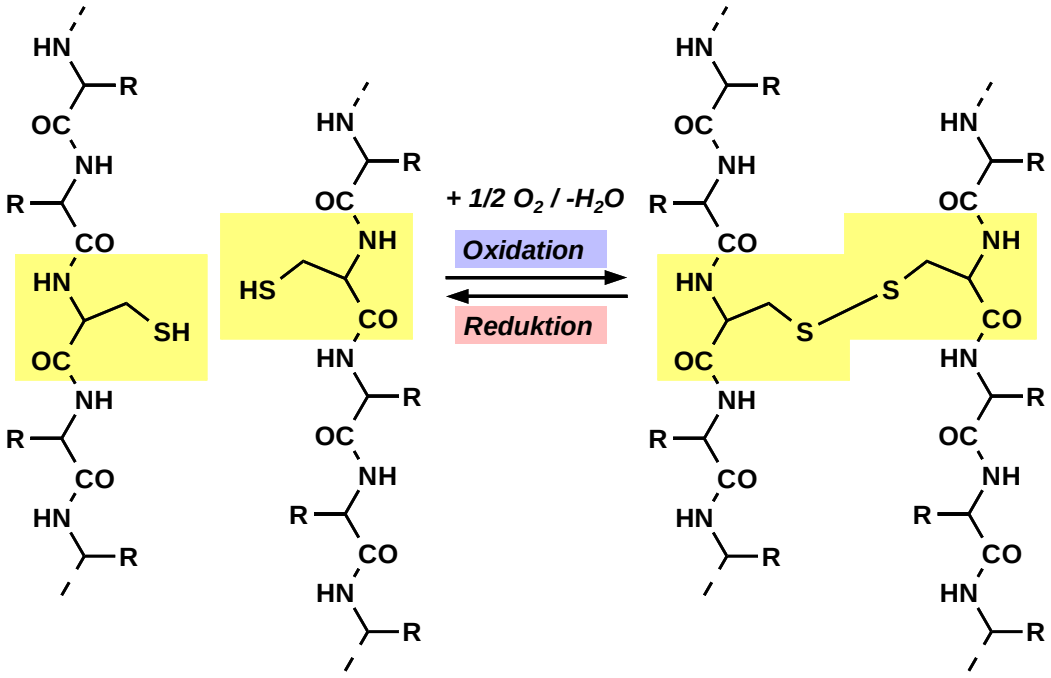
Cystein:

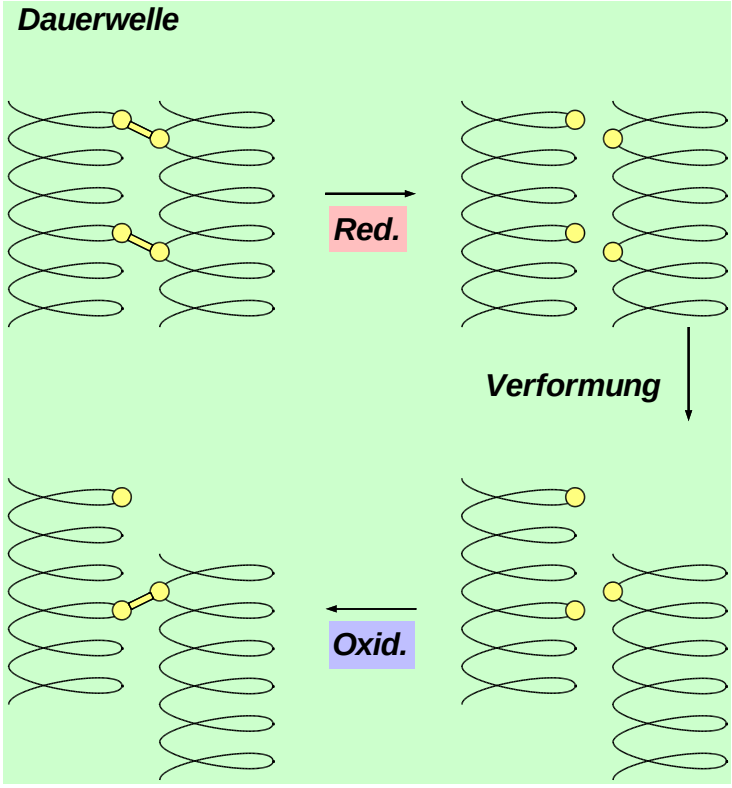
Vorkommen in Proteinen generell: ca. 2,8 %

Vorkommen in Keratinen (Wolle, Haar): 10 - 16 %

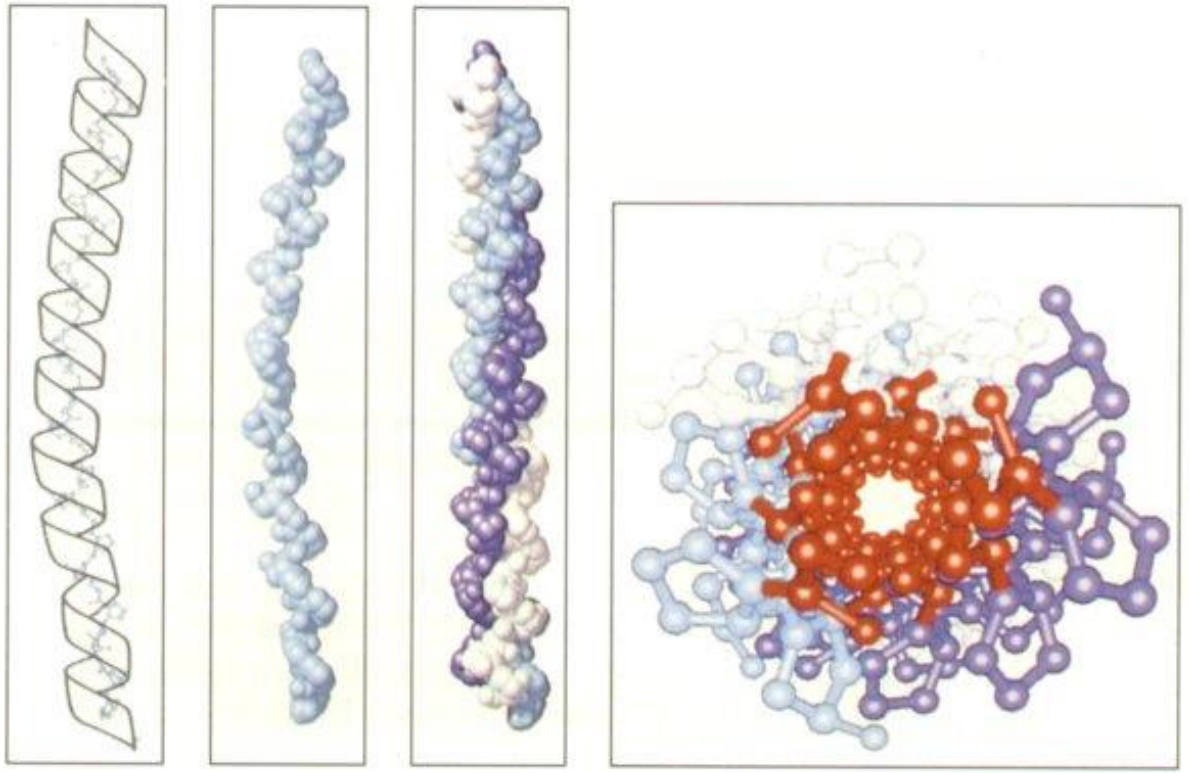


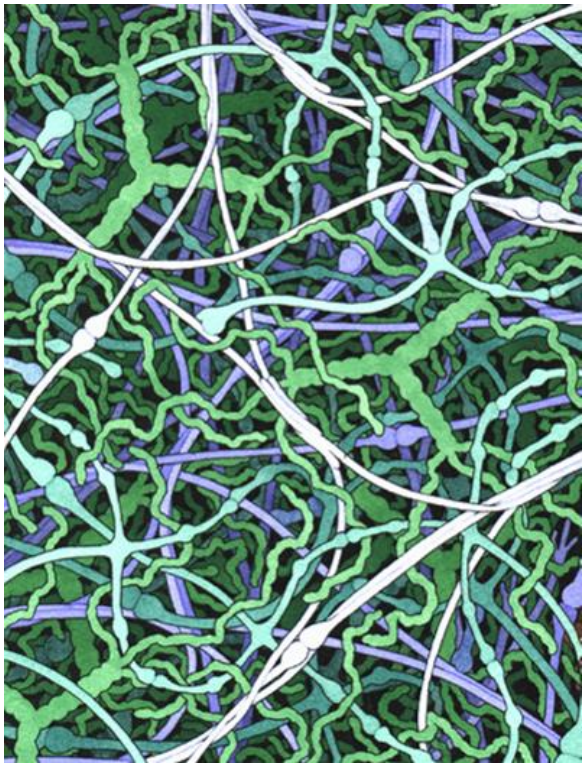
Bildung von Disulfid-Brücken:





Faserproteine: Kollagen

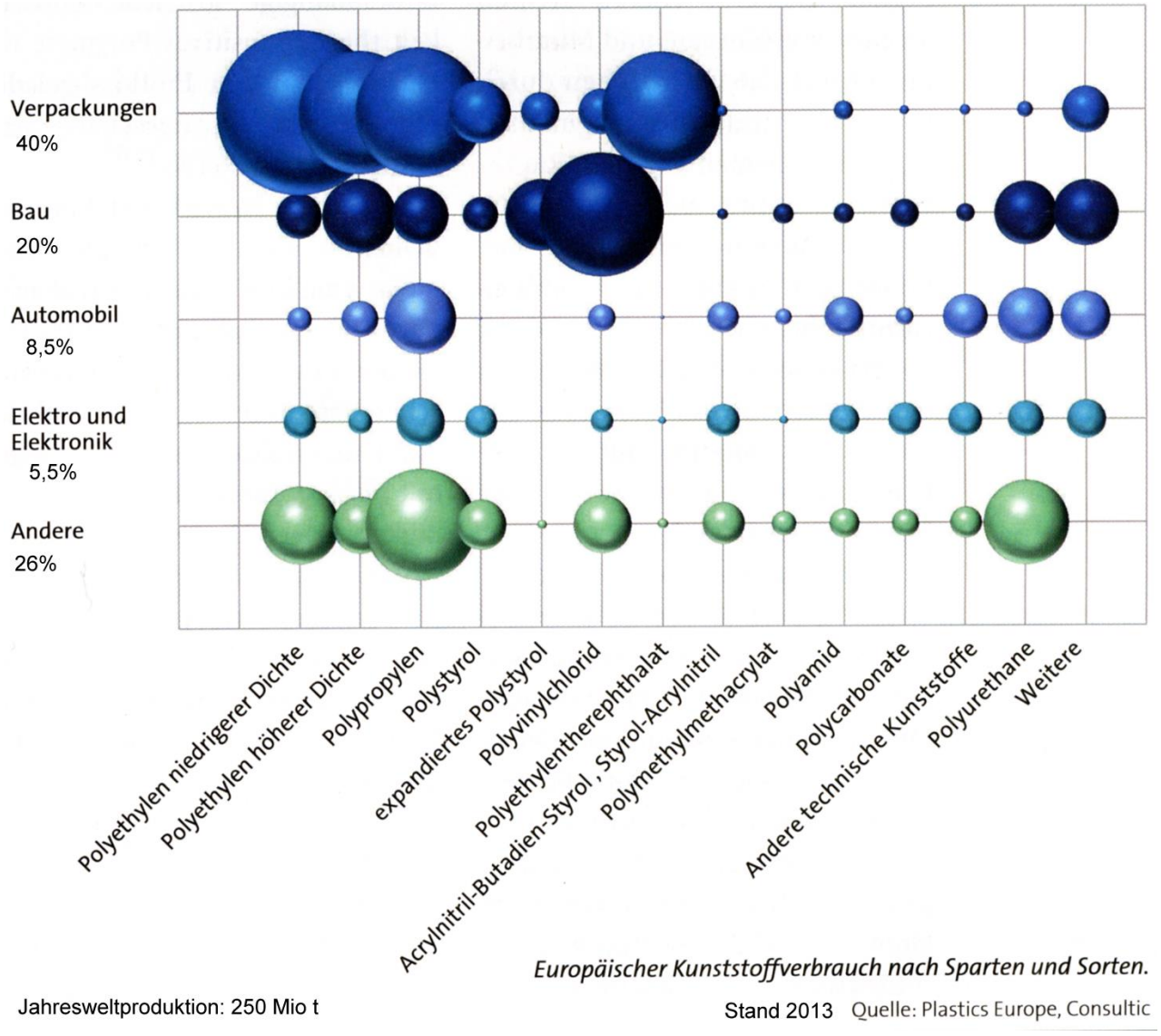




Kollagen:
3 linksgängige Kollagen-Helices mit Gly-X-Pro
in rechtsgängiger "Superhelix" mit Gly nach innen

Vorkommen:
Haut, Knorpel, Sehnen etc.

Kunststoffe



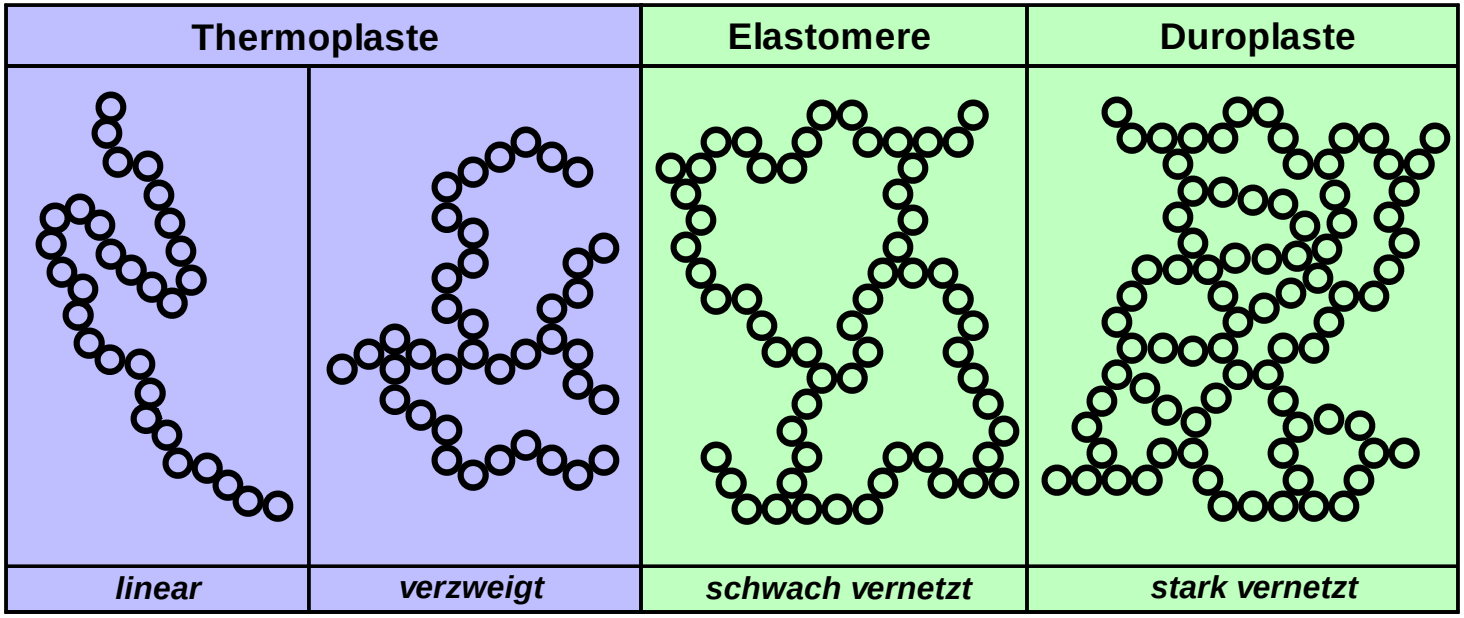
Europäischer Kunststoffverbrauch nach Sparten und Sorten.

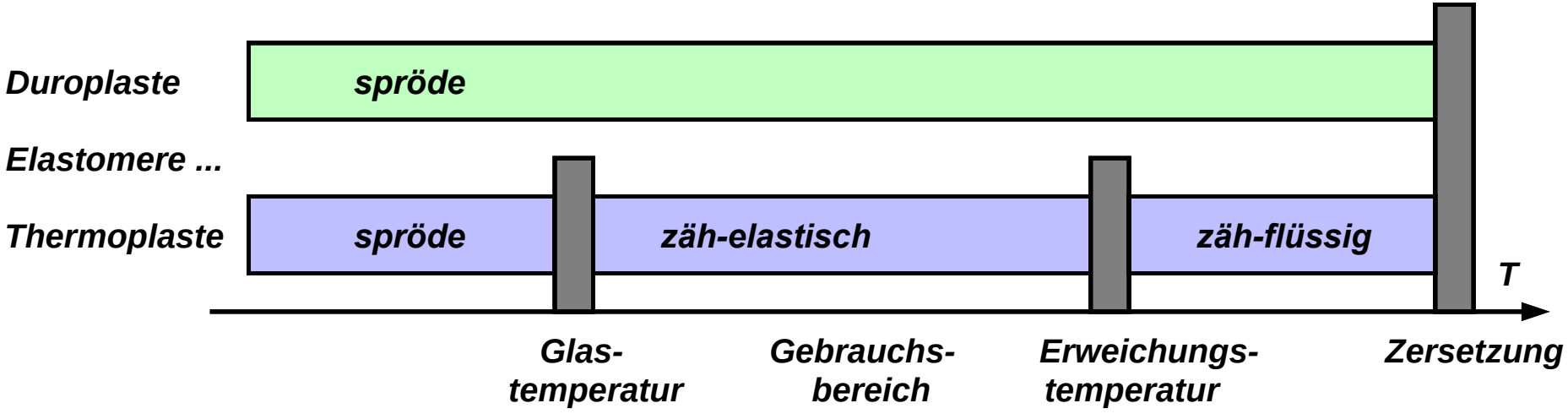
Jahresweltproduktion: 250 Mio t

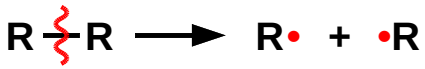
Stand 2013 Quelle: Plastics Europe, Consultic

Homopolymere		**A A A A A A A A A A A A A A A A A A**
Copolymere	*statistisch*	**A A B A B B A B A B B B A A A A B A A**
	alternierend	**A B A B A B A B A B A B A B A B A B A**
	periodisch	**A A A B A A A B A A A B A A A B A A A**
	block	**A A A B B B B A A A B B B B B B A A**
Pfropfcopolymere		**A A A A A A A A A A A A A A A A A A B B B B B B B B B B B B B B B B B B**

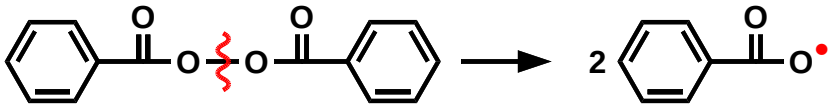
Duroplaste und Thermoplaste



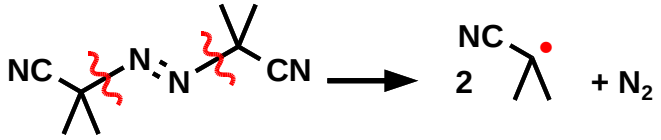


Start:  (Bildung von Radikalen)

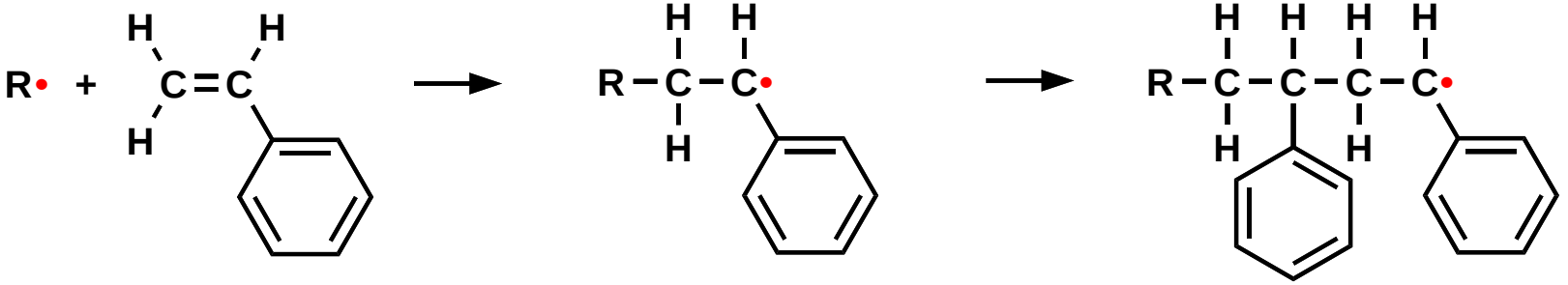
Beispiele:



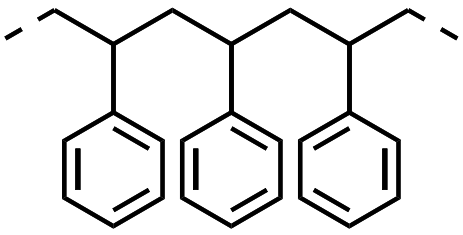
Dibenzoylperoxid (DBPO)



Azo-bis-(isobutyronitril) (AIBN)



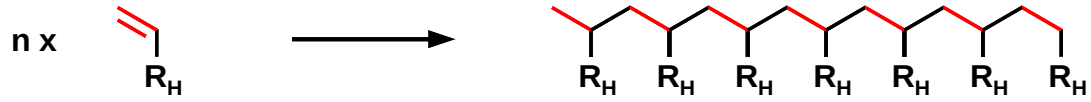
Styrol

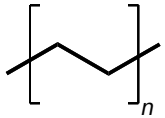
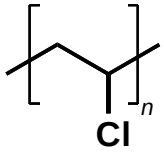
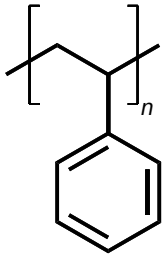
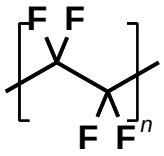
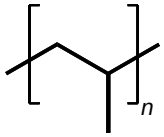
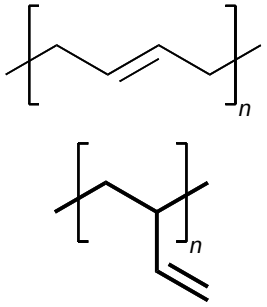
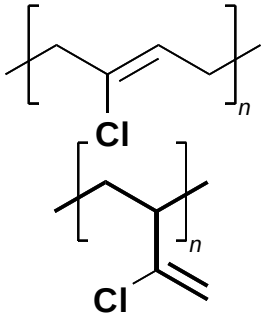
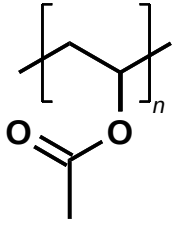
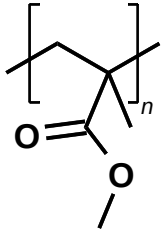
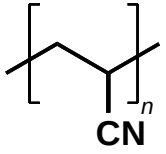
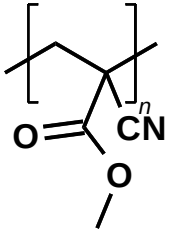
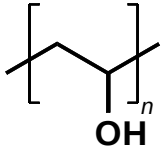
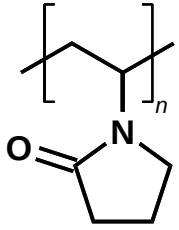
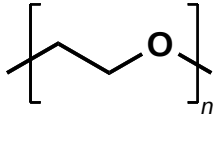


Polystyrol (PS)

Polymerisationen
gibt es zudem
anionisch, kationisch und
am Katalysator

(Vinyl)-Polymerisate

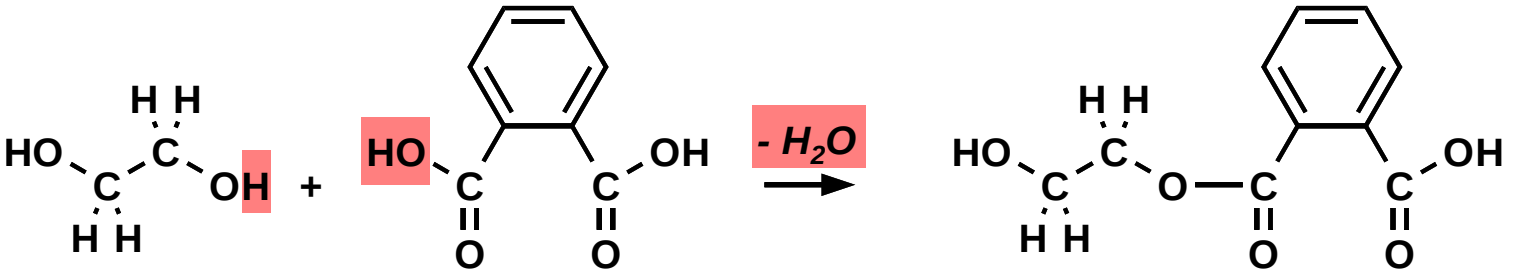


 PE Polyethylen	 PVC Polyvinyl-chlorid	 PS Polystyrol	 PTFE Polytetra-fluorethylen	 PP Poly-propylen	 BR Polybutadien	 CR Polychloropren
 PVAC Polyvinyl-acetat	 PMMA Polymethyl-methacrylat	 PAN Polyacryl-nitril	 Polymethyl-cyanacrylat	 PVAL Polyvinyl-alkohol	 PVP Polyvinyl-pyrrolidon	 PEG Polyethylen-glycol (kein Vinylpolymer)

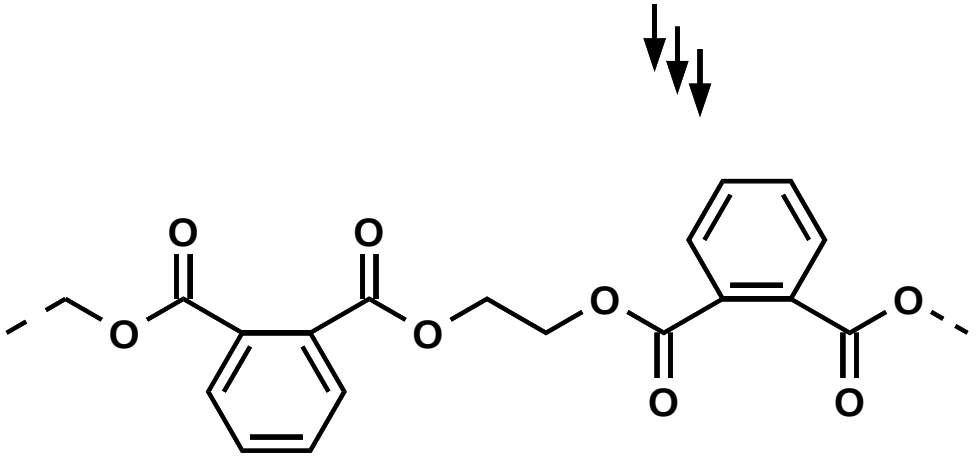
Copolymerisate und Blends (Mischungen):

ABS	Acrylnitril-Butadien-Styrol	**EVA**	Ethylen-Vinylacetat
SAN	Styrol-Acrylnitril	**PP/PE**	Propylen-Ethylen

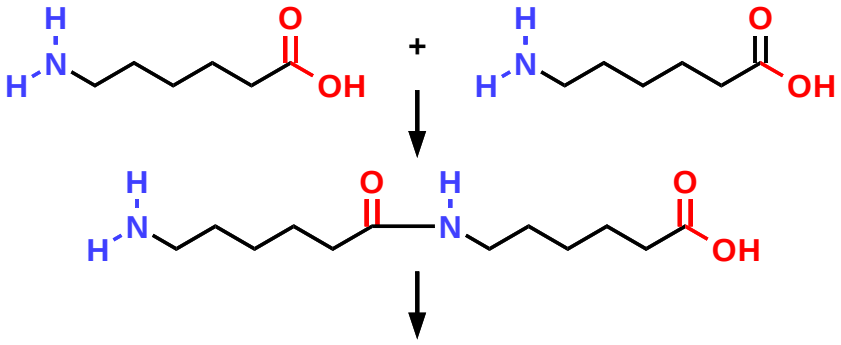
Polykondensationsreaktionen: Abspaltung kleiner Moleküle (meist Wasser oder HCl)

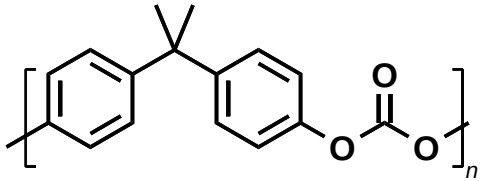
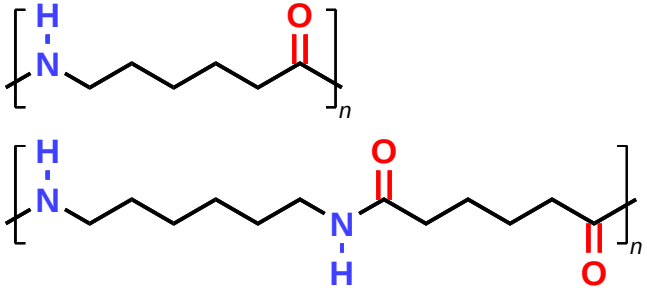
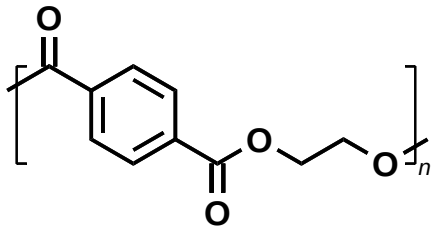


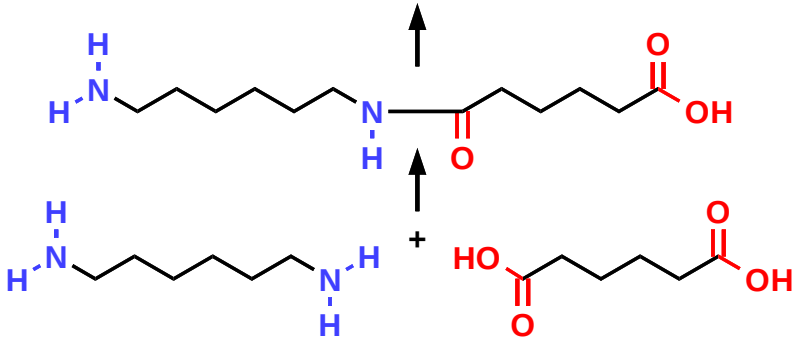
Glycol *Phthalsäure*



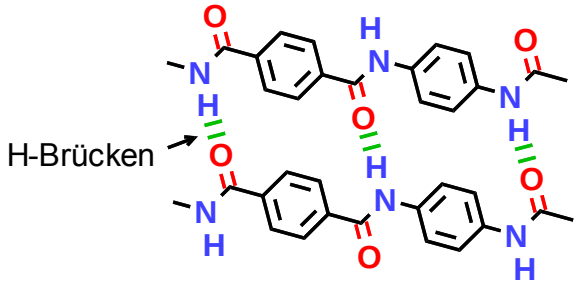
Polyester



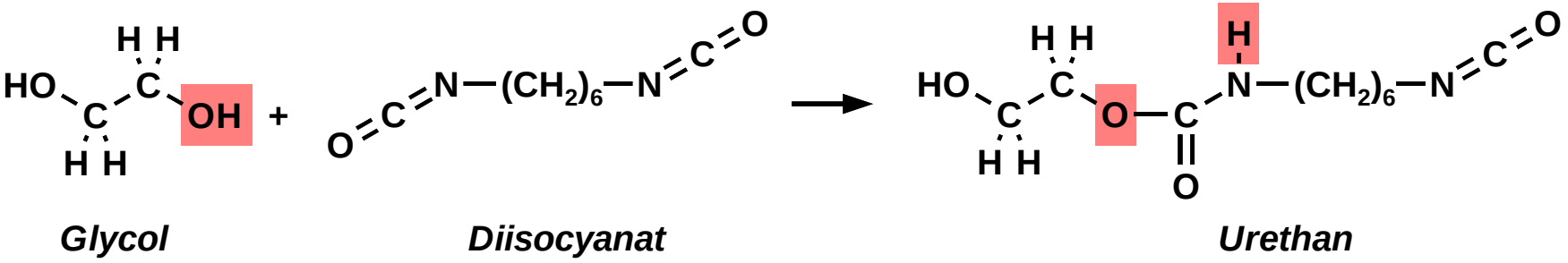
PC Polycarbonat	PA6 und PA6.6 Polyamid	PET Polyethylenterephthalat
		

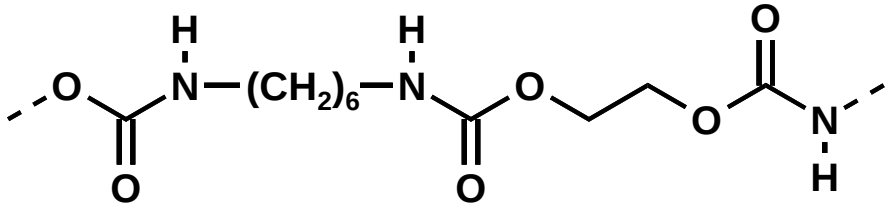


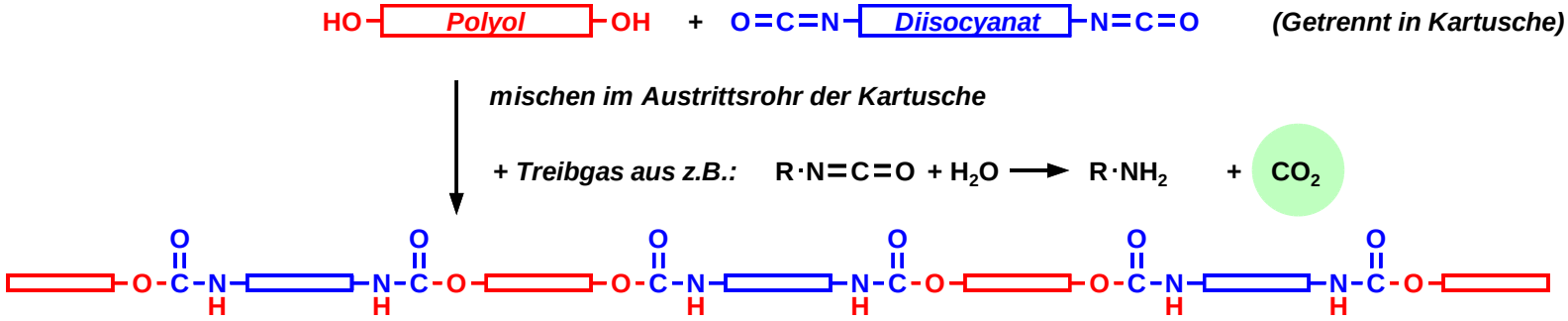
Kevlar (Aramid):



Polyadditionsreaktionen: ohne Abspaltung kleiner Moleküle

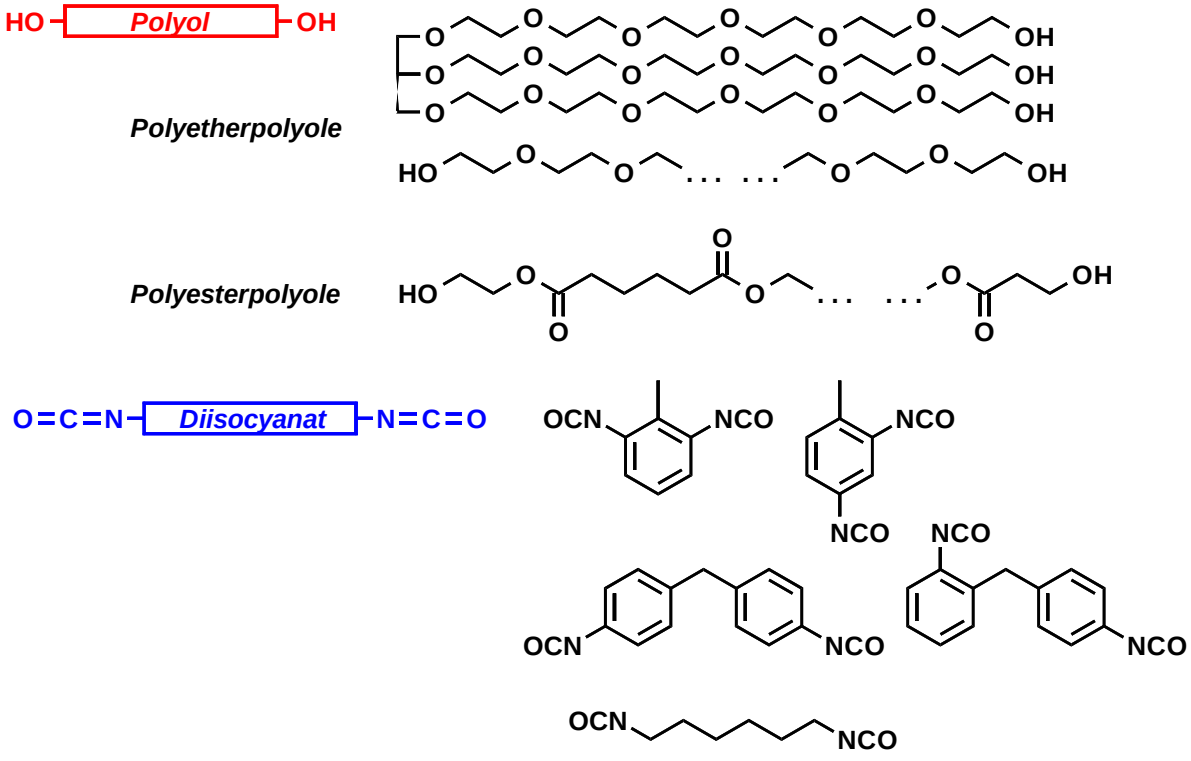




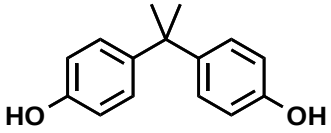


Polyurethan

Beispiele:

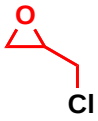


Elastomere/Duroplaste: z.B. Epoxidharze



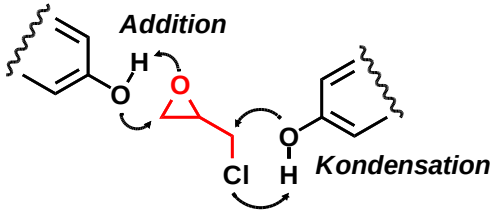
Bisphenol a

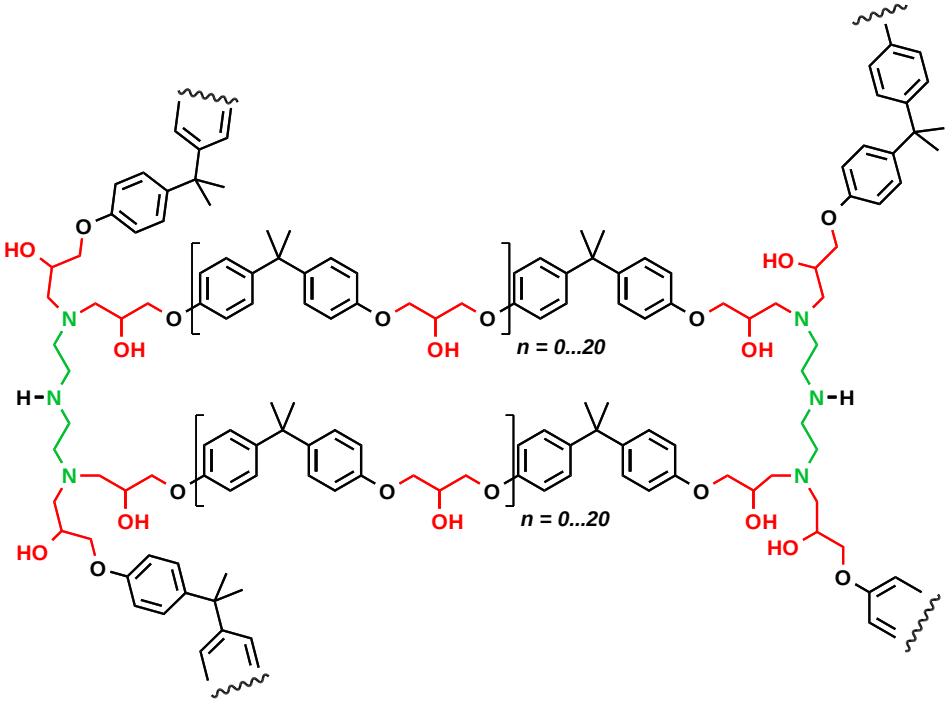
+

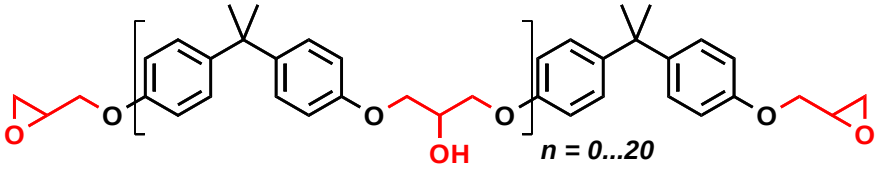


Epichlorhydrin

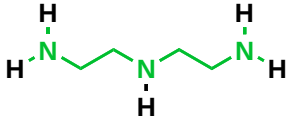
- HCl





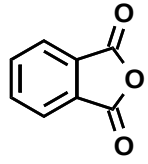


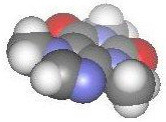
Epoxid-Präpolymer



Diethylentriamin (DETA)
(Härter)

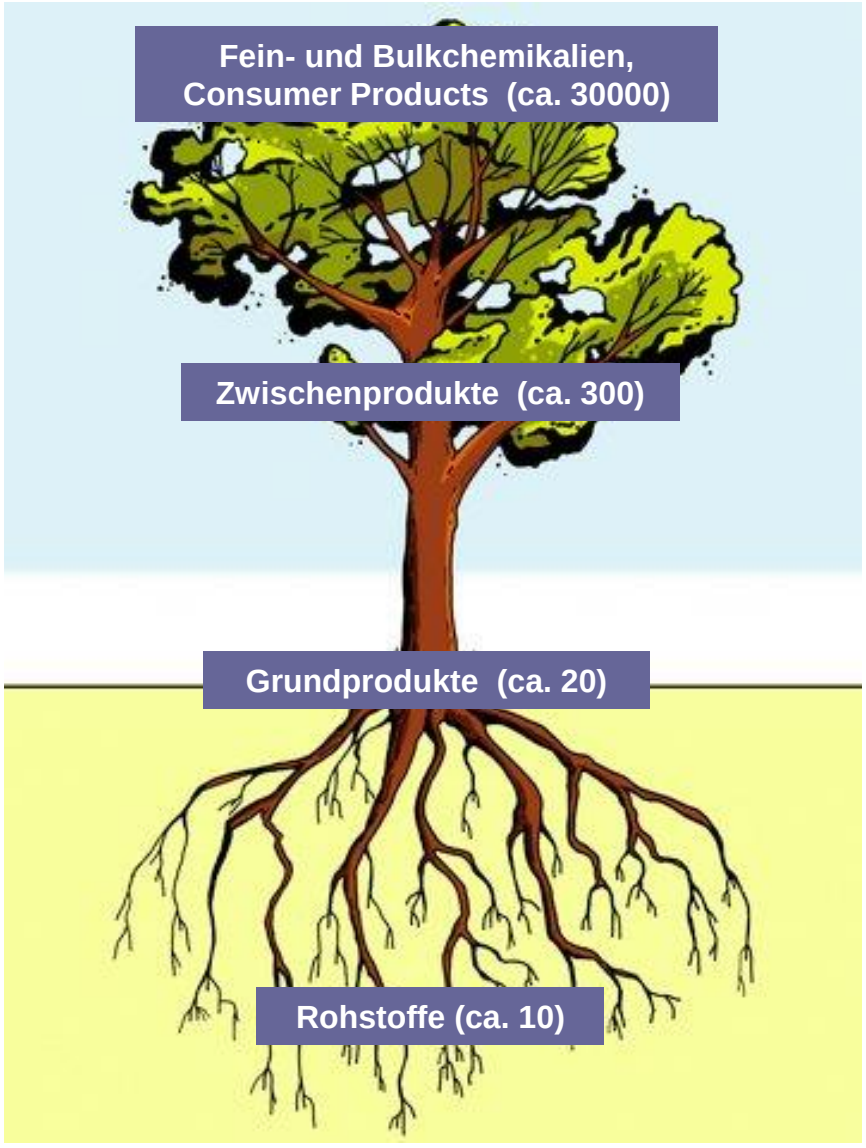
Alternative:
Phthalsäureanhydrid (PSA)





Industrielle Organische Chemie: Pharmazeutika

Der Stammbaum chemischer Produkte



Kunststoffe, Pharmazeutika, Farbstoffe und Pigmente, Lösungsmittel, Düngemittel, Fasern, Kosmetika, Bauchemikalien, …

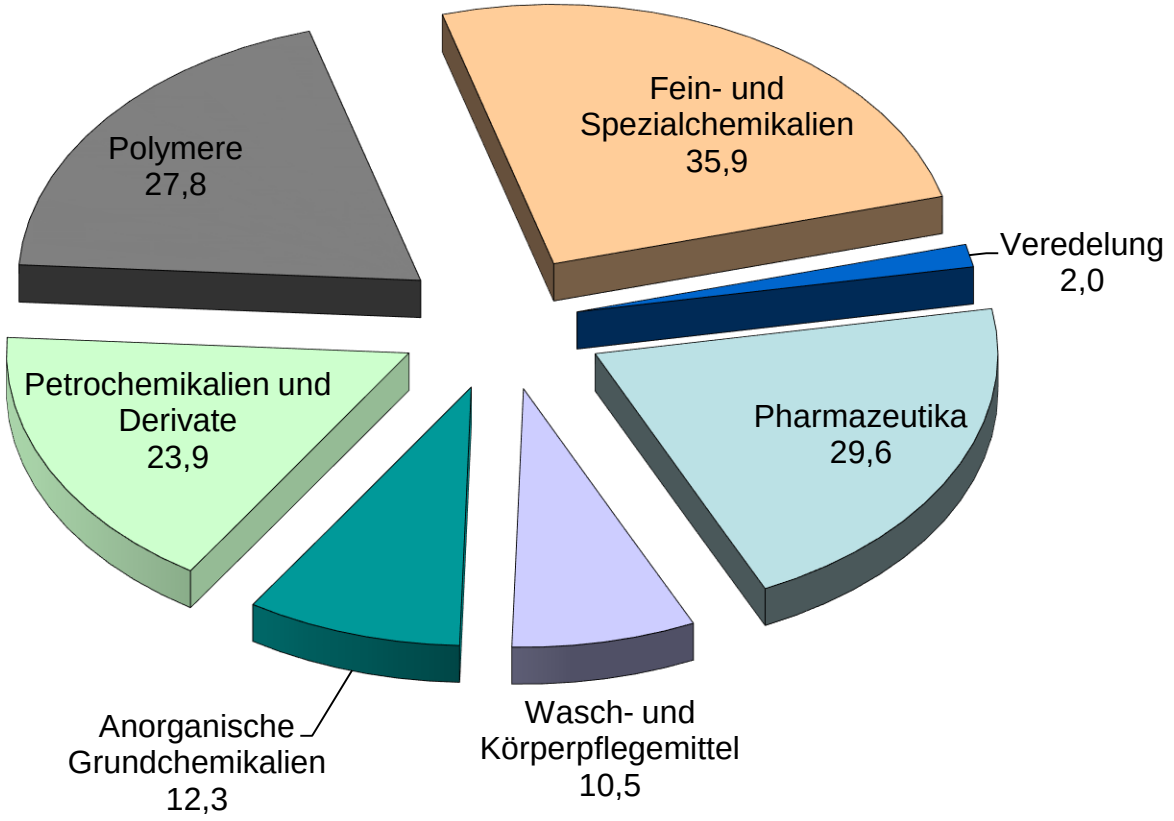
Methanol, Vinylchlorid, Styrol, Formaldehyd, Ethylenoxid, Essigsäure, Acrylnitril, Cyclohexan, Acrylsäure, …

Ethen, Propen, Butadien, Benzol, Synthesegas, Acetylen, Ammoniak, Schwefelsäure, Soda, Chlor, …

Erdöl, Erdgas, Kohle, Biomasse, Steinsalz, Phosphat, Schwefel, Luft, Wasser, …

Produktionsstruktur in Deutschland

Produktionswerte der Chemieindustrie in Deutschland in Mrd. Euro
(Summe: 142,1 Mrd. Euro)



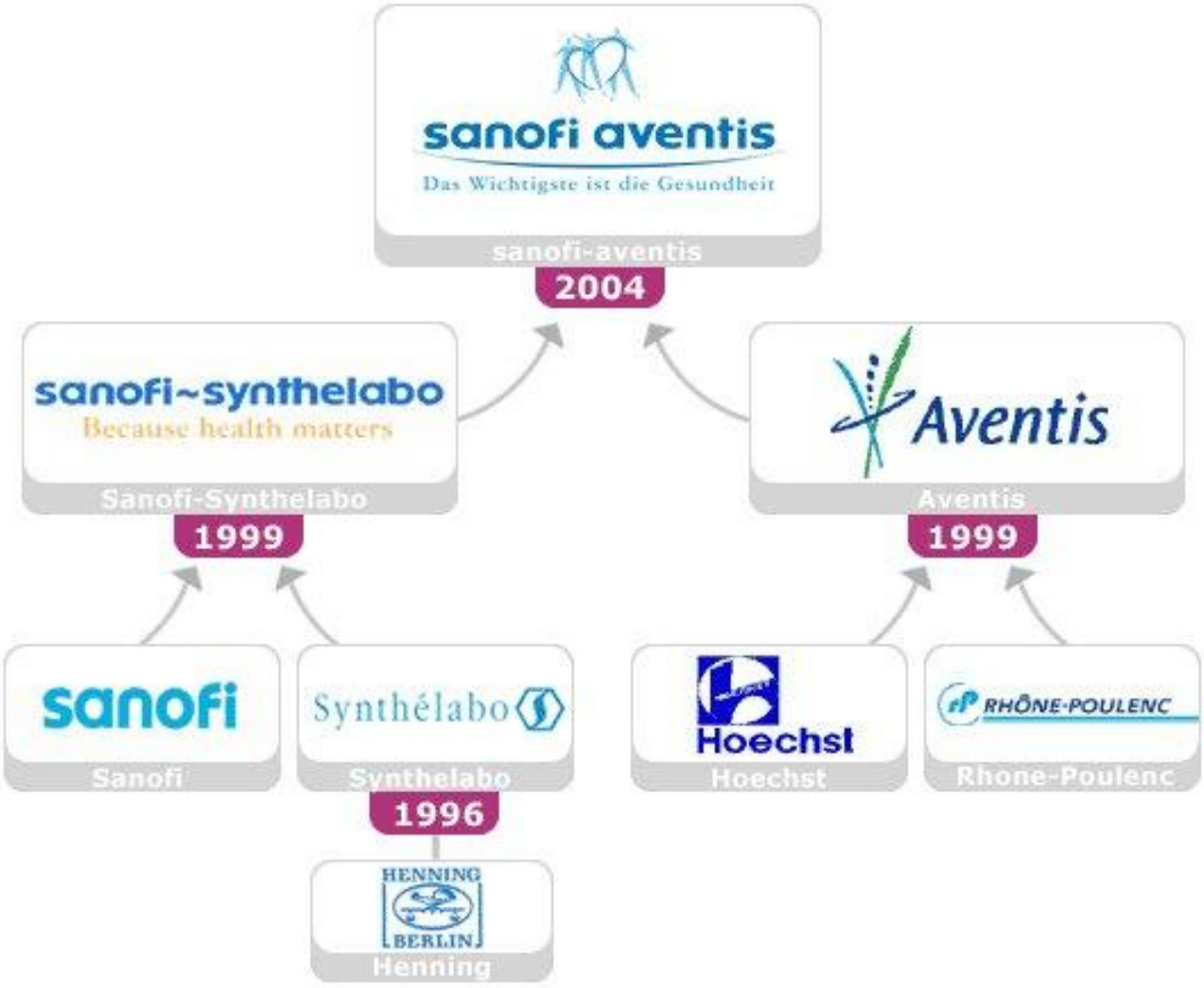
Quelle: VCI
Stand: 2015

Die chemische Industrie in Deutschland

Rang	Unternehmen	Umsatz (weltweit in Mrd. €)	Beschäftigte (weltweit)
1	BASF SE	70,4	112.400
2	Bayer AG	46,3	116.800
3	Fresenius SE	27,6	222.300
4	Henkel AG & Co. KGaA	18,1	49.400
5	Linde AG	17,9	65.100
6	Boehringer Ingelheim GmbH	14,8	47.500
7	Evonik Industries AG	13,5	33.300
8	Merck KGaA	12,8	49.600
9	Covestro AG	12,1	15.800
10	Lanxess AG	7,9	16.200

Quelle: VCI
Stand: 2015

Wo ist Hoechst ?



Das Schmerzmittel Ibuprofen

Wirkungen:

analgetisch (schmerzstillend)
antiphlogistisch (entzündungshemmend)
antipyretisch (fiebersenkend)

In seiner Wirkung ist es der Acetylsalicylsäure (Aspirin®) überlegen, wobei das Nebenwirkungs-potential bei Ibuprofen geringer ist.

Nebenwirkungen:

Entzündung und Blutungen der Magenschleimhaut
Gerinnungshemmung des Blutes

Schmerzkaskade

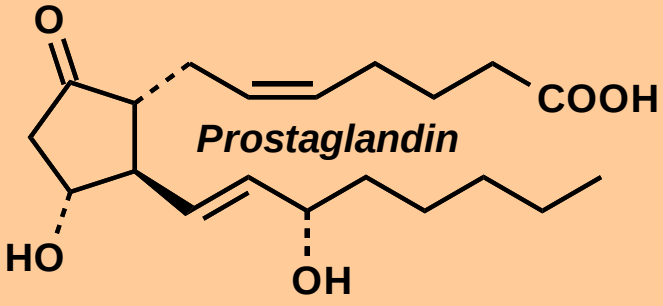
1. **Gewebsverletzung führt u.a. zur Ausschüttung von Arachidonsäure.**
2. **Cyclooxygenasen (COX) wandeln Arachidonsäure in Prostaglandine um.**
3. **Bradykinin wird gebildet.**
4. **Histaminausschüttung.**
5. **Ödembildung, Rötung, vermehrtes Eindringen von Leukozyten.**
6. **Cytokine schalten das ZNS auf Fieber.**

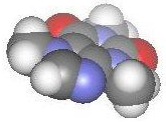
COX-1 ständig aktiv im Endothel
z.B. zum Schutz der Magenschleimhaut

COX-2 nur induziert aktiv in Leukozyten
z.B. bei Verletzungen

Aspirin®, Ibuprofen, Paracetamol etc.
hemmen COX-1 **UND** COX-2

Suche nach COX-2 selektiven Inhibitoren
z.B. Rofecoxib (Vioxx®, Rückzug 2004)





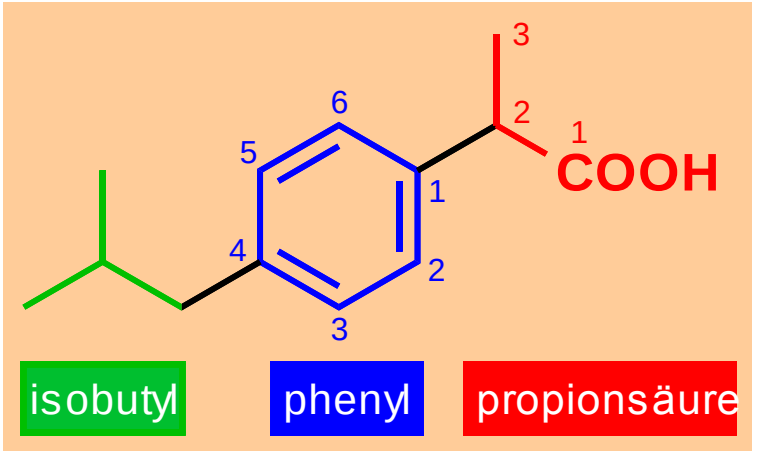
Ibuprofen (Nomenklatur und Struktur)

Systematische Bezeichnung:

(±)-2-(4-Isobutylphenyl)propionsäure

Freiname, Generic Name,
INN International Nonproprietary Name:

Ibuprofen

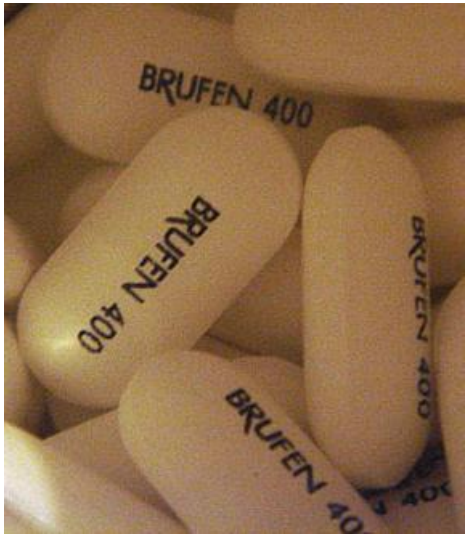


Markennamen:

Act 3; Adex 200; Adran; Advil; Alaxan; Algofen; Am-Fam 400; Amibufen; Anafen; Anco; Andran; Anflagen; Antarene; Antiflam; Apo-Ibuprofen; Apsifen; Artofen; Artril; Artril 300; Atril 300; Balkaprofen; Betaprofen; Bloom; Bluton; Brofen; Brufanic; Brufen; Brufen 400; Brufen Retard; Bruflam; Brufort; Buburone; Buluofen; Burana; Butacortelone; Butylenin; Carol; Cobo; Codral Period Pain; Combiflam; Dansida; Dentigoa; Dibufen; Dolgin; Dolgirid; Dolgit; Dolmaral; Dolo-Dolgit; Dolocyl; Dolofen; Dolofen F; Dolomax; Dorlormin; Donjust B; Dorival; Drin; Easifon; Ebufac; Emflam; Emflam 200; Emodin; Epobron; Femadon; Fenbid; Fenspan; Focus; Gofen; Gynofug; Haltran; IB 100; IP 82; Ibosure; Ibren; Ibu-Attritin; Ibu-Tab; Ibu-slow; Ibufen; Ibuflamar; Ibufug; Ibugen; Ibugesic; IbuHEXAL, Ibuleve; Ibulgan; Ibumetin; Ibupirac; Ibuprocin; Ibuprofen; Ibuprohm; Ibusal; Ibutad; Ifen; Inabrin; Inflam; Inza; Ipren; Irfen; Isodol; Lamidon; Librofem; Lidifen; Liptan; Lopane; Mensoton; Motrin; Motrin IB; Mynosedin; NSC 256857; Nagifen-D; Napacetin; Nobafon; Nobfelon; Nobgen; Noritis; Norton; Novogent; Novoprofen; Nuprin; Nurofen; Optifen; Opturem; Ostarin; Ostofen; Paduden; Panafen; Pantrop; Paxofen; Pediaprofen; Perofen; Proartinal; Profen; Proflex; Prontalgin; Provon; Quadrax; RD 13621; Rafen; Ranofen; Recidol; Relcofen; Roidenin; Rufin; Rupan; Seclodin; Stelar; Suspren; Syntofene; Tabalon; Tabalon 400; Tarein; Tatanal; Tofen; Trendar; U 18753; Unipron; Upfen; Uprofen; Urem; Zafen; Zofen;

Curriculum vitae von Ibuprofen

1950er Jahre
Suche nach einem Ersatz für Aspirin® (gefährliche Nebenwirkungen bei Hochdosierung).



1961
Mitarbeiter der Fa. Boots Pure Drugs (UK) erkennen die Alkylcarbonsäurederivate als wirksam und melden dafür ein Patent an. Unter dieser Verbindungsklasse ist auch das spätere Ibuprofen.

1961 (Dez.)
Erste Synthese von Ibuprofen durch die Fa. Boots.

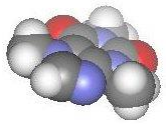
1964
Das Patent wird erteilt (971700).

1966
Erste klinische Tests am Northern General Hospital in Edinburgh, Schottland.

1969
Markteinführung in UK unter.dem Namen Brufen®.

1974
Markteinführung.in den USA in höherer Dosierung.

1980er Jahre
Aufhebung der Verschreibungspflicht (1983 UK, 1984 USA, 1989 D). Eine neue Synthese wird entwickelt. Erste Generika kommen auf den Markt (Nurofen, Advil, Motrin) und werden z.B. in den USA in normalen Supermärkten verkauft (over-the-counter).



Arzneimittelentwicklung

12-15 Jahre 500-800 Mio. Euro

Targeting

Target Identifizierung und Validierung
Welche Krankheit? Welche mögliche Behandlungsmöglichkeit?
Welches molekulare Ziel (Rezeptor, Enzym oder anderes Protein)?

Screening – Auffinden aktiver Substanzen
Aufbau von pharmakologischen Testsystemen. Lead-Structures aus Pflanzen, Tieren, Mikroorganismen, Seren oder durch intellektuelle Findung (Computer Modeling).

Chemische Optimierung
Erhöhung der Wirkung und Bioverfügbarkeit durch Variation der Lead-Structures.

Start Patentschutz
Laufzeit 20 Jahre

Klinische Prüfung

Präklinik – Klinische Sicherheit und Wirksamkeit
Einsatz von Zellkulturen und Tierversuchen.

Phase I – Untersuchung an Gesunden
Test der Aufnahme und Nebenwirkungen mit geringen Wirkstoffmengen an 20-80 gesunden freiwilligen Probanden in Form von Machbarkeitsstudien (Proof-of-Concept [PoC]).

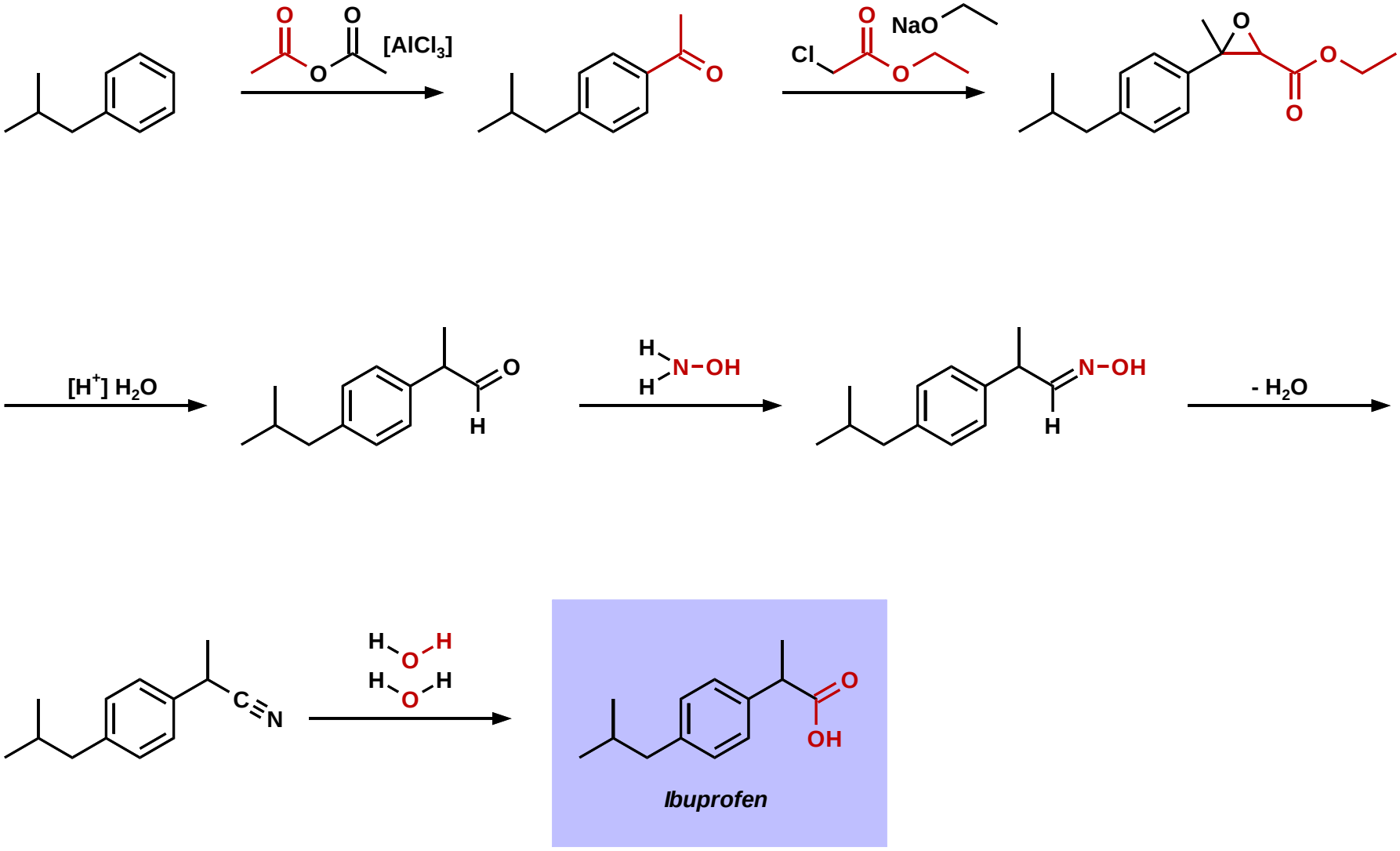
Phase II – Untersuchung an wenigen Kranken
Prüfung der Wirkung und Dosisfindung an 100-300 freiwilligen Patienten. Test und Vergleich gegen Scheinmedikamente (Placebos) oder eine andere verfügbare Therapie.

Phase III – Untersuchung mit vielen Kranken
Nachweis der Wirksamkeit unter definierten Bedingungen an oft mehreren tausend Patienten an international verteilten Kliniken. Informationen zur unbedenklichen Anwendung und Behandlung.

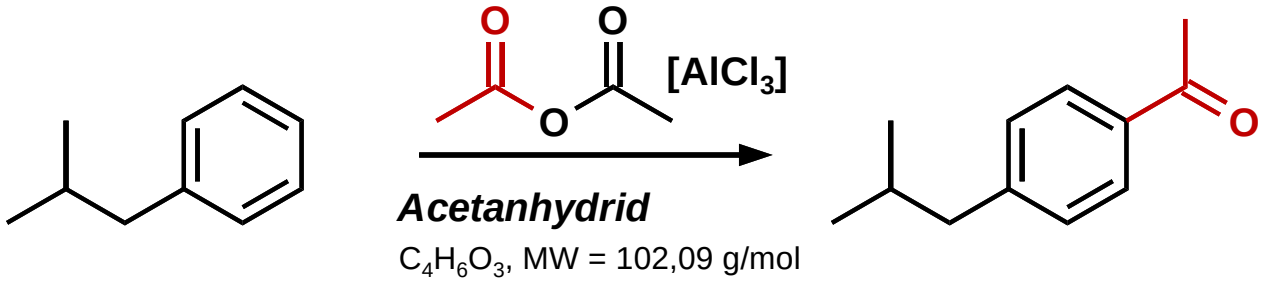
Zulass-ung

Zulassungsvorgang
Prüfung der Studienergebnisse z.B. beim Bundesinstitut für Arzneimittel und Medizinprodukte (BfArM) oder bei der European Medicines Agency (EMEA). Gegebenenfalls **Markteinführung**.

Boots-Synthese von Ibuprofen (1961)



Effizienzkriterium für Reaktionen: Ausbeute



Acetanhydrid

$C_4H_6O_3$, MW = 102,09 g/mol

Isobutylbenzol

$C_{10}H_{14}$, MW = 134,22 g/mol

4-Isobutylacetophenon

$C_{12}H_{16}O$, MW = 176,26 g/mol

Eingesetzte Substanzen (Edukte):

30,0 g	Isobutylbenzol	0,223 mol
35,7 g	Acetanhydrid	0,350 mol
1,2 g	$AlCl_3$	Kat.

Erhaltenes Produkt:

28,3 g 4-Isobutylacetophenon 0,161 mol

Limitierendes Edukt:

Isobutylbenzol 0,223 mol

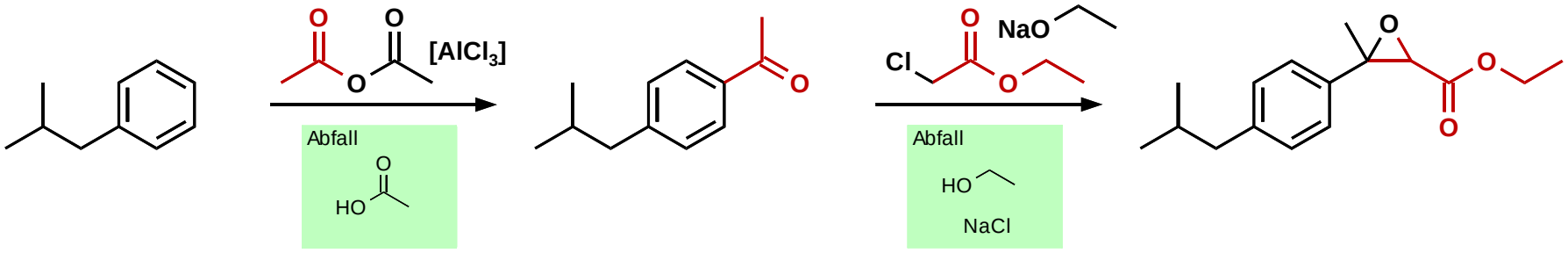
Theoretische Produktmenge bei 100 % Umsatz:

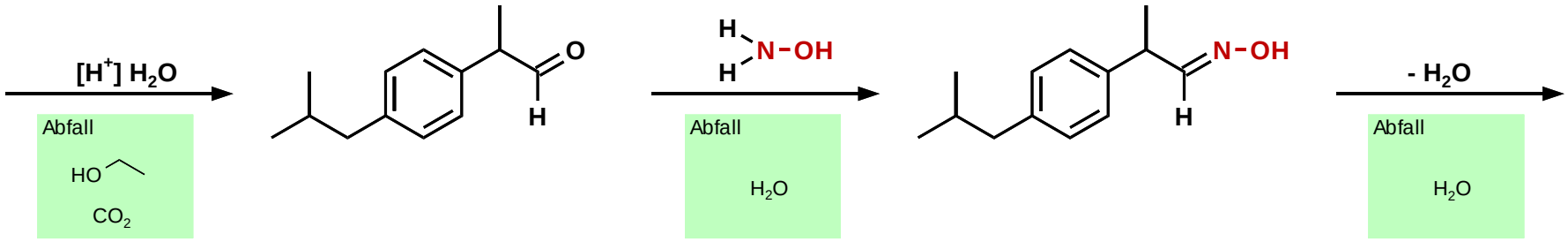
4-Isobutylacetophenon 0,223 mol

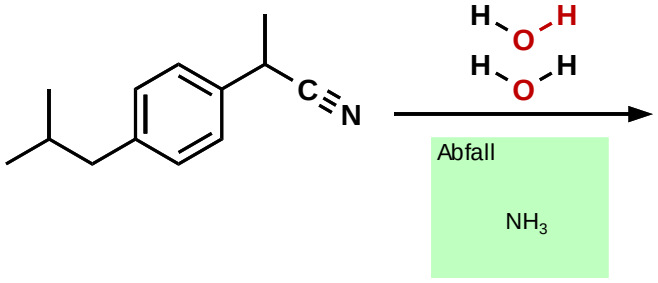
Ausbeute = Erhaltene Produktmenge / Theoretische Produktmenge

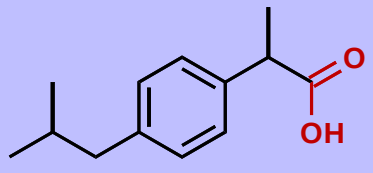
= 0,161 mol / 0,223 mol = **72 %**

Effizienzkriterium für Reaktionen: Atomökonomie









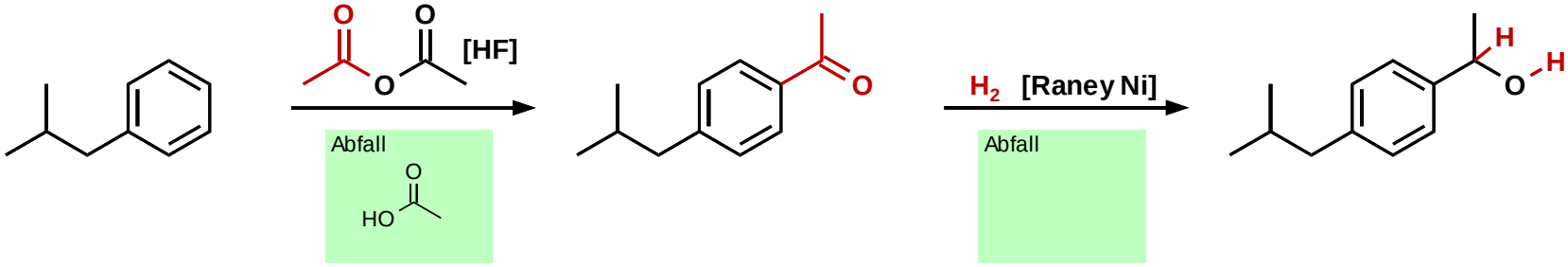
Ibuprofen

Atomökonomie

M_W (Reagenzien $C_{20}H_{42}NO_{10}ClNa$) :	514,5 g/mol
M_W (Ibuprofen $C_{13}H_{18}O_2$) :	206,0 g/mol
M_W (Abfälle $C_7H_{24}NO_8ClNa$) :	308,5 g/mol

$$\text{Atomökonomie} = \frac{M_W\ (\text{Ibuprofen})}{M_W\ (\text{Reagenzien})} = 40{,}0\ \%$$

BHC-Synthese von Ibuprofen (1980er)



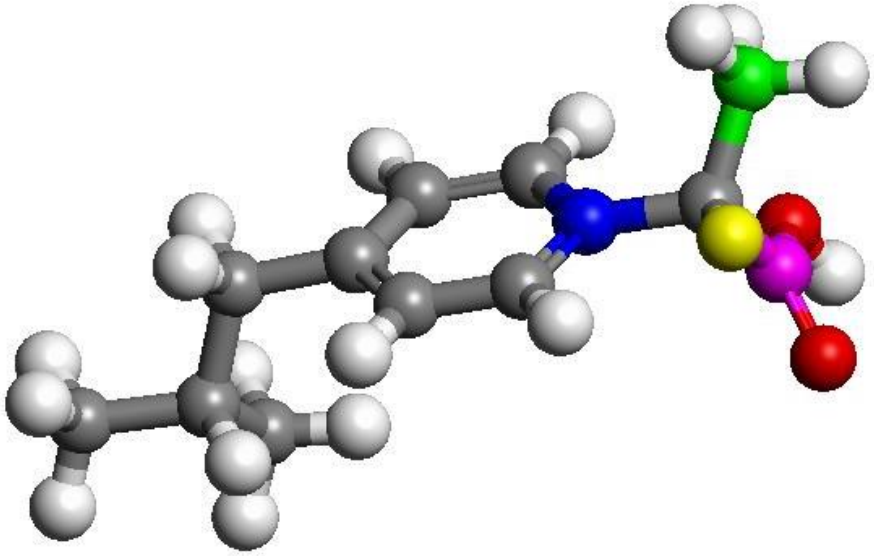
Effizienz durch Katalyse !

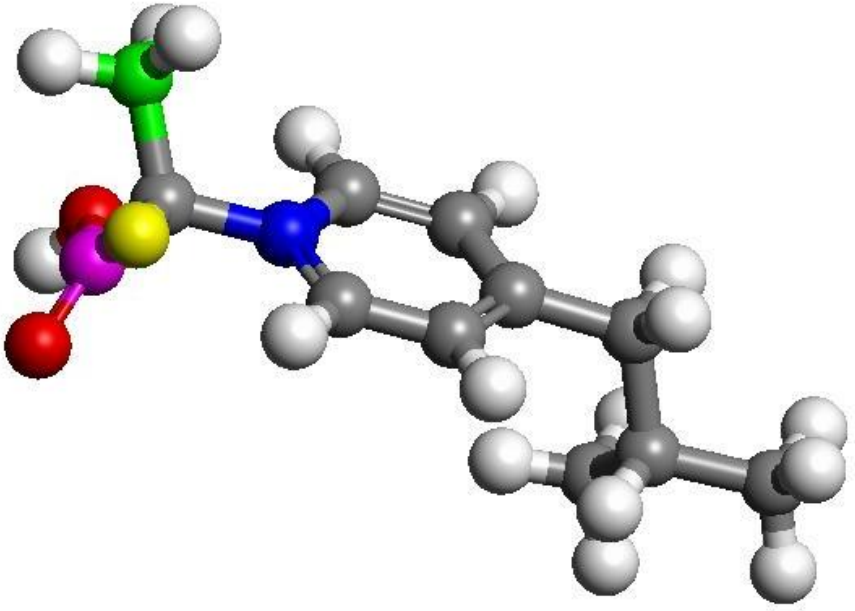
Atomökonomie

M_W (Reagenzien $C_{15}H_{22}O_4$) :	266,0 g/mol
M_W (Ibuprofen $C_{13}H_{18}O_2$) :	206,0 g/mol
M_W (Abfälle $C_2H_4O_2$) :	60,0 g/mol

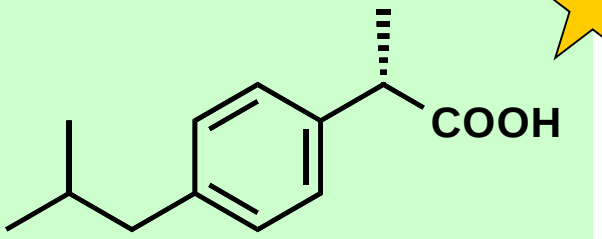
$$\text{Atomökonomie} = \frac{M_W \text{ (Ibuprofen)}}{M_W \text{ (Reagenzien)}} = 77{,}4\ \%$$

Ibuprofen ist chiral!





wirksam **nicht wirksam**



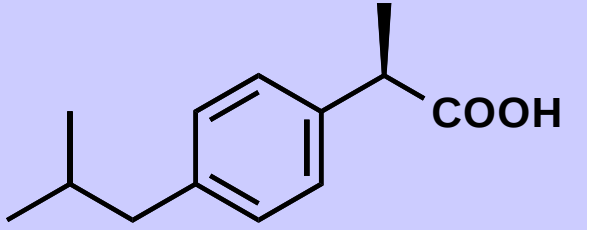
(S)-(+)2-(4-Isobutylphenyl)propionsäure

S-Ibuprofen

Racemat

1:1-Gemisch von

S- und R-Ibuprofen

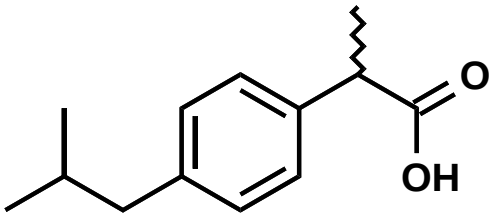


(R)-(-)2-(4-Isobutylphenyl)propionsäure

R-Ibuprofen

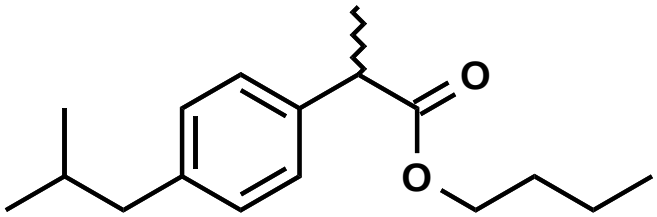
S und R sind Deskriptoren zur Nomenklatur von Stereozentren nach Cahn-Ingold-Prelog, S = sinister (links), R = rectus (rechts)

Enzymatische Racematspaltung



BuOH

$- H_2O$



***R / S* - Ibuprofen**

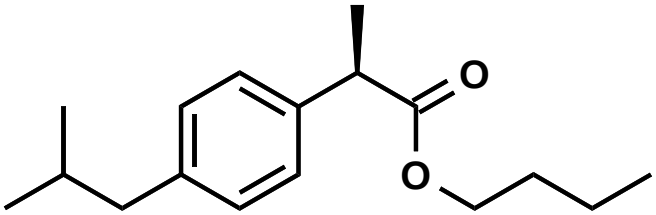
***R / S* - Ibuprofenbutylester**

nicht einfach (kaum) trennbar

einfach trennbar

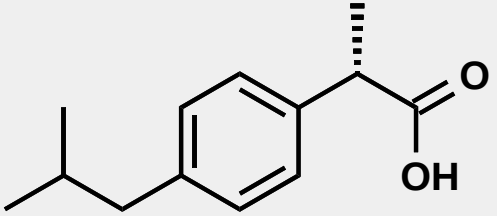
Lipase

$+ H_2O$

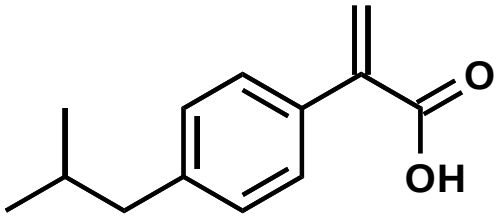


***R* - Ibuprofenbutylester**

+

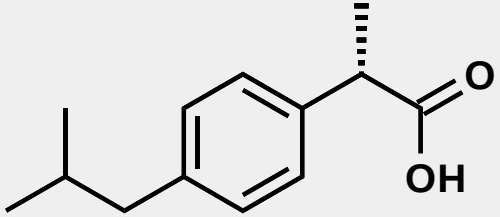


***S* - Ibuprofen**



$[Ru(H_8\text{-BINAP})\,(OAc)_2]$

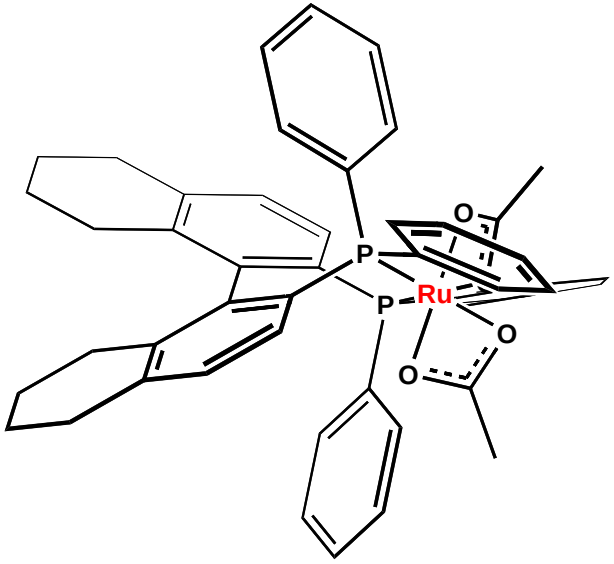
H_2, 100 bar, 8 h, RT



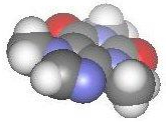
***S* - Ibuprofen**

achirale Vorstufe (mit prochiralen Seiten)

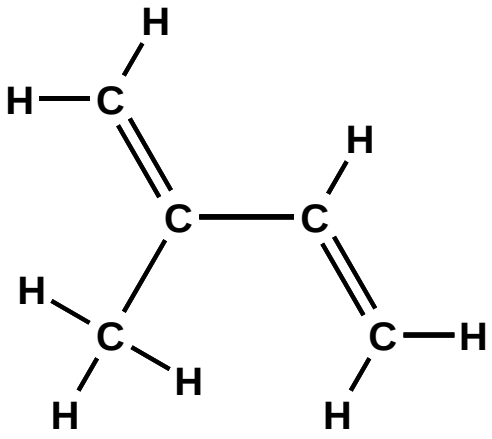
stereoselektive Hydrierung mit chiralem Katalysator

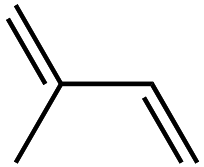


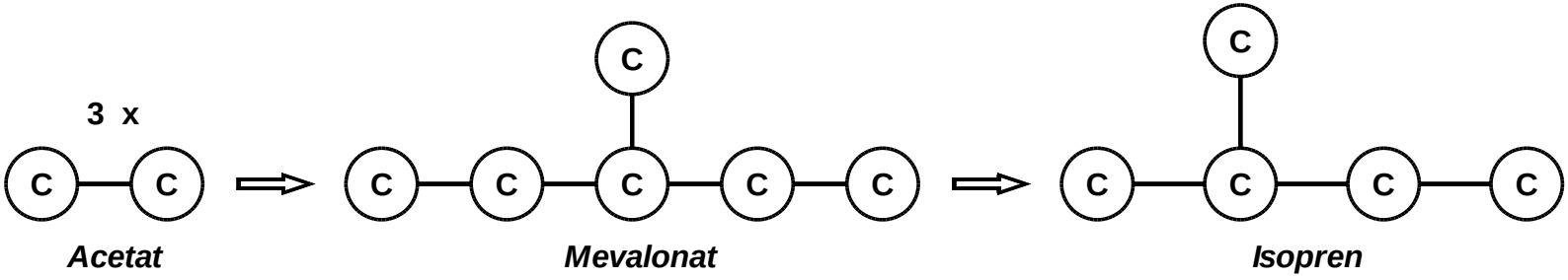
Ryoji Noyori (1938-)
Nobelpreis 2001



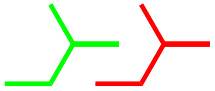
Terpene


H
H
C
H
C
C
H
C
H
H
H
H



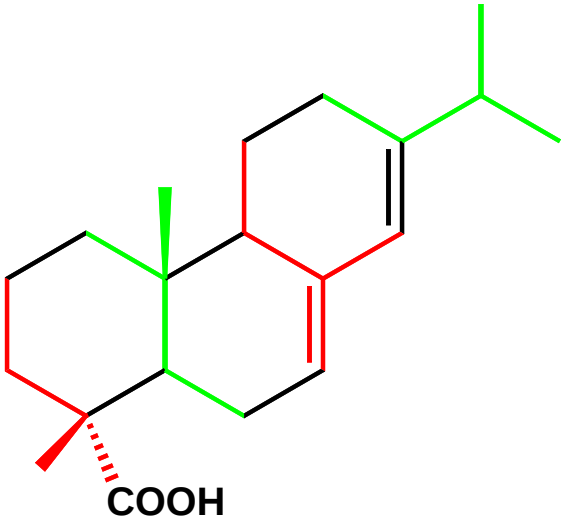

3 x
C
C
Acetat
C
C
C
C
C
C
Mevalonat
C
C
C
C
C
Isopren

Isopren als Baustein in Terpenen

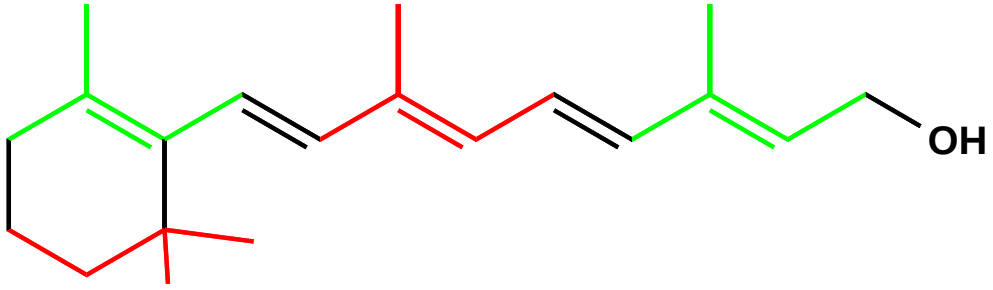


Terpen-bausteine

weitere Bindungen

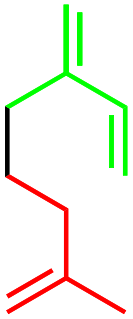


Abietinsäure

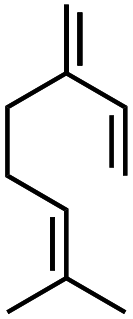


Vitamin A

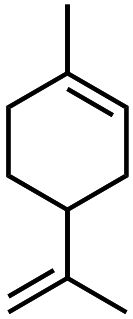
Monoterpene:	**2x Isopren**	**C10**	**Terpentinöl, Etherische Öle**
Sesquiterpene:	**3x Isopren**	**C15**	**Etherische Öle und andere Riechstoffe**
Diterpene:	**4x Isopren**	**C20**	**Harze, Vitamin A, Phytol, Gibberellinsäure**
Sesterpene:	**5x Isopren**	**C25**	**- sehr selten**
Triterpene:	**6x Isopren**	**C30**	**Squalen, Lanosterin, Harze, Sterine**
Tetraterpene:	**8x Isopren**	**C40**	**Carotine, andere Pflanzenfarbstoffe**
Polyprene:	**nx Isopren**	**Cn*5**	**Naturkautschuk, Guttapercha**



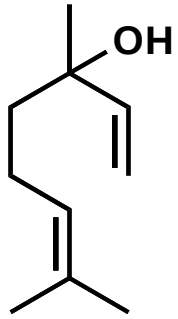
α-Myrcen



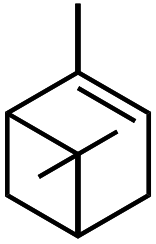
β-Myrcen



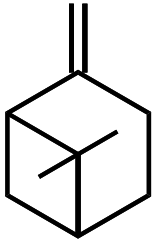
Limonen



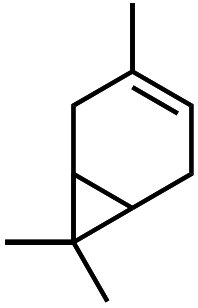
Linalool



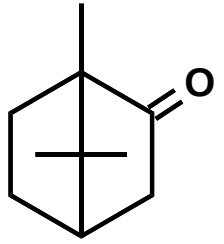
α-Pinen



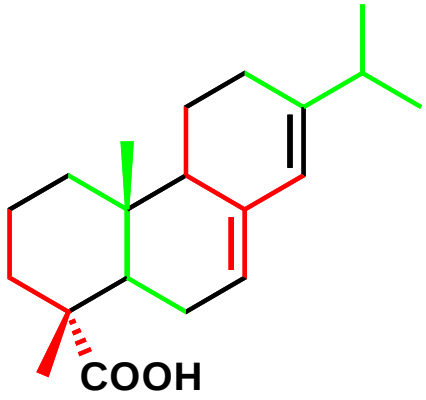
β-Pinen



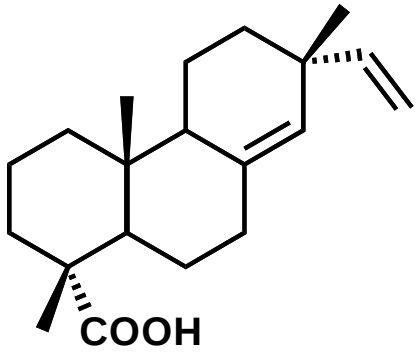
Δ3-Caren



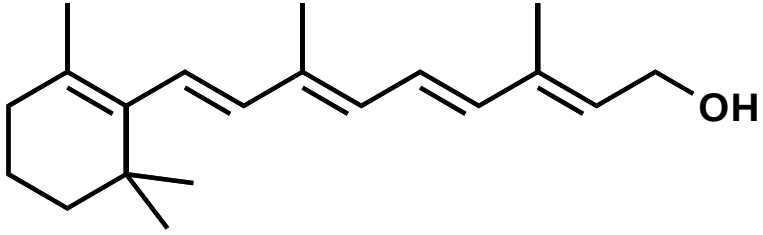
Campher



Abietinsäure



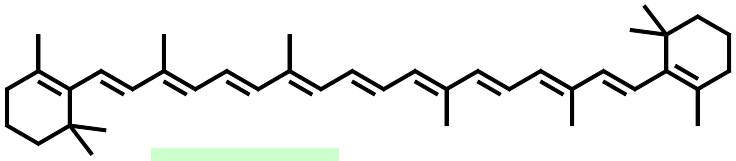
Sandaracopimarsäure



Vitamin A

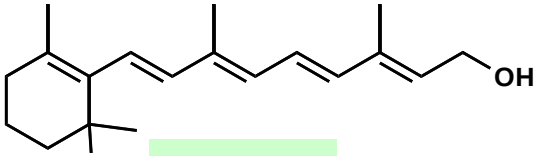
Rhodopsin und der Sehvorgang

β-Carotin (Provitamin A)



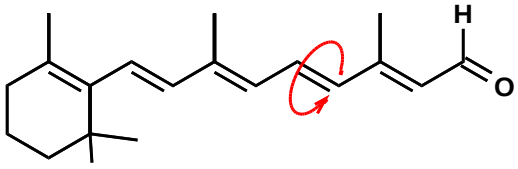
Carotin-dioxy-genase

all-trans-Retinol (Vitamin A)



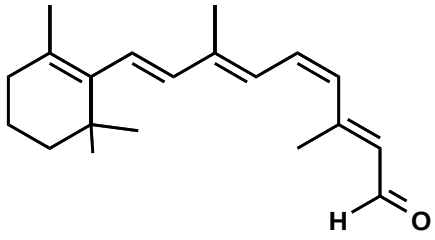
Retinol-dehydro-genase

all-trans-Retinal

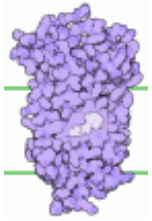


Retinal-isomerase

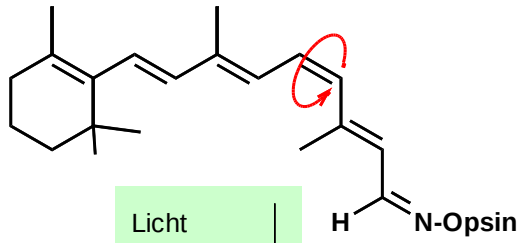
11-cis-Retinal



Opsin

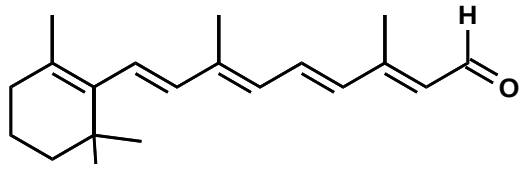


Rhodopsin

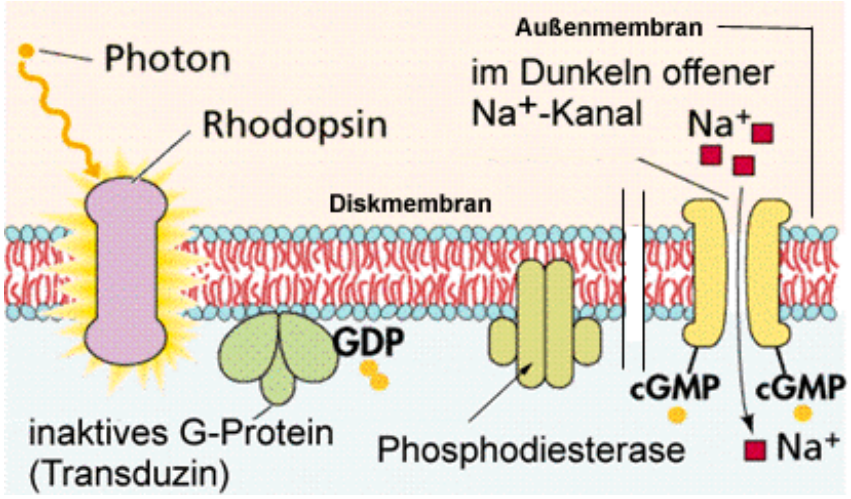


Licht

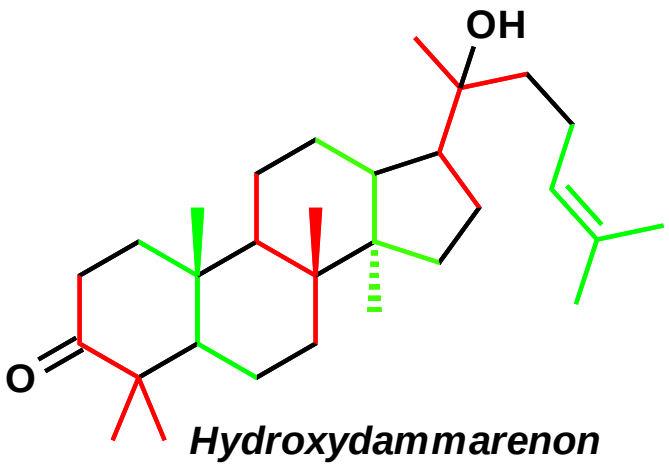
11-cis-Retinal im Rhodopsin gebunden



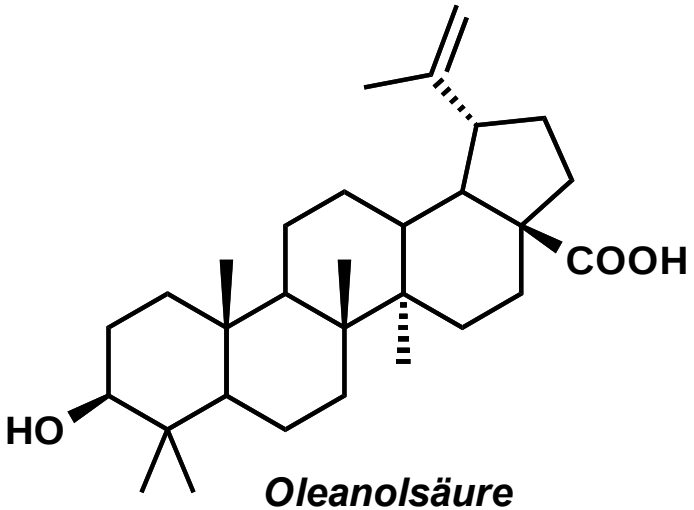
all-trans-Retinal vom Rhodopsin abgespalten



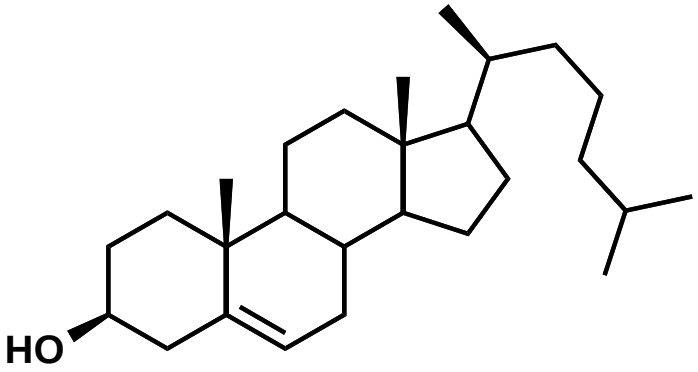
G-Protein gesteuerte Signalkette



Hydroxydammarenon



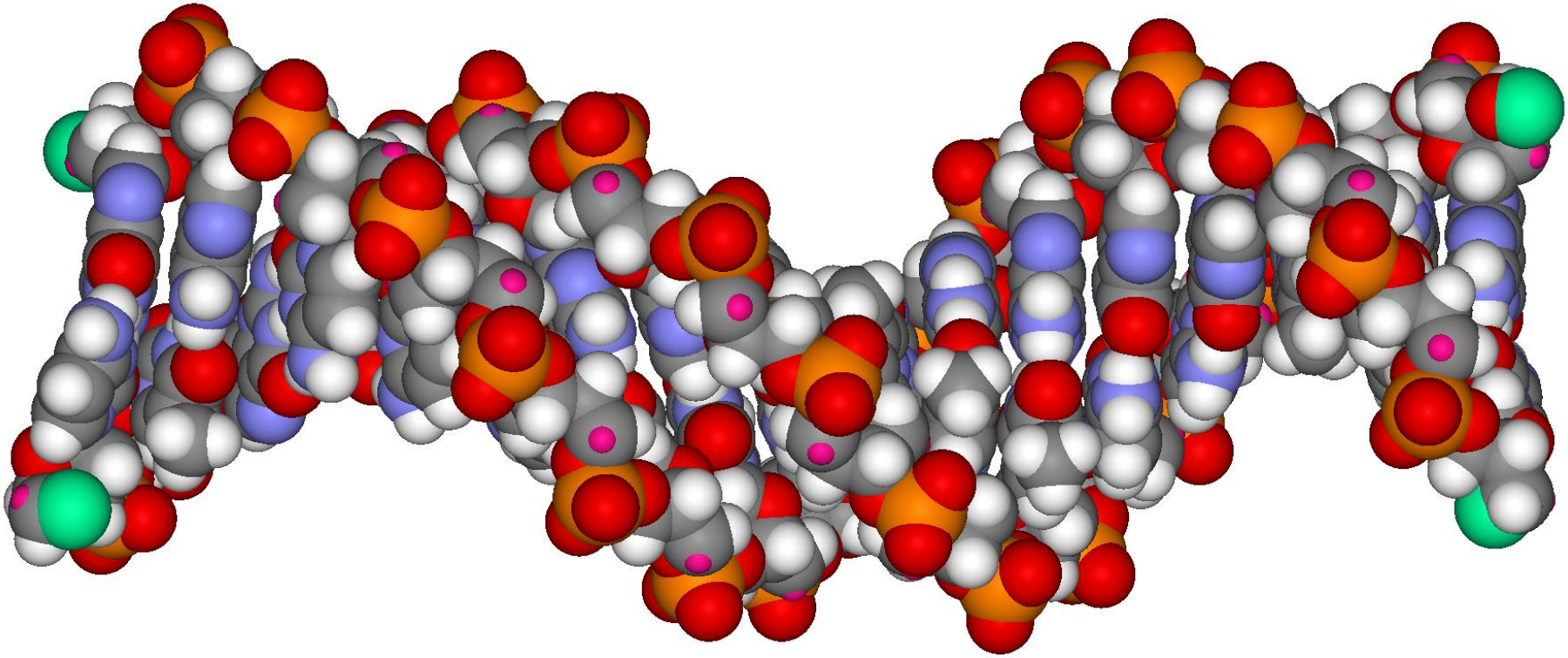
Oleanolsäure



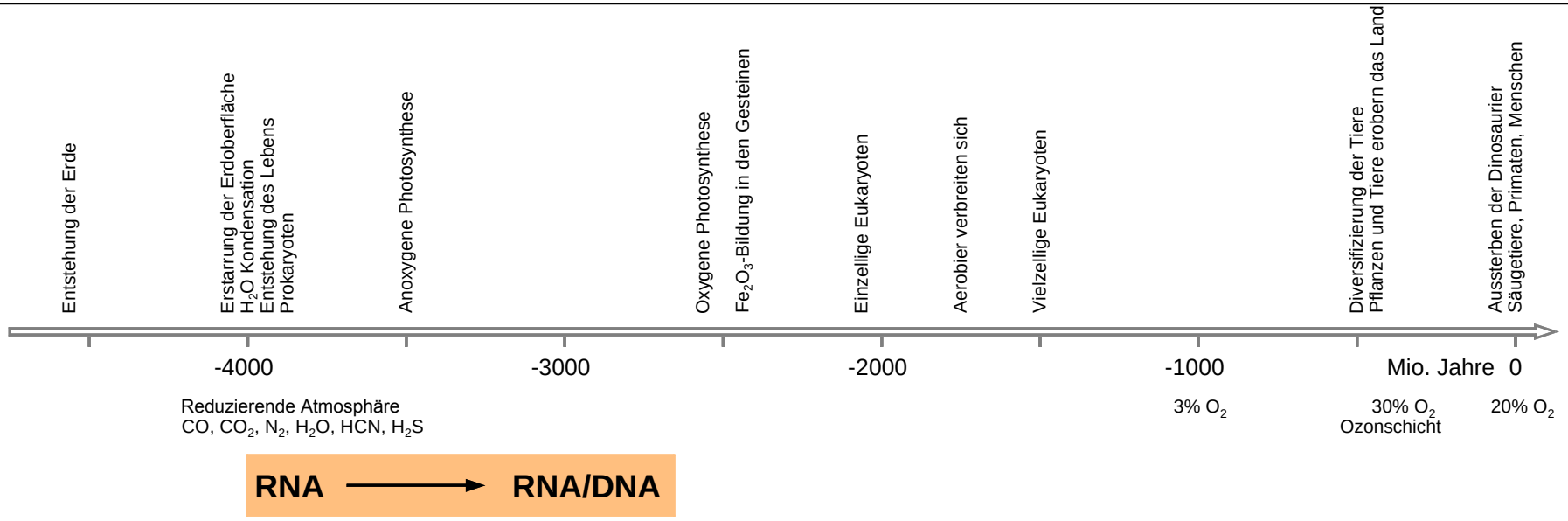
Cholesterol (Cholesterin)

Triterpen - 3 oxidativ abgespaltenen CH_3-Gruppen (C_{27}-Steroid)

DNA und RNA

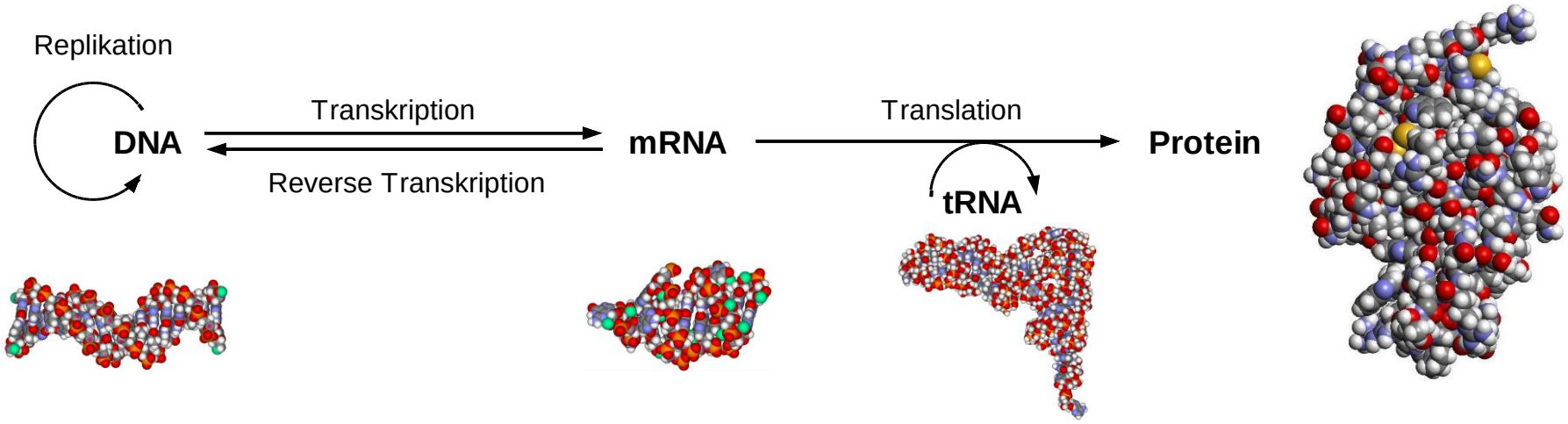


RNA und DNA sind sehr frühe Lebensbausteine

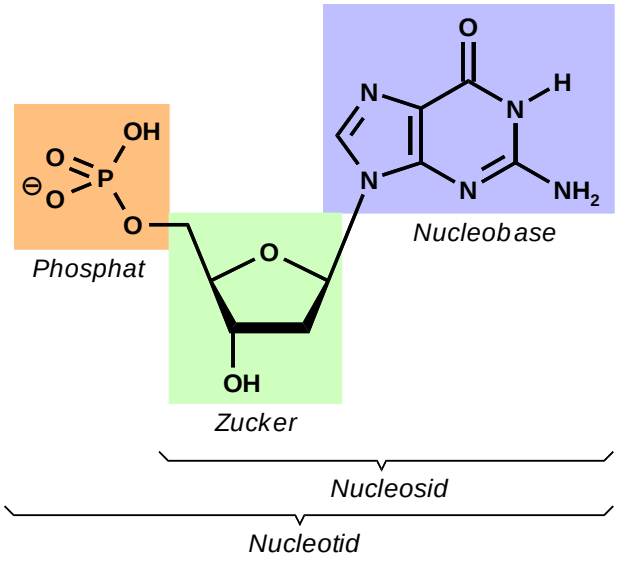


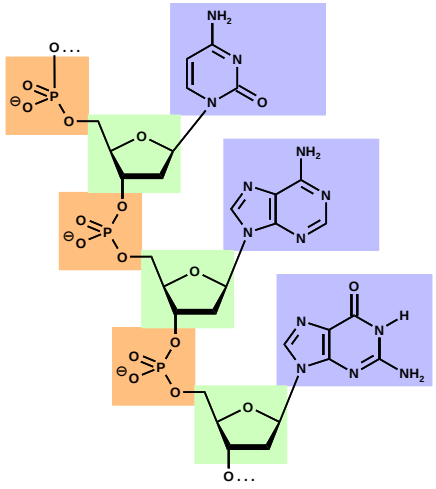
RNA → RNA/DNA

Zentrales molekularbiologisches "Dogma" der Übertragung von Information nach Funktion:
James D. Watson: "DNA makes RNA makes Protein"



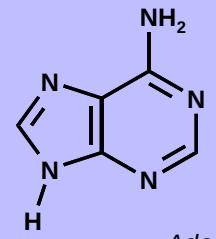
Nucleoside, Nucleotide und Nucleinsäuren



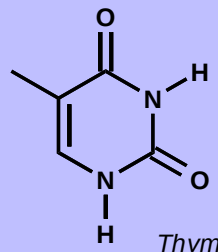


Nucleinsäure

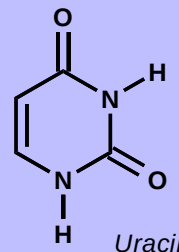
Nucleobasen:



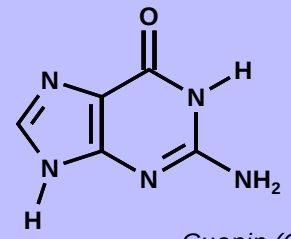
Adenin (A)



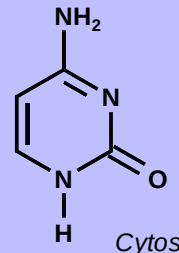
Thymin (T) bei DNA



Uracil (U) bei RNA

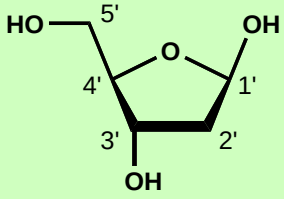


Guanin (G)

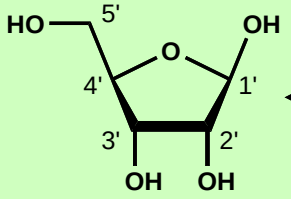


Cytosin (C)

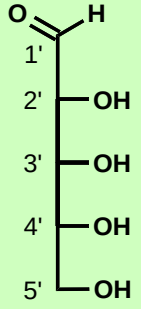
Zucker:



2-Desoxyribose bei DNA

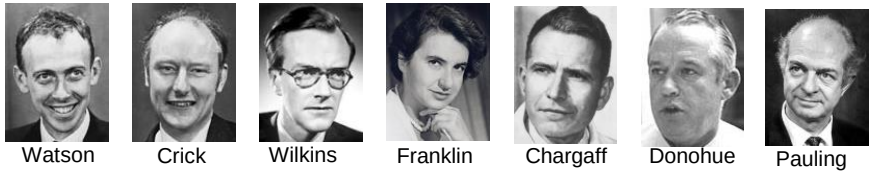


Ribose bei RNA



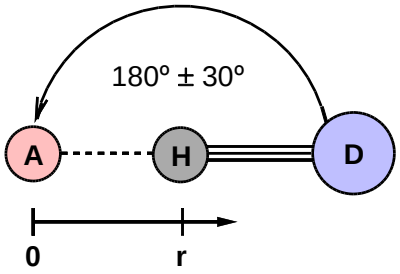
Bezifferung ohne ' würde sich auf die Atome der Nucleobasen beziehen.

Watson-Crick-Paarung in DNA und RNA

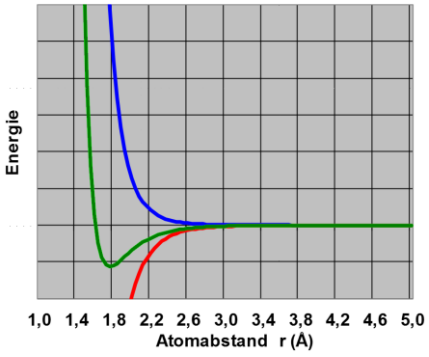


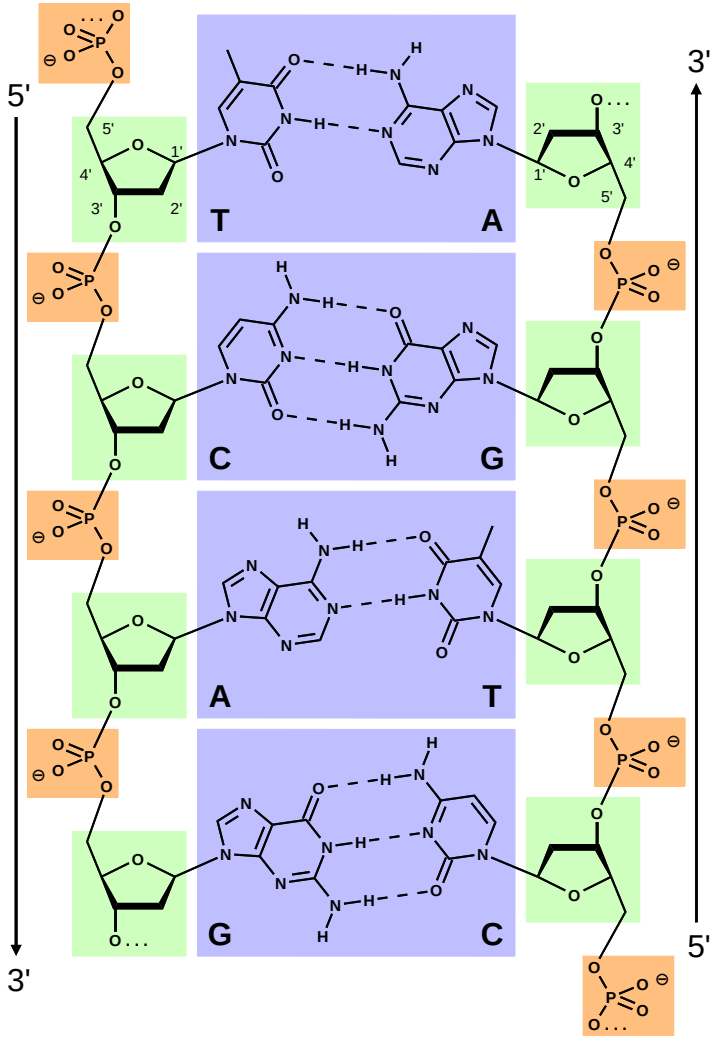
Molecular Structure of Nucleic Acids
A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid,
J.D. Watson, F.H.C. Crick,
Nature, **171**, pp 737-738 (1953).

H-Brücke - - - zwischen
H-Donor und H-Acceptor
für A, D typisch: O, N, S, Hal

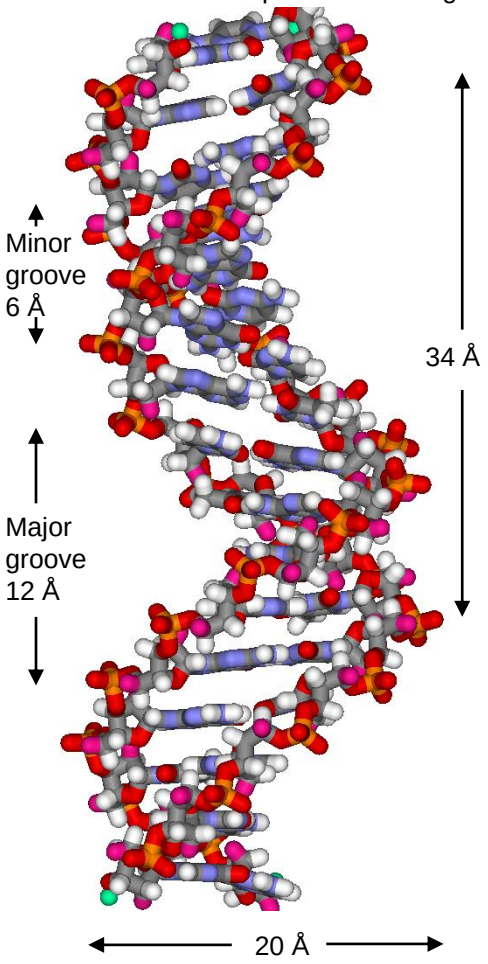


$E_{HB} = \frac{Ab}{r^{12}} - \frac{An}{r^{10}}$ Abstoßung / Anziehung

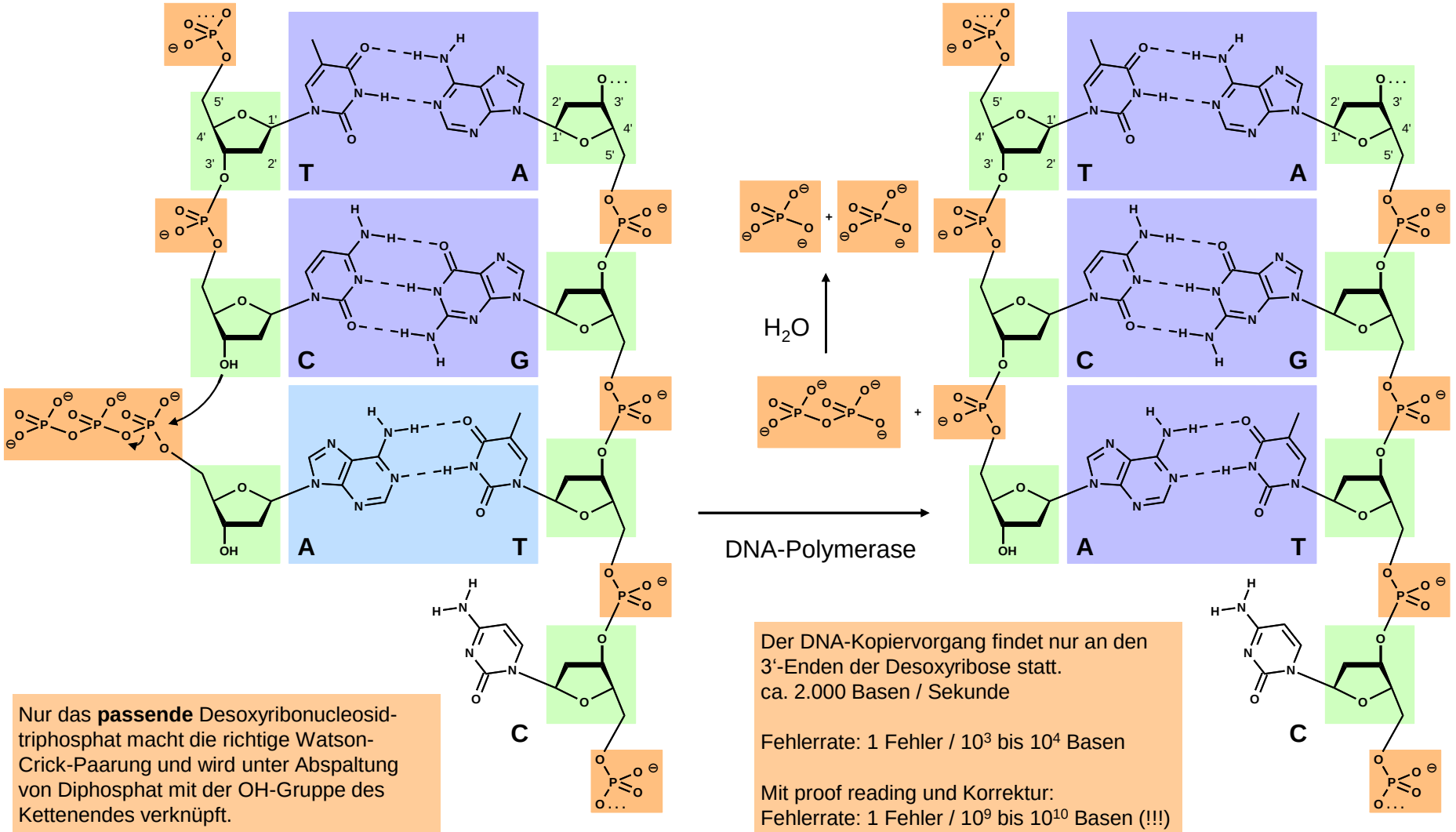




ca. 10 Basenpaare / Windung



Nucleotidverknüpfung



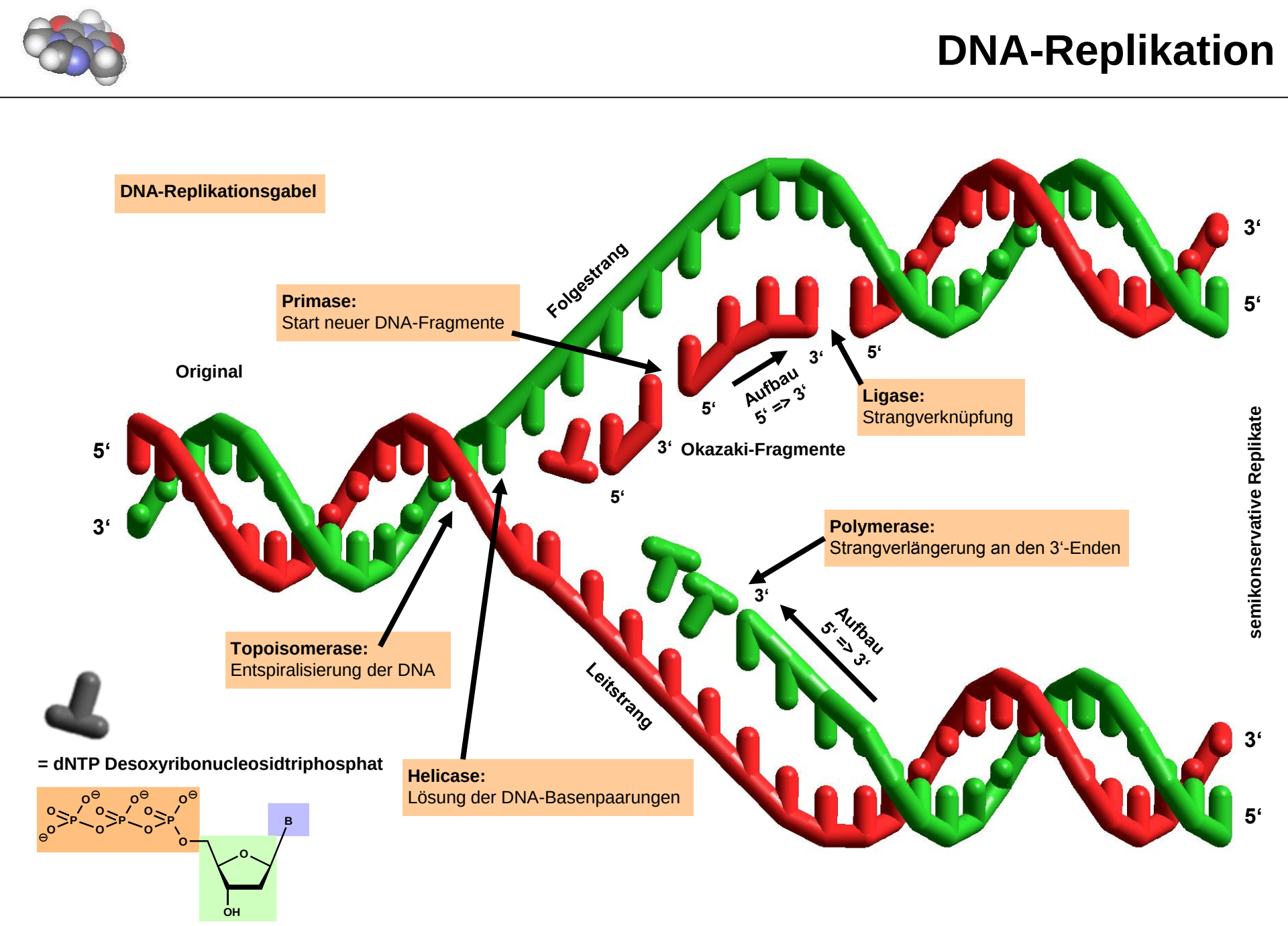
Nur das **passende** Desoxyribonucleosid-triphosphat macht die richtige Watson-Crick-Paarung und wird unter Abspaltung von Diphosphat mit der OH-Gruppe des Kettenendes verknüpft.

Der DNA-Kopiervorgang findet nur an den 3'-Enden der Desoxyribose statt.
ca. 2.000 Basen / Sekunde

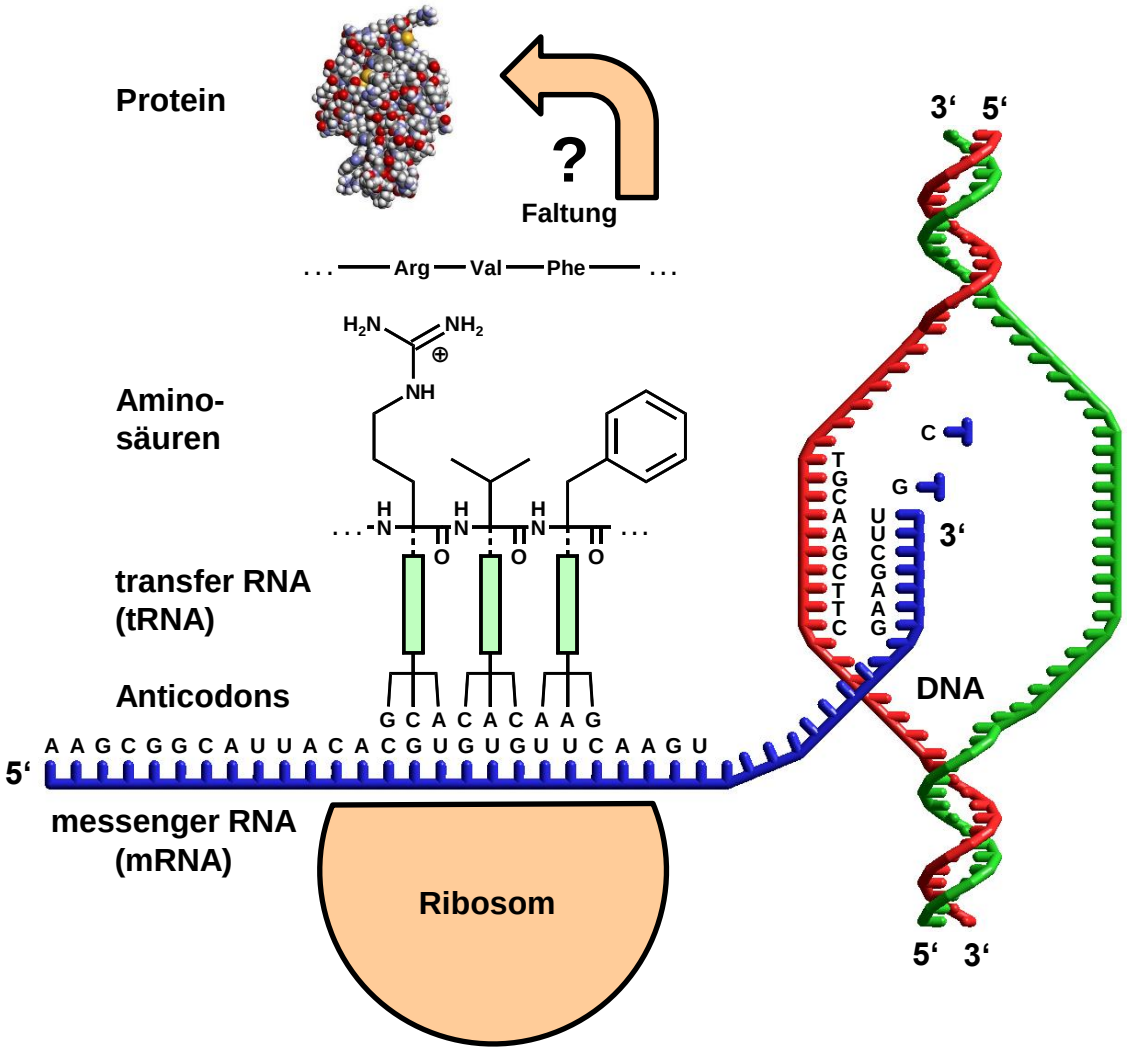
Fehlerrate: 1 Fehler / 10^3 bis 10^4 Basen

Mit proof reading und Korrektur:
Fehlerrate: 1 Fehler / 10^9 bis 10^{10} Basen (!!!)

DNA-Replikation



Proteinsynthese durch Transkription und Translation



Translation: mRNA => tRNA => Protein

Transkription: DNA => mRNA

Genetischer Code:

1. Base	2. Base U		2. Base C		2. Base A		2. Base G	
U	UUU	Phe	UCU	Ser	UAU	Tyr	UGU	Cys
	UUC	Phe	UCC	Ser	UAC	Tyr	UGC	Cys
	UUA	Leu	UCA	Ser	UAA	Stop	UGA	Stop
	UUG	Leu	UCG	Ser	UAG	Stop	UGG	Trp
C	CUU	Leu	CCU	Pro	CAU	His	CGU	Arg
	CUC	Leu	CCC	Pro	CAC	His	CGC	Arg
	CUA	Leu	CCA	Pro	CAA	Gln	CGA	Arg
	CUG	Leu	CCG	Pro	CAG	Gln	CGG	Arg
A	AUU	Ile	ACU	Thr	AAU	Asn	AGU	Ser
	AUC	Ile	ACC	Thr	AAC	Asn	AGC	Ser
	AUA	Ile	ACA	Thr	AAA	Lys	AGA	Arg
	AUG	Met*	ACG	Thr	AAG	Lys	AGG	Arg
G	GUU	Val	GCU	Ala	GAU	Asp	GGU	Gly
	GUC	Val	GCC	Ala	GAC	Asp	GGC	Gly
	GUA	Val	GCA	Ala	GAA	Glu	GGA	Gly
	GUG	Val	GCG	Ala	GAG	Glu	GGG	Gly

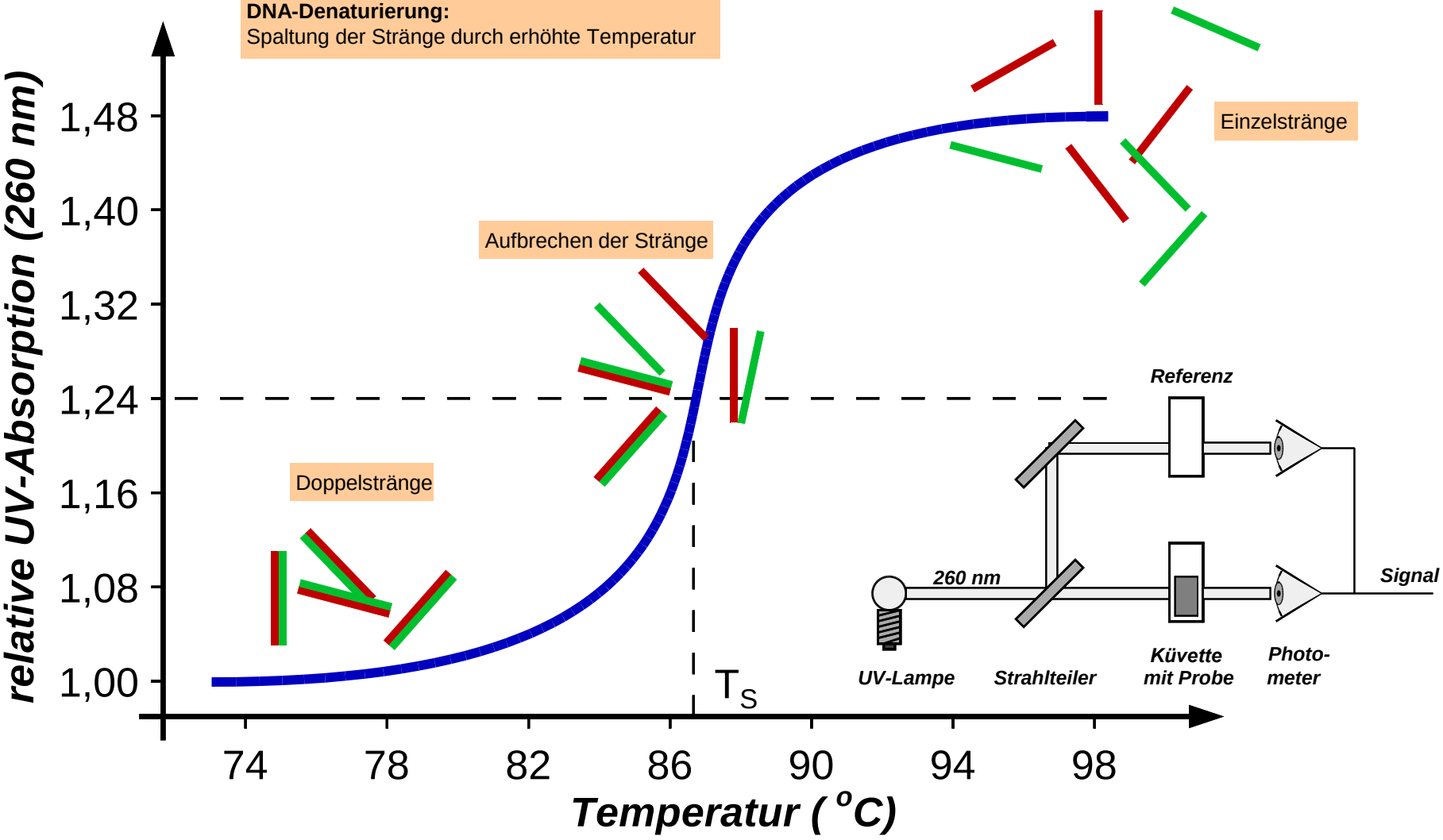
unpolar (hydrophob)
polar, neutral (hydrophil)
basisch, positiv (hydrophil)
sauer, negativ (hydrophil)

* = Start

4 Nucleobasen, mit universellem nicht überlappendem, kommafreiem und degeneriertem Triplett-Code
4^3 = 64 Tripletts (- 3x Stop) = 61 Codons => 20 proteinogene Aminosäuren

Schmelztemperatur von DNA

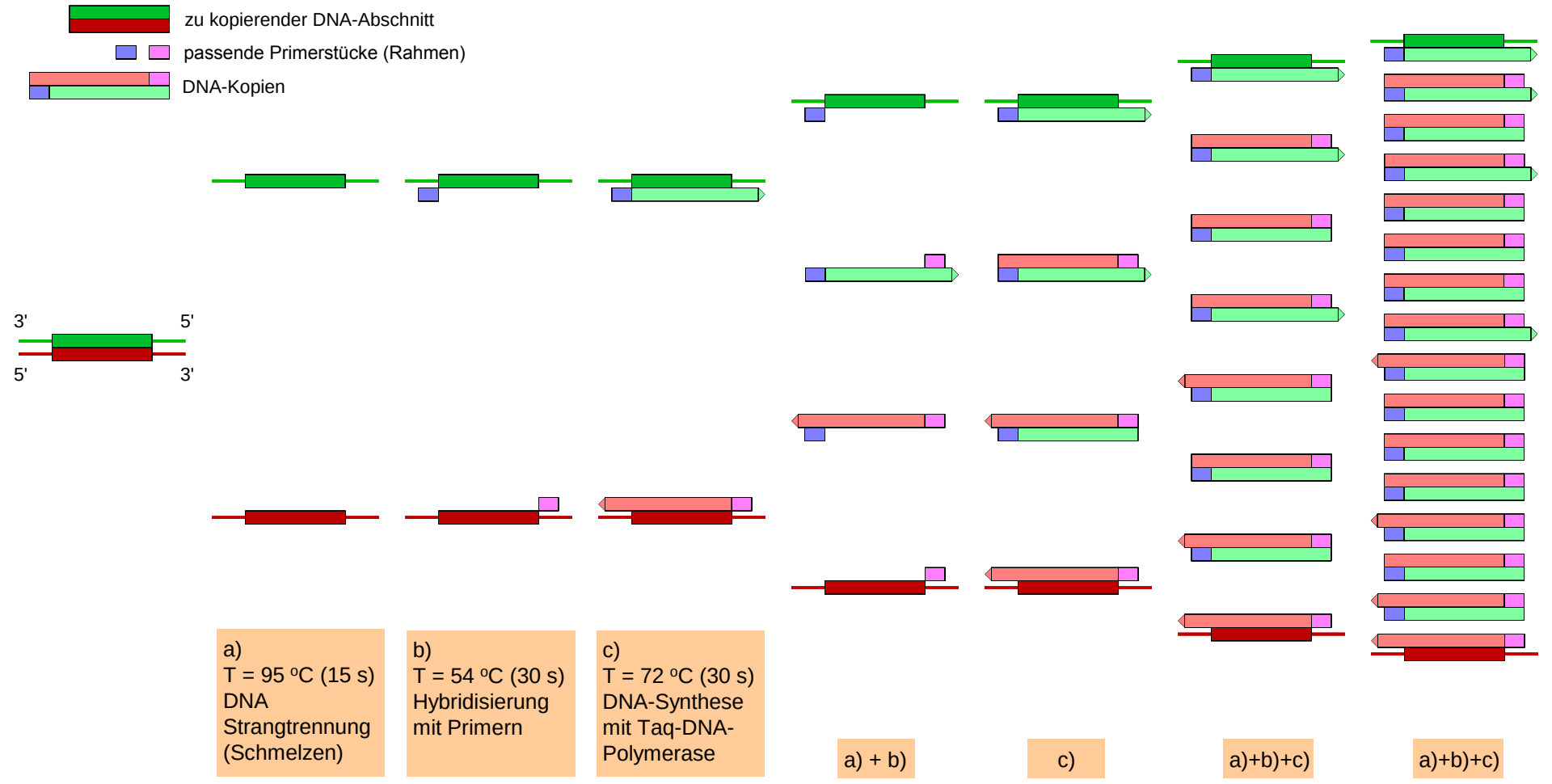
DNA-Denaturierung:
Spaltung der Stränge durch erhöhte Temperatur



Hyperchromizität:
Einzel-DNA-Stränge absorbieren UV-Licht stärker (ca. 40%) als Doppelstränge.

Abhängigkeit vom Anteil der Nucleotide:
mehr AT => T_S sinkt, mehr GC => T_S steigt

Polymerase-Kettenreaktion (PCR)



Start-DNA	1. Zyklus	2. Zyklus		3. Zyklus	4. Zyklus …
DNA-Kopien:. 1	2		4	8	16

Nach ca. 1 Stunde im Thermocycler (ca. 30 Zyklen) sind 2^{Zyklen} = ca. 1 Mrd. DNA-Kopien entstanden (es gibt aber auch die 1-Sekunden PCR)

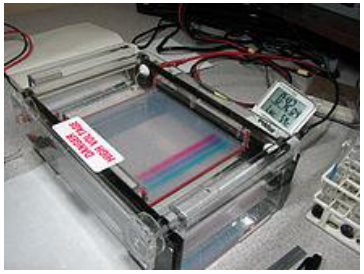
PCR-Anwendungsmöglichkeiten (Beispiele)

Trennung und Darstellung der DNA-Fragmente:

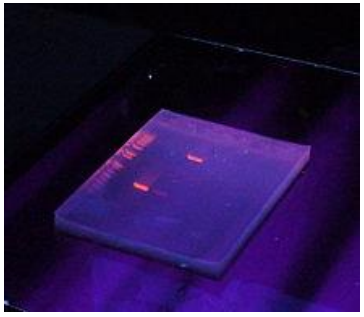
Agarosegel-Elektrophorese zur größenabhängigen Auftrennung in elektrischem Feld. Kleines wandert schneller als großes. Färbung mit Ethidiumbromid zeigt Fluoreszenz bei doppelsträngiger DNA.

real-time PCR
Messungen der Fluoreszenz-Stärke führt zur Konzentrationsbestlmmung für DNA-Fragmente.

digitale PCR
Konzentationsbestimmung in Mikrochips (Reaktionvolumen im femto-Liter Bereich (1 fL = 10^{-15} Liter)
Verteilung einer verdünnten Lösung in Mikroreaktoren führt zur 0/1-Anwesenheit von DNA-Fragmenten



Agarosegel-Elektrophorese



Fluoreszenzfärbung des Gels

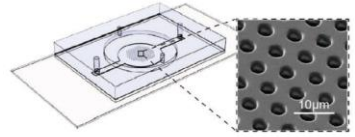
Diagnostik

Erkennung von Krebs, Rezidiven und Infektionen durch Bakterien und Viren schon sehr früh (z.B. HIV, Hepatitis), auch bevor eine Immunantwort ausgelöst worden ist.

Bei der Organtransplantation kann die Erkennung der HLA-Typen von Spender und Empfängern schnell erfolgen zur Bestimmung der Verträglichkeit im MHC.
HLA = humane Leukozytenantigen-System, MHC = Haupthistokompatibilitätskomplex

Forensik

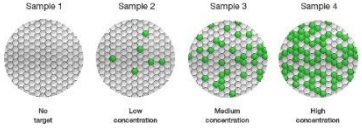
95% des menschlichen Genoms sind sog. Introns (nicht-kodierende Bereiche)
In 2-10 Basenpaaren langen und oft 1000fach wiederholten STR-Bereichen ohne offensichtliche Funktion unterscheiden sich Menschen besonders stark. STR = short tandem repeats
Die Längenbestimmung festgelegter (meist 4zähliger) STRs (z.B. AATGAATGAATGAATGAATGAATG) führt zu einem personenspezifischen Zahlenmuster (genetischer Fingerabdruck).



Digital-PCR-Reaktor

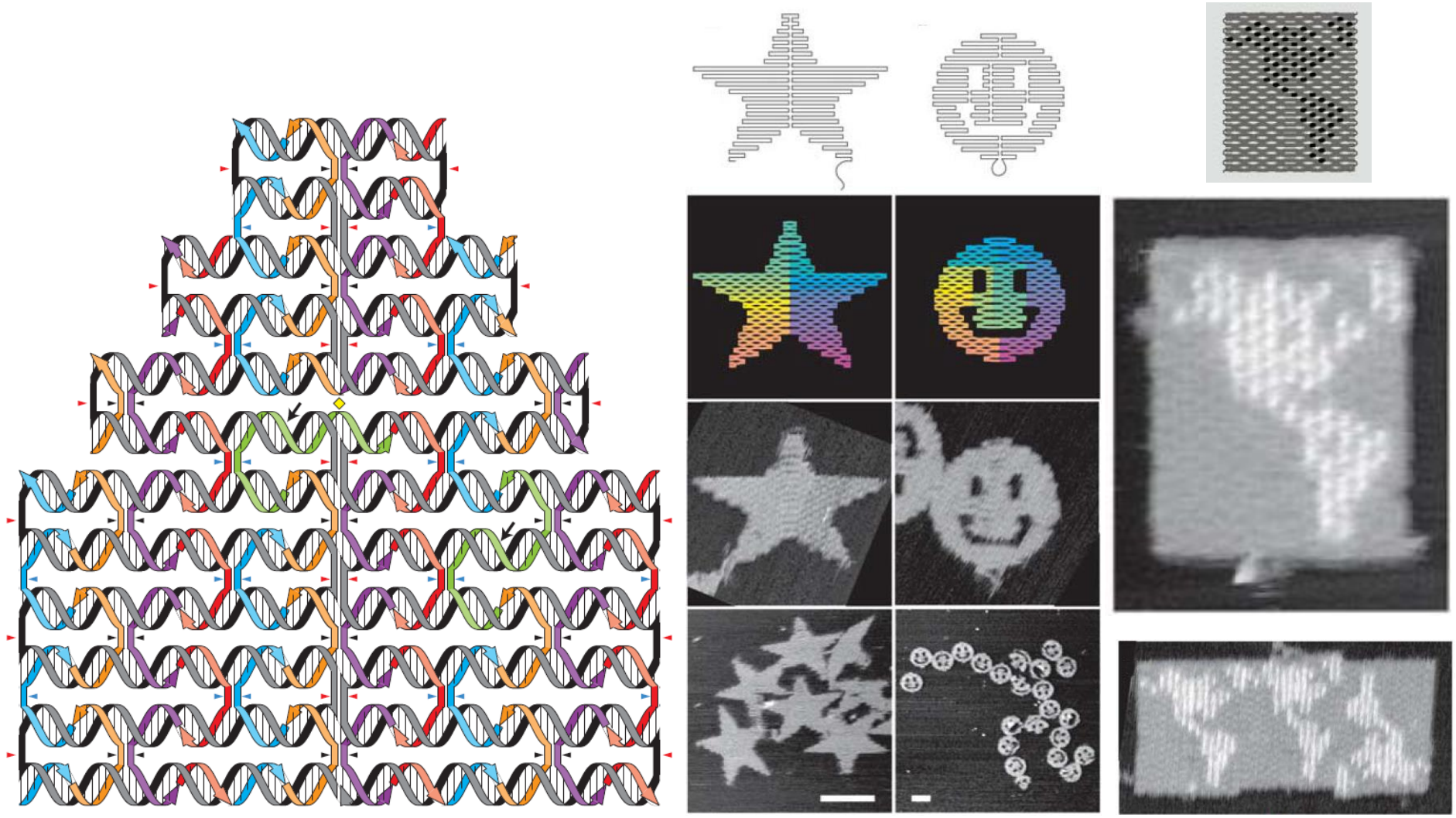
Archäologie

DNA ist sehr stabil (stabiler als RNA) => Sequenzvergleich aus Fundstücken führt zur Identifizierung von fossilen Arten und zur Aufdeckung von Verwandschaftsbeziehungen.

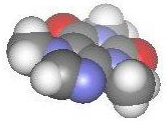


Digital-PCR Ergebnisse

DNA-Origami



Quelle: Folding DNA to create nanoscale shapes and patterns, Paul W.K. Rothemund, *Nature*, **440**, pp 297-302 (2006).



Ende