

Stichwortverzeichnis

A

- Austrittsgruppe 132
- Abstraktion 322
 - Halogenatom 322
 - Wasserstoffatom 322 ff.
- Acetal 324
- Acetaldehyd-Enolat 100
- Aceton 357
- Acridon 375
- Acrolein 71
 - Dimerisierung 273
 - Energie der Grenzorbitale 164, 274
 - Energie der π -Orbitale 72
 - Koeffizienten der Grenzorbitale 164, 274
 - π -Molekülorbitale 72
 - protoniertes 164
- Acrylnitril 357 f.
- Acrylsäuremethylester 306, 360
- Acylierung 146
- Adamantanon 213, 375
- Addition/Eliminierung
 - elektrophile Substitution 195
 - nukleophile Substitution 194
- Addukt
 - anti-Kopf/Kopf 359
 - Kopf/Kopf 361 f.
 - Kopf/Schwanz 359
 - syn-Kopf/Kopf 359
- Akzeptorsubstituent 97
- Aldehyd 357
- Alder-En-Reaktion 217, 306
- Alken 65, 97, 357
 - Ableitung der Koeffizienten 75
 - Angriff an substituierte Alkene 324
 - bicyclisches 207
 - C-substituiertes 288, 325 f., 357 f.
 - Effekt von Substituenten auf die Stabilität 71
 - Energie der Grenzorbitale 260
 - Gesamtenergie 260
 - Grenzorbitale für die Photocycloaddition eines X-substituierten mit einem Z-substituierten Alken 361
 - Insertion eines Carbens 250
 - Koeffizient der Grenzorbitale 260
 - monocyclisches 206
 - offenkettiges 209 ff.
 - photochemische Codimerisierung 360
 - Photodimerisierung 358
 - photooxidative anti-Markownikow-Addition von Methanol 338
 - X-substituiertes 74 f., 288, 325 f., 357 ff.
 - Z-substituiertes 73, 288 ff., 325 f., 357 ff.
- Alkennukleophil 139
- Alkoxid-Ion 165
- Alkylcuprat 205
- Alkylhalogenid
 - Eliminierung 170
 - Substitution 170
- Alkylierung 146
 - C-Alkylierung 146
 - O-Alkylierung 146
- Alkylnitrit 144
- Alkylradikal 329 f.
 - Wechselwirkungen der Grenzorbitale 330
- Allen 247, 364
 - Cycloaddition 297, 364
 - Energie der Grenzorbitale 297
 - Koeffizienten der Grenzorbitale 297
- Allylacetat 205
- Allylanion 26, 75, 100, 126 ff., 147 ff., 227
 - C-substituiertes 148
 - Cycloaddition 224
 - Orbitalenergie 74
 - π -Orbitalkoeffizient eines 1-Z-substituierten Allylanions 151
 - X-substituiertes 147 f.
 - Z-substituiertes 147 ff.

- Allylcäsium 99
 - Allylhalogenid 166
 - Allylkalium 99
 - Allylkation 26, 71, 98, 126 ff., 227
 - Stabilisierung 82
 - Allyllithium 99
 - Allylradikal 26, 80, 98
 - Allylsulfoxid 220
 - Allylsystem 26 ff., 97
 - Energie der π -Molekülorbitale 28
 - π -Molekülorbital 32
 - π -Orbital 27 f.
 - X-Substituent 166
 - Amarin 229
 - Amid 100
 - Amin 165
 - Ammoniak 165
 - Anhydrid
 - unsymmetrisches 166
 - Anion
 - negative Hyperkonjugation 90
 - Anisol 328 ff.
 - Anisotropie
 - diamagnetische 39
 - anomerer Effekt 92 ff.
 - Anregung
 - $n-\pi^*$ 347, 363
 - $\pi-\pi^*$ 347
 - Anthracenid 376
 - anti-anomerer Effekt 95
 - anti-Cram-Produkt 340
 - anti-Kopf/Kopf-Addukt 359
 - anti-Markownikow-Addition
 - photooxidative 338
 - antiaromatisches System 40
 - Arin 167
 - unsymmetrisches 168
 - Aromat
 - Photocycloaddition 365
 - Reaktivität der Seitenketten 351
 - aromatischer Ring
 - Angriff an substituierten aromatischen Ringen 328
 - aromatisches System 38
 - photochemische Di- π -Methan-Umlagerung 369
 - Aromatizität 38
 - Arylhalogenid
 - relative Energie von Übergangszuständen und tetraedrischen Zwischenstufen beim nukleophilen Angriff 159
 - Arylradikal 329
 - Atomorbital
 - 1s 2
 - 2s 11
 - 2p 12
 - 2p_x 12
 - Kohlenstoffatom 11 f.
 - Wasserstoffatom 1
 - Atomorbitalenergie 50
 - Aufbauprinzip 9
 - Azid 289
 - Aziridin 240
 - cis 229
 - trans 229
 - Azoisobutyronitril (AIBN) 332
 - α -Effekt 141
 - α -Niveau 5, 34 ff., 58
 - [12]Annulen 40 ff.
 - [14]Annulen 38
 - [16]Annulen 40 ff.
 - [18]Annulen 38
- B**
- Baeyer–Villiger-Reaktion 232
 - Baldwin–Beckwith-Regeln 326
 - Baldwin-Regeln 190, 326
 - Base
 - Prinzip der harten und weichen Säuren und Basen (HSAB) 115
 - Beckmann-Umlagerung 232
 - Benz-in 167, 305
 - Benzanthracen 300
 - Benzoessäure
 - Birch-Reduktion 342
 - Benzoessäurephenylester
 - Photolyse 374
 - Benzol 328 f., 350
 - Energie der π -Molekülorbitale 40
 - Korrelationsdiagramm für die [2 + 2]-Cycloaddition mit Ethen 367
 - Korrelationsdiagramm für die meta-Cycloaddition mit Ethen 368
 - π -Molekülorbital 39
 - π -Überlappung 96
 - Photocycloaddition 365
 - X-substituiertes 342
 - Benzolderivat 153
 - Grenzorbitalwechselwirkung 329
 - Molekülorbitale von Wheland-Intermediaten aus monosubstituierten Benzolderivaten 153
 - radikalischer Angriff 328
 - Benzonorborene 370
 - Benzophenon 357

- Benzoylradikal 376
- Benzylacetat 353
- Bicyclo[3.2.0]heptadien 373
- Bicyclo[3.2.0]hepten 232
- Bicyclo[2.2.1]heptylkation 84
- Bicyclo[3.1.0]hexenylkation 232
- Bicyclo[2.2.2]octadien 208
- Bifluorenyliden 96
- Bindung
 - ionische 116
 - ionischer Charakter 54
 - kovalente 116
 - polarisierte 54
- Bindungsbildung
 - antarafacial 238
 - konzertierter Verlauf 221
 - suprafacial 238
- Bindungsbruch
 - konzertierter Verlauf 221
- Bindungslänge 25
- Birch-Reduktion 341 f.
 - Benzoesäure 342
- Bis(methoxycarbonyl)carben 174
- Bishomocyclopentadienylanion 44
- Brombenzol 343
- Bürgi–Dunitz-Trajektorie 185 f.
- Bürgi–Dunitz-Winkel 185 ff.
- Butadien 32, 101, 227
 - Energie der π -Molekülorbitale 34 f.
 - π -Molekülorbital 33 ff.
 - s-cis 102
 - s-trans 62, 102
- Buta-1,2-dien
 - Dimerisierung 298
- Butyrolacton 322
- β -Wert 5
- C**
 - C—C-Bindung 11, 47
 - C=C-Bindung, siehe auch Doppelbindung 63
 - elektrophiler Angriff 187 ff.
 - nukleophiler Angriff 198
 - Salem–Klopman-Gleichung 187
 - C—C-Hyperkonjugation 82
 - C=C- π -Bindung 22 ff., 87
 - C—C- σ -Bindung 21
 - C—Cl-Bindung 53
 - C—Cl- σ -Bindung 52
 - C—F-Bindung 53
 - C—H-Bindung 11, 47
 - C—H-Hyperkonjugation 82
 - C—H \cdots π -Bindung 108
 - C—H \cdots X-Bindung 108
 - C—Halogen-Bindung 159
 - C—M-Bindung 78
 - heteronukleare 50
 - C—M-Hyperkonjugation 87
 - C—M- σ -Bindung 55
 - C—O-Bindung
 - exocyclische 92
 - C=O-Bindung 50
 - C=O- π -Bindung 57 f.
 - C-Substituent 71 ff., 141, 158 f., 261 ff.
 - Definition 70
 - Eigenschaft 70
 - C—X-Bindung 50, 89, 132
 - C=X- π -Bindung 59
 - C—X- σ -Bindung 52
 - captodative Stabilisierung 79
 - Carbanion 90
 - Effekt von Substituenten auf die Stabilität 77
 - Stabilisierung 91
 - Carben 172, 247
 - aromatisches 175
 - cyclisches 175
 - Cycloaddition 299
 - elektrophiles 174
 - Grenzorbitalwechselwirkungen bei Reaktion mit Elektrophilen und
 - Carbokation
 - Effekt von Substituenten auf die Stabilität 76
 - π -Orbital 77
 - Verbrückung 84
 - Carbonsäureamid 165
 - Carbonylgruppe 76 ff.
 - relative Energie von Ausgangsverbindungen und Übergangszuständen beim nukleophilen Angriff 157
 - Carbonylverbindung
 - α,β -ungesättigte 164, 320
 - Cycloaddition von Ketenen 296
 - Charge-Transfer-Komplex 368
 - cheletrope Reaktion 218, 355
 - Chemilumineszenz 375 f.
 - chemische Reaktion 115 ff.
 - chemische Reaktivität 129
 - störungstheoretische Behandlung 122 ff.
 - chemisches Potential
 - elektronisches 117
 - Chemoselektivität 332
 - Radikal 332
 - synthetische Anwendung 332
 - Claisen-Umlagerung 219, 233, 301
 - closed-shell-Abstoßung erster Ordnung 124

- Codimerisierung 363
- Cope-Umlagerung 221, 233, 301 ff.
 - π -Energie 302
- Cornforth-Modell 199
- Coulomb-Abstoßung 81, 125
- Coulomb-Anziehung 125
- Coulomb-Effekt 77
- Coulomb-Integral 4
- Coulomb-Kraft 110
- Cram-Chelatkontrolle 200
- Crotonsäuremethylester 363
- Cyanid-Ion 143
- Cyanidanion 142
- Cycloaddition 174, 217 ff., 307
 - Allen 297 f.
 - antarafacialer Angriff 226
 - Carben 299
 - 1,3-dipolare, siehe 1,3-dipolare Cycloaddition
 - intramolekulare 364
 - Keten 294
 - meta 367 f.
 - ortho 367
 - [$\pi^2_s + \pi^2_a$] 248
 - [$\pi^2_s + (\pi^2_a + \pi^2_a)$] 249
 - [$\pi^2_s + \pi^2_a + \pi^2_a$] 237
 - [$\pi^2_s + \pi^2_s$] 256 ff., 366 f.
 - [$\pi^2_s + (\pi^2_s + \pi^2_s)$] 249
 - [$\pi^2_s + \pi^2_s + \pi^2_s$] 237
 - [$\pi^4_s + \pi^2_s$] 236
 - photochemische 357
 - suprafaciale 355
 - suprafacialer Angriff 226
 - Woodward–Hoffmann-Regel 235
- Cycloalken 206
 - nukleophiler und elektrophiler Angriff 205
- Cyclobutadien 40
 - π -Molekülorbitale 41 ff.
- Cyclobutan 46 ff., 247, 358
- Cyclobutanon 247
- Cyclobuten 227
 - π -Energie für eine konrotatorische Ringöffnung 305
 - Ringöffnung 305
- Cyclodecylation 107
- Cyclodimerisierung
 - Cyclopentadiencarbonsäuremethylester 281
- Cycloheptadienylanion 227
- Cycloheptadienylkation 227
- Cycloheptatrien 45, 371 f.
 - Regioselektivität beim electrocyclischen Ringschluss 371
- Cycloheptatrienyliden 175
- Cycloheptatrienylkation 38
- Cyclohexadien 227
- Cyclohexadienylanion
 - π -System 159
- Cyclohexadienylsystem
 - Elektronenverteilung 149
- Cyclohexan 335
- Cyclohexanon 340
 - nukleophiler Angriff 200
- Cyclohexenon 165, 363
- Cyclohexylester 105
- Cyclohexylradikal 335
- Cyclooctatetraen 40 ff.
- Cyclooctatrien 227
- Cycloocten 247
- Cyclopentadien 308
 - [6 + 4]-Reaktion von Tropon 306
 - Übergangszustand für die Dimerisierung 277
- Cyclopentadiencarbonsäuremethylester 281
 - Cyclodimerisierung 281
- Cyclopentadienylanion 38 ff.
- Cyclopentadienyliden 175
- Cyclopentadienylkation 40 ff.
- Cyclopentanon 213
- Cyclopentenon 360 f.
- Cyclopentenylanion 227
- Cyclopentenylkation 227
- Cyclopropan 46
 - Walsh-Orbitale 48
- Cyclopropancarbaldehyd 84
- Cyclopropenyliden 175
- Cyclopropenylkation 38
- Cyclopropylanion 227
- Cyclopropylhalogenid 312
 - Ringöffnung 312
- Cyclopropylkation 227, 313
- Cyclopropylmethylkation 83
- Cycloreversion 218
- cis-2,3-Dichlor-1,4-dioxan 94
- α -Carbonylalkylradikal 320
- α -Carbonylmethylradikal 337
- [3,3]-Claisen-Umlagerung 309
- 9-Cyanophenanthren 363
- 4-Cyanopyridiniumkation 329 f.
- [2 + 2]-Cycloaddition 223, 244 ff., 257, 308, 354 ff.
 - Korrelationsdiagramm für Benzol mit Ethen 367
 - [3 + 2]-Cycloaddition 224
 - [4 + 2]-Cycloaddition 223 ff., 245 ff., 307 f.
 - [4 + 3]-Cycloaddition 223
 - [4 + 4]-Cycloaddition 355

[6 + 4]-Cycloaddition 294
1,4-Cyclohexadien 65
1,2-Cyclohexandion 81

D

Dehydrobenzol 170, 305
Dehydropyridine 169
Delokalisation 5
Di- π -Methan-Umlagerung in aromatischen Systemen
– photochemische 369
Diagramm
– Woodward–Hoffmann-Regel 243
Diaminoethen 104
Diastereoselektivität 196
Diazomethan 298
– Grenzorbitale 287
Dibenzoylperoxid 376
Diboran 85, 107
Dien 101 f.
– cyclisches 308
– Energie der Grenzorbitale 260
– Koeffizient der Grenzorbitale 260
– 1-substituiertes 263
– 2-substituiertes 263
– 2-Z-substituiertes 282
– C-substituiertes 271
– X-substituiertes 270
Dienolat 150
Dienophil
– vinyloges Z-substituiertes 282
– X-substituiertes 270
– Z-substituiertes 271
Diels–Alder-Reaktion 217 ff., 236, 264
– Einfluss von Lewis-Säuren 278
– endo-Regel 276 f.
– Grenzorbitalwechselwirkung 266
– Korrelationsdiagramm der Elektronenkonfiguration 258
– Orbitalkorrelationsdiagramm 255
– photochemische 354
– Positionselektivität 280
– Reaktionsgeschwindigkeit 264
– Regioselektivität 266
– Stereochemie 275
Dimerisierung
– Acrolein 273
– Buta-1,2-dien 298
– Übergangszustand von Cyclopentadien 277
Dimethoxycarben 174
Dimethylallen 247
Dioxetan 375
Diphenylketen 309

Diphenylphosphinogruppe 78
Dipol–Dipol-Wechselwirkung 111
Dipolarophil 282 ff.
– elektronegatives Heteroatom 292
– Grenzorbitale 290 ff.
– HOMO-Energie 284
Donorsubstituent 97
Doppelbindung, siehe auch C=C-Bindung
– diastereoselektiver nukleophiler und elektrophiler Angriff ohne Einfluss sterischer Effekte 213
– diastereotope 196
– konjugierte 41, 63
– nukleophiler Angriff 198
– Photocycloaddition mit kumulierten Doppelbindungen 364
– Substitution 193
Doppelpfeil 104
1,2-Dehydrobenzol 167
 α -Diketon 81
6,6-Dimethylfulven 299
– Grenzorbitale 309
1,3-Dipol 283 ff.
– Energie 285
– Koeffizient 285
1,3-dipolare Cycloaddition 225, 282 ff.
– Reaktionsgeschwindigkeit 282
– Regioselektivität 286
– Stereoselektivität 293

E

E-Butadienylketon 311
E-2-Buten 140
E1cb-Mechanismus
E2-Reaktion 183
E2'-Mechanismus 184
edge-to-face-Anordnung 112
elektrocyclische Reaktion 217 f., 227 ff., 305 ff., 356
– Regioselektivität beim Ringschluss von Cycloheptatrien 371
– Woodward–Hoffmann-Regel 238
Elektron im Kasten 25
Elektronegativität 50
– absolute 116
Elektronen
– korrelierte 111
Elektronenaffinität 116
Elektronenbedarf 266
– normaler 266
– inverser 266
Elektronenkonfiguration
– Diels–Alder-Reaktion 258

- Korrelationsdiagramm 258
 - Elektronenkorrelation 6
 - Elektronenpopulation 64
 - Elektronenspinresonanzspektroskopie (ESR-Spektroskopie) 66
 - Elektronentransfer (ET) 132 ff.
 - ionische Reaktion 131
 - Radikalanion 377
 - Radikalkation 377
 - Elektronentransferreduktion 340
 - Elektronenverteilung 3
 - elektronisches chemisches Potential 117
 - Elektrophil 126
 - aliphatisches 164
 - ambidentes 161
 - anorganisches 137
 - aromatisches 162
 - Grenzorbitalwechselwirkungen bei Reaktion mit Carbenen 174
 - hartes 128, 137 ff., 160
 - LUMO-Energie 137
 - nichtverbrückendes 187
 - tetraedrisches 159
 - trigonales 157
 - weiches 128, 137 ff., 160
 - verbrückendes 189
 - elektrophile aromatische Substitution 151, 351
 - π -Molekülorbitale der Intermediate 154
 - elektrophile Substitution 156, 181
 - Addition/Eliminierung 194
 - Pyridin-N-oxid 156
 - elektrophiler Angriff
 - an diastereotoper Seite offenkettiger Alkene 209
 - C=C-Bindung 187
 - Cycloalken 205
 - diastereoselektiver elektrophiler Angriff an Doppelbindungen
 - Elektrophilie 157 f.
 - Eliminierung 183 f.
 - Alkylhalogenid 170
 - anti 183
 - β 184
 - Gasphase 183
 - syn 183
 - En-Reaktion 220, 242
 - Endiolat 81
 - endo-Kopf/Kopf-Produkt 359
 - endo-Regel
 - Diels–Alder-Reaktion 276
 - Energie
 - absolute 63
 - Energieabsenkung 55, 83
 - Energieabstand
 - HOMO und LUMO 44
 - Energieänderung 121
 - Energieanstieg 121
 - Energiegewinn 30
 - Energiewert 24
 - Enolat 145 f.
 - Enolradikal 337
 - Enophil 306
 - Entropie 129
 - Epoxidierung 300
 - Ester 100
 - α,β -ungesättigter 165
 - Ethan 21
 - π -Bindung 21
 - Ethen 21
 - antibindendes Orbital 24
 - bindendes Orbital 24
 - C=C- π -Bindung 22
 - Energie der π -Molekülorbitale 28 ff.
 - Korrelationsdiagramm für die [2 + 2]-Cycloaddition mit Benzol 367
 - Korrelationsdiagramm für die meta-Cycloaddition mit Benzol 368
 - π -Orbital 25 ff.
 - π^* -Orbital 28
 - π - und π^* -Wellenfunktion 25
 - Ethoxycarbonylcycloheptatrien 371
 - Ethylkation 83
 - Ethylvinylether 361
 - exo-Kopf/Kopf-Produkt 359
 - exo-Ringschluss 334
 - 10-Elektronen-Benzidiniumlagerung 234
 - 2-Elektronen-3-Zentren-Bindung 84 f.
 - π -Molekülorbitale der Intermediate in elektrophilen aromatischen Substitutionen an der ortho-, para- und meta-Position des Benzylanions 154
 - π -Molekülorbitale des Allylsystems 28
 - π -Molekülorbitale kurzer konjugierter Systeme 37
 - π -Molekülorbitale von Butadien 34
 - π -Molekülorbitale von Ethen 28 ff.
 - relative Energie von Ausgangsverbindungen und Übergangszuständen beim nukleophilen Angriff an Carbonylgruppen 157
- F**
- Favorskii-Umlagerung 313
 - Felkin–Ahn-Modell 198, 335
 - Flippin–Lodge-Winkel 186 f.
 - Fluoradamantansystem 214

- Fluormethanol 93
Formaldehyd
– Gitternetzdarstellung der π - und π^* -Orbitale 59
Furan 155
- G**
Gesamtelektronenpopulation 64
Gesamtenergie
– Alken 260
Geschwindigkeit 128
Geschwindigkeits–Gleichgewichts-Beziehung (rate–equilibrium relationship) 120
Geschwindigkeitskonstante 136
– radikalischer Angriff an Benzolderivate 328
Gleichgewichtslage
– Einfluss 115
Glykosid 92
Glyoxal 81
Grenzelektronenpopulation 152 f.
Grenzorital 31, 123 ff., 252, 266 ff.
– Acrolein 274
– Alken 260, 361
– Allen 297
– Diazomethan 287
– Dien 260
– 6,6-Dimethylfulven 309
– Dipolarophil 290 ff.
– Elektronenverteilung 154
– Energie 164, 260, 274
– Keten 295
– Koeffizient 164, 260, 274
– Nitron 293
– Photocycloaddition 354 ff.
– unsubstituiertes aromatisches Molekül 151
Grenzoritalwechselwirkung
– Alkylradikal mit Pyridiniumkation 330
– Angriff eines Arylradikals an Benzolderivate 329
– Diels-Alder-Reaktion 266
– elektrophiles Radikal 321
– nukleophiles Radikal 321
– photochemisch angeregtes Molekül und Molekül im Grundzustand 348
– Reaktion von Carbenen mit Elektrophilen und Nukleophilen 174
Grundzustand 348 f.
– Grenzoritalwechselwirkung mit Molekül im angeregten Zustand 348
Gruppentheorie 62
Gruppenübertragungsreaktion 218 ff., 234 ff.
- H**
 H_2 -Molekül, siehe Wasserstoffmolekül
 H_3 -Molekül 8
 H_4 -„Molekül“ 10 ff.
– Symmetrie der Molekülorbitale 14
Halogenatom
– Abstraktion 322
Halogennitrobenzol
– ortho- 163
– para- 163
Halogenquelle
– Einfluss der Struktur 323
Hammond-Postulat 122
Härte
– absolute 116 ff.
– anorganisches Nukleophil und Elektrophil 137
Heptafulvalen 226
Heptatrienylanion 227
Heptatrienylkation 227
Hetero-Diels–Alder-Reaktion 245
– Regioselektivität 273
heteroaromatisches System 60
Heteroatomnukleophil 135
Hexatrien 227
HOMO (highest occupied molecular orbital) 31 ff., 62 ff., 73 ff., 122 ff., 252 f., 265, 319
– Koeffizient 148 ff.
– Methylithium in der Gasphase 57
– Nukleophil 137
HOMO–1 349
HOMO–2 349
HOMO-Energie 63 f., 137, 261, 282
– Dipolarophil 284
HOMO/HOMO-Wechselwirkung 123
HOMO/‘HOMO’-Wechselwirkung 349 ff., 361 ff.
HOMO_(Carben)/LUMO_(Alken)-Wechselwirkung 174
HOMO_(Dipol)/LUMO_(Dipolarophil)-Wechselwirkung 284
HOMO/LUMO-Wechselwirkung 123, 144, 349
Homoaromatizität 44
Homobenzol 45
Homocycloheptatrienylkation 44
Homocyclopropenylkation 44
Houk-Regeln 209
HSAB (Prinzip der harten und weichen Säuren und Basen) 115
Hückel-Koeffizient
– SOMO 342
Hückel-Rechnung 59, 75

390 | *Stichwortverzeichnis*

Hückel-Theorie 25 ff.
Hybridisierung 18
Hybridorbital 19, 109
– entartetes 36
– entartetes Paar 18
– Kohlenstoffatom 19
– sp 20
– sp² 20 ff.
– sp³ 20
– spⁿ 238
– Valenz-Atomorbitalenergie 51
Hydroperoxid-Ion
– relative Nukleophilie 142
Hydroxid-Ion 165
– relative Nukleophilie 142
Hyperkonjugation 82 ff., 105, 172
– negative 89, 167 ff.
– negative Hyperkonjugation mit einem Kation 89
– negative Hyperkonjugation mit einem Anion 90
– Stabilisierung einer C=C- π -Bindung 86
hypervalente Bindung
– Molekülorbital 109
1,5-Hexadiensystem 302
'HOMO' 349, 364 ff.
'HOMO'/HOMO-Wechselwirkung 354

I

Imin 297
Iminiumion
– cyclisches 202
– nukleophiler Angriff 202
Indolizidin 152
Inside-Alkoxy-Effekt 213
Instabilität 69
Intersystem Crossing 363
Inversion 204, 244
– Konfiguration 182
Ionisationspotential (IP) 52, 116
ionische Bindung 116
ionische Reaktion 131 ff., 179 ff.
– Elektronentransfer (ET) 131
– Reaktivität 131
– Stereochemie 179 ff.
Ireland-Claisen-Umlagerung 233
Isonitril 143
Isopren 299
Isoxazol 292

J

Jahn-Teller-Verzerrung 36 ff., 144

K

Kation
– negative Hyperkonjugation 89
Kernspinresonanzspektroskopie (NMR-Spektroskopie) 64
Keten 247
– Cycloaddition 294
– Energie der Grenzorbitale 295
– Koeffizient der Grenzorbitale 295
Keton 357
– α,β -ungesättigtes 164, 341, 362 ff.
– Photoanregung 362
Kinetik 115
Koeffizient
– π -Molekülorbitale der Intermediate in elektrophilen aromatischen Substitutionen an der ortho-, para- und meta-Position des Benzylanions 154
– π -Molekülorbitale kurzer konjugierter Systeme 37
Koeffizientenpaar
– größtes nebeneinanderliegendes 300
Kohlenstoff
– Stereochemie in Substitutionen am trigonalen Kohlenstoff 193
Kohlenstoff-Metall-Bindung, siehe C—M-Bindung
Kohlenstoffatom
– Atomorbital 11
– Hybridorbital 19
– π -Bindung 22
– p-Orbital 22
– σ -Bindung 22
– Substitution an gesättigten Kohlenstoffatomen 181
– Symmetrien SSS, SSS, ASA und SAA 17
Kohlenstoffelektrophil
– LUMO-Koeffizient 161
– Positionen für einen nukleophilen Angriff 161
Kohlenwasserstoff-Radikalanion 376
Konfiguration
– Inversion 182
– Molekül 96
– Retention 182, 193
– sichelförmig 98
– U-förmig 98
– Umkehr 189
– W-förmig 98
Konfigurationswechselwirkung 6
Konformation
– gauche 105

- Molekül 96
- s-cis 101 f.
- s-trans 81, 100 ff.
- synklinale 92
- Vorzugskonformationen durch Konjugation im σ -Gerüst 105
- Zickzack 105
- konjugate Substitution (S_N2') 166
- Konjugation 26 ff., 69 ff.
 - antiperiplanare 105
 - destabilisierende 81
 - Vorzugskonformation 105
 - Z-Substituent 77
- konjugiertes System
 - eingeschränkte Rotation in konjugierten π -Systemen 96
 - kurzes 37
 - längeres 36, 103
 - Möbius-artiges 311
- Kopf/Kopf-Addukt 361 f.
- Kopf/Kopf-Dimer 360
- Kopf/Kopf-Produkt 361
- Kopf/Schwanz-Addukt 359 ff.
- Kopf/Schwanz-Dimer 360
- Kopplung
 - 1J 65
 - 2J 65
 - 3J 65
 - 4J 65
 - 5J 65
 - langreichweitige (long range) 65
- Kopplungskonstante 64 f.
 - cis- 3J 65
 - trans- 3J 65
- Kornblum-Reaktion 343
- Korrekturparameter 59
- Korrelationsdiagramm 253
 - [2 + 2]-Cycloaddition zwischen Benzol und Ethen 367
 - Diels-Alder-Reaktion 258
 - Elektronenkonfiguration 258 f.
 - meta-Cycloaddition zwischen Benzol und Ethen 368
 - [$\pi 2_s + \pi 2_s$]-Cycloaddition 259
- Korrelationslinie 259
- kovalente Bindung 116
- Kreuzkupplung 360
- Kupplung 337
 - β, β - 340
 - N-p- 339
 - o-o-Produkt 337
 - O-o-Produkt 337
 - o-p-Produkt 337

- O-p-Produkt 337
- p-p- 337 ff.
- $\pi 2$ -Komponente 365
- $\pi 4$ -Komponente 365
- η^1 -Koordination 99
- η^3 -Koordination 99
- σ -Koordination 99

L

- L-Selektid 201
- Lacton 167
- Ladungseffekt 110
- Ladungstransfer-Term 125
- Lewis-Säure 311
 - Diels-Alder-Reaktion 278
- Li—C- σ -Bindung 56
- Licht 375
- Lithiumaluminiumhydrid 165
- Lokalisierungsenergie 151
- LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) 31 ff., 62 ff., 73 ff., 125 ff., 162, 252 f., 265, 319
 - Elektrophil 137 f.
 - Energie 137 f., 158, 261, 279 ff.
 - HOMO/LUMO-Paar 126
 - HOMO/LUMO-Wechselwirkung 123
 - Methylchlorid 55
 - Methyllithium in der Gasphase 57
- LUMO+1 171 f.
- LUMO_(Dipol)/HOMO_(Dipolarophil)-Wechselwirkung 284
- LUMO-Koeffizient 161 ff., 279, 306
 - Kohlenstoffelektrophil 161
- LUMO/'LUMO'-Wechselwirkung 349 ff., 361
- β -Lactam 297
- 'LUMO' 349, 364 ff.

M

- M—C-Bindung 88
- McConnell-Gleichung 66
- Mesomeriepfeil 31, 104
- meta-Angriff 153
- Metallkation 89
- Methacrylester 320
- Methan 14 ff.
- Methanol
 - photooxidative anti-Markownikow-Addition 338
- m-Methoxybenzylkation 352
- Methoxychlorcarben
 - ambiphiles 299
- Methoxymethylchlorid 93 ff.

- Methylchlorid
– LUMO 55
– Molekülorbital 54
Methylen 16
Methylithium 56
– HOMO und LUMO in der Gasphase 57
Methylvinylether 74
Minisci-Reaktion 329
Mislow-Umlagerung 220, 233
Möbius-Aromat 252
Molekül
– aus Wasserstoffatomen aufgebaut 2
– Grenzorbitalwechselwirkung zwischen photochemisch angeregtem Molekül und Molekül im Grundzustand 348
– Konfiguration 96
– Konformation 96
Molekülorbital (MO) 3 ff.
– Acrolein 72
– antibindendes 3
– bindendes 3
– entartetes 38
– highest occupied molecular orbital, siehe HOMO
– hypervalente Bindung 109
– Konstruktion 255
– lowest unoccupied molecular orbital, siehe LUMO
– Methylchlorid 54
– Methylen 16
– π 33 ff., 155
– SOMO (singly occupied molecular orbital), siehe SOMO
– Symmetrie AS und SS 257
– Wasserstoffbrückenbindung 107
– Wasserstoffmolekül 3 ff.
– Wechselwirkung 123
– Wheland-Intermediat aus monosubstituiertem Benzolderivat 153
– Molekülorbitaltheorie 1 ff.
– Hückel-Version 61
Morse-Potential 5
Mullay-Werte 50 f.
m-Nitrophenolat-Ion 352
m-Nitrophenylphosphat 352
m-Xylylen 352 f.
– π -Orbitale der ersten angeregten Zustände 352
 β -Metalloethylkation 87
1-Methoxybutadien 309
3-Methoxycycloheptatrien 371
4-Methoxypyridiniumkation 329
2-Methylpropen 357
- N**
Nukleophilen 174
– Insertion in ein Alken 250
– nukleophiles 173, 299
N,N-Dialkyl-1,3-diazacyclohexan 93
N,N-Dimethylvinylamin 100
n-endo-tet-Prozess 192
n-endo-trig-Prozess 192
n-exo-dig-Prozess 192
n- π^* -Anregung 347, 363
n- π^* -Übergang 364
Natrium-9,10-diphenylanthracenid 376
Nitril 143
Nitriloxid 210, 291
– Grenzorbitale 291
Nitrit-Ion 144 f.
– Grenzorbitale 145
– S_N2 -Reaktion 144
Nitritanion 142
Nitroalkan 144
Nitrobenzol 328, 343
Nitrobenzokatechinether 350
Nitron 291
– Grenzorbitale 293
Nitronat-Anion 343
Nitronium-Ion
– Grenzorbitale 145
Nitroniumkation 142
Norbomanon 213
Norboren 208
Nukleofug 110
Nukleophil 110, 126 ff.
– ambident 142
– anorganisches 137
– Grenzorbitalwechselwirkungen bei Reaktion mit Carbenen 174
– hartes 128, 137 ff.
– HOMO-Energie 137
– Nu—C-Bindung 132
– weiches 128, 137 ff.
nukleophile aromatische Substitution 350
nukleophile Substitution
– Addition/Eliminierung 194
nukleophiler Angriff
– an cyclische Oxonium- und Iminiumionen 202
– bevorzugte Positionen 161
– Cycloalken 205
– Cyclohexanon 200
– diastereoselektiver nukleophiler Angriff an Doppelbindungen

- Nukleophilie 135 ff.
– relative Nukleophilie des Hydroperoxid- und des Hydroxid-Ions 142
n- π^* -Übergang 364
- O**
ohne Einfluss sterischer Effekte 213
– nichtverbrückendes Elektrophil 187
– π -Bindung 185 ff.
– Salem–Klopman-Gleichung 187
– verbrückendes Elektrophil 189
ohne Einfluss sterischer Effekte 213
– Doppelbindung mit diastereotopen Seiten 198
– π -Bindung 185 ff.
– Reaktionsgeschwindigkeiten an Sulfoniumverbindungen 160
– relative Energien von Ausgangsverbindungen und Übergangszuständen beim nukleophilen Angriff an Carbonylgruppen 157
– relative Energien von Übergangszuständen und tetraedrischen Zwischenstufen beim nukleophilen Angriff an Arylhalogeniden 159
Octalon 341
Octatetraen 227
Orbital
– 1s 2, 19
– 2p 11 f.
– 2p_x 12 ff., 57
– 2p_y 15 ff., 57
– 2p_z 17 ff., 57
– 2s 11
– angeregter Zustand 349
– antibindendes 24 ff.
– bindendes 24 ff.
– C_{2p} 170
– C_{2s} 170
– C–Halogen- σ^* 159
– d 109
– entartetes 49
– Grundzustand 349
– H_{1s} 170
– konjugierte p-Orbitale 32
– nichtbindendes 27
– π 25 ff., 75 f., 352
– π_{CC} 47
– $\pi_{C=O}$ 57, 76
– π_{CO} 79
– π^* 25 ff., 75 f., 87
– $\pi^*_{C=O}$ 57
– π^*_{CO} 78 f.
– π_z^* 170
– p 87, 109
– p_y 47
– σ (bindendes) 6 ff., 82 ff.
– σ_{CC} 87
– σ_{CCl} 52 ff.
– σ_{CH} 19, 48, 87 f.
– $\sigma_{CH,\pi_{CC}}$ 47 f.
– σ_{CLi} 57
– σ_{CM} 78 ff.
– σ_{CX} 87 ff.
– σ_{HH} 17
– σ_{LiC} 56
– σ^* (antibindendes) 6 ff., 82, 170
– σ^*_{CCl} 53 ff., 95
– σ^*_{CF} 105
– σ^*_{CH} 19
– σ^*_{CLi} 57
– σ^*_{CO} 93
– σ^*_{CX} 90 ff.
– σ^*_{HH} 17
– σ^*_{LiC} 56
– σ^*_{YR} 91
– σ_3^* 170
– σ_x^* 22
– SS 15
– Symmetrie 197
– Symmetrie SAA 17
– Symmetrie SSS 17
– Symmetrieelement (SA) 257
– Symmetrieelement (SS) 257
– Ψ_1 26 ff., 61, 75 ff., 87
– Ψ_2 26 ff., 61, 75 ff., 87, 366
– Ψ_3 42 f., 61, 366
– Ψ_3^* 26 ff., 43, 73 ff., 87, 367
– Ψ_4^* 35, 366 ff.
– Ψ_5^* 38, 61, 366 ff.
– Ψ_6^* 38
– Ψ_x 29
– Ψ_y 29
Orbitaleffekt 110
Orbitalenergie
– Allylanion 74
Orbitalkorrelationsdiagramm 254
– Diels–Alder-Reaktion 255
– [$\pi 2_s + \pi 2_s$]-Cycloaddition 257
Orbitalwechselwirkung 126
– Photocycloaddition 360
– sekundäre 275 f., 360
– Stabilisierung 83
organische Verbindung
– Struktur 69 ff.
ortho-Angriff 153
ortho/para-Regel 270

- Oxoniumion
 - cyclisches 202
 - nukleophiler Angriff 202
- π -Orbitalkoeffizient
 - 1-Z-substituiertes Allylanion 151
- P**
- p-Methoxybenzylkation 352
- p-Nitroanisol 350
- p-Nitrophenolat-Ion 352
- para-Angriff 153
- Paternò-Büchi-Reaktion 357
- Peierls-Übergang 36
- Pentadienylanion 148, 227, 372
- Pentadienylkation 227
- Pentadienylsystem 149
- Pentalen 40
- Perezon 224
- pericyclische Reaktion 217 ff., 301, 355
 - photochemische 353
 - Selektivitätstyp 371
 - thermische 217 ff.
 - Woodward–Hoffmann-Regel 235
- Periselektivität 306
- Phenoxyradikal 337 f.
- Phenylazid 283 ff.
 - Grenzorbitale 290
- Phenylradikal 331
- Phenylsulfanyl (PhS)-Gruppe 78
- Photoanregung
 - α, β -ungesättigtes Keton 362
- photochemische Anregung
 - Radikal 343
- photochemische Codimerisierung
 - Alken 360
- photochemische Cycloaddition 357
- photochemische Ionisation 353
- photochemische pericyclische Reaktion 353
- photochemische Reaktion 347 ff.
 - energetischer Verlauf 354
 - Woodward–Hoffmann-Regel 353
- Photocycloaddition 354 ff., 368
 - aromatische Verbindung 365
 - Grenzorbitale 354 ff.
 - kumulierte Doppelbindungen 364
 - Regioselektivität 357
 - sekundäre Orbitalwechselwirkung 360
- Photodimerisierung 358
 - Alken 358
- Photoelektronenspektroskopie (PES) 63
- Photoreaktion
 - ionische 350
 - sensibilisierte 358
- Pinakolkupplung 340
- Pinakolon-Enolat 343
- Pipitzol 224
- Polymerisierung
 - radikalische 324
- Positionselektivität 306
 - Diels–Alder-Reaktion 280
- Produkt
 - endo-Kopf/Kopf 359
 - exo-Kopf/Kopf 359
 - Kopf/Kopf 361
 - syn-Kopf/Kopf 359
- Propen 140
- Proton 66
 - Hochfeldverschiebung 40 ff.
 - Tieffeldverschiebung 40 ff.
- Prozess, siehe Reaktion
- Pseudorotation 110
- push–pull-Alkene 97
- Pyramidalisierung 203 ff.
- Pyridin
 - π -Molekülorbitale 60
- Pyridin-N-oxid 156
 - elektrophile Substitution 156
- Pyridin-Typ 60
- Pyridiniumkation 162, 329 f.
 - π -Molekülorbitale 60
 - Wechselwirkungen der Grenzorbitale in der Reaktion mit Alkylradikalen 330
- Pyrrocolin 152
- Pyrrrol 155
 - π -Molekülorbitale 60
- Pyrrrol-Typ 60
- p-Xylylen 352 f.
 - π -Orbitale der ersten angeregten Zustände 352
- para-Z-Substituent 351
- π -Akzeptor 70
- π -Bindung 21, 47, 87 ff., 106, 372
 - Addition von Radikalen 324
 - elektrophiler Angriff 185 ff.
 - nukleophiler Angriff 185
 - Stabilisierung 86
- π -Bindungsenergie 39
- π -Donor 71, 326
- π -Elektronenüberschuss 127
- π -Energie 97
- π -Energieabsenkung 39
- π -Konjugation 81 ff.
 - Einfluss 69
- π -Orbitalkoeffizient
 - 1-Z-substituiertes Allylanion 151
- π - π^* -Anregung 347

- π - π^* -Übergang 63, 361
- π -Stabilisierung 102
- π -Stacking 111 f., 363
- π -System 70, 81
 - eingeschränkte Rotation in konjugierten π -Systemen 96
- π -Überlappung 78
 - Benzol 96
- [4 + 4]-Photodimerisierung 360
- β -Pinen 306
- Δ^1 -Pyrazolin 288
- 3-Pyridylanion 169
- R**
- Radikal 133, 319 ff.
 - Addition an π -Bindungen 324
 - ambidenten 336
 - Auswirkung der Natur des Radikals auf die Selektivität 323
 - Chemoselektivität 332
 - Einfluss von Substituenten auf die Stabilität 79
 - elektrophiles 319 ff., 336
 - geladenes ambidenten 338
 - Grenzorbitalwechselwirkung 321
 - neutrales ambidenten 336
 - nukleophiles 319 ff.
 - offenkettiges elektrophiles 336
 - photochemische Anregung 343
 - radikalischer Angriff an Benzolderivate 328
 - Regioselektivität beim Angriff an Anisol 331
 - X-Substituent in Konjugation mit einem Z-substituierten Radikal 79
- Radikal–Radikal-Kupplung 132
- Radikalanion 133, 339 ff., 376
 - Elektronentransfer 377
- Radikalinitiator 332
- Radikalkation 338
 - Elektronentransfer 377
- Radikalkupplung 343
- Radikalreaktion 319 ff.
 - photochemisch induzierte 373
 - Stereochemie 334
- Radikalstruktur 322
- Reaktion
 - [6 + 4]-Reaktion von Tropon mit Cyclopentadien 306
 - antarafacial 226 ff.
 - cheletrope 218, 355
 - chemische 115 ff.
 - Dipol-HO-kontrollierte 287 ff.
 - Dipol-LU-kontrollierte 287 ff.
 - electrocyclic, siehe electrocyclic Reaktion
 - 3-endo-trig 192, 314
 - 4-endo-trig 192, 297
 - 5-endo-trig 191 f.
 - 6-endo-tet 192
 - 6-endo-trig 327 f.
 - endotherme 122
 - 4-exo-tet 192
 - 5-exo-tet 192
 - 4-exo-trig 192
 - 5-exo-trig 191 f.
 - exotherme 120 ff., 168
 - geometrisch nicht realisierbare 244
 - geometrisch realisierbare 245
 - ionische, siehe ionische Reaktion
 - konzertierte 267
 - [$\pi 2_s + \pi 2_a$] 244
 - pericyclische, siehe pericyclische Reaktion
 - photochemische, siehe photochemische Reaktion
 - [$\sigma 2_a + \pi 2_s$]-Prozess 241 ff.
 - [$\sigma 2_a + \pi 4_a$]-Prozess 240
 - [$\sigma 2_a + \pi 6_s$]-Prozess 241
 - [$\sigma 2_s + \pi 2_a$] 244
 - [$\sigma 2_s + \pi 2_a + \pi 2_a$]-Prozess 241
 - [$\sigma 2_s + \pi 2_s + \pi 2_s$]-Prozess 241 f.
 - [$\sigma 2_s + \pi 4_s$]-Prozess 240
 - [$\sigma 2_s + \pi 6_a$]-Prozess 241
 - [$\sigma 2_s + \sigma 2_s + \pi 2_s$]-Prozess 242
 - [$\sigma 2_s + \omega 0_s$]-Prozess 241
 - [$\sigma 2_s + \omega 2_s + \pi 2_s$]-Prozess 242
 - Stereochemie 181
 - stereoselektiv 179
 - stereospezifisch 179
 - suprafacial 226 ff.
 - symmetrierlaubte 222, 244
 - symmetrieverbotene 222, 245
 - synchrone 267
 - thermische 355
 - thermische pericyclische, siehe thermische pericyclische Reaktion
- Reaktionsgeschwindigkeit 262
 - Diels–Alder-Reaktion 264
 - 1,3-dipolare Cycloaddition 282
 - Donor- und Akzeptorsubstituenten 303
 - nukleophiler Angriff an Sulfoniumverbindungen 160
- Reaktionspfeil 104
- Reaktionstyp
 - Woodward–Hoffmann-Regeln 223
- Reaktivität 131 ff.
 - ionische Reaktion 131 ff.

- Regioselektivität 262 ff.
 - Angriff an Anisol 331
 - Diels–Alder-Reaktion 266
 - 1,3-dipolare Cycloaddition 286
 - Einfluss von Lewis-Säuren 279
 - elektrocyclischer Ringschluss von Cycloheptatrien 371
 - Photocycloaddition 357
 - Reaktion zwischen Phenylazid und einem Z-substituierten Alken 290
- Resonanz 4 f.
- Resonanzintegral 4
- Retention 244
 - Konfiguration 182
- Retro-Cycloaddition 218
- Ringöffnungsreaktion 228 f.
 - Cyclopropylhalogenid 312
 - disrotatorische 228, 239
 - konrotatorische 228 f., 311
 - π -Energien für eine konrotatorische Ringöffnung von Cyclobuten 305
- Ringschlussreaktion 228 f.
 - disrotatorische 228 f., 239
 - konrotatorische 228
- Ringsystem 39
- Rotation
 - konjugiertes π -System 96
 - Stabilisierung des Übergangszustands 103
- Rotationsbarriere 103
- S**
- Salem–Klopman-Gleichung 124 ff., 186 f.
 - elektrophiler Angriff an einer C=C-Bindung 187
- Säure
 - Prinzip der harten und weichen Säuren und Basen (HSAB) 115
- S_E1 -Reaktion 193
- S_E2 -Reaktion (elektrophile Substitution) 181, 193 f.
 - Grenzorbitale 182
 - S_E2_{inv} 182
 - S_E2_{ret} 182
- Seitenketten
 - Reaktivität der Seitenketten in Aromaten 351
- Selektivität
 - Auswirkung der Natur des Radikals 323
 - Einfluss stereoelektronischer Effekte 323
- Selektivitätstyp
 - pericyclische Reaktion 371
- sigmatrope Umlagerung 217 ff., 240, 307, 356, 372
- Silber 143
- Silylenolether 150
- Simmons–Smith-Carbenoid 299
- single-electron transfer (SET) 132; siehe s.a. Elektronentransfer (ET)
- Singulettzustand
 - angeregter 366
- Singulettreaktion 363
- S_N1 -Mechanismus 143
- S_N1 -Reaktion 193
- S_N2 -Reaktion 131 ff., 181, 193 ff.
 - Gasphase 181
 - Nitrit-Ion 144
- S_N2' -Reaktion 202 ff.
- Solvenseffekt 129, 139
- SOMO (singly occupied molecular orbital) 31, 319 ff., 342
- SOMO/HOMO-Wechselwirkung 328 f.
- SOMO-Koeffizient 336
- SOMO/LUMO-Wechselwirkung 328
- Spannung 129
- spektroskopische Methode 62
- Spin-Information 65
- Spiroaromatizität 46
- Spiroheptatrien-Molekül
 - π -Molekülorbital 46
- Spirokonjugation 45
- Spiroononatetraen 46
- $S_{RN}1$ -Mechanismus 134 f.
- Stabilisierung
 - Alkylation 82
 - C=C- π -Bindung durch Hyperkonjugation 86
 - Carbanion 91
 - captodative 79
 - Orbitalwechselwirkung 83
 - π -Bindung 86
 - Übergangszustand der Rotation 103
 - vertikale 82
- Stabilität 69
 - Effekt von Substituenten bei Alkenen 71
 - Effekt von Substituenten bei Carbanionen 77
 - Effekt von Substituenten bei Carbokationen 76
 - Einfluss von Substituenten bei Radikalen 79
 - kinetische 69
- Stereochemie 179 ff.
 - Diels–Alder-Reaktion 275
 - Radikalreaktion 334
 - Reduktion von α,β -ungesättigten Ketonen 341

- Substitution am trigonalen Kohlenstoff 193
- Stereoselektivität
- 1,3-dipolare Cycloaddition 293
- sterischer Effekt
- elektrophiler Angriff an offenkettige Alkene 209
- Stevens-Umlagerung 234, 246
- Struktur
- organische Verbindung 69 ff.
- Styrol 71, 325
- Substituent 71
- Effekt auf die Stabilität von Alkenen 71
- Effekt auf die Stabilität von Carbanionen 77
- Effekt auf die Stabilität von Carbokationen 76
- Einfluss auf die Stabilität von Radikalen 79
- elektronegativer 211
- elektropositiver 210
- Schreibweise 70
- Substitution
- Alkylhalogenid 170
- an gesättigten Kohlenstoffatomen 181
- anti 211
- elektrophile, siehe elektrophile Substitution
- elektrophile aromatische, siehe elektrophile aromatische Substitution
- konjugate (S_N2') 166
- nukleophile 131 ff., 194
- nukleophile aromatische 350
- S_E2 -Reaktion 181
- S_N2 -Reaktion, siehe S_N2 -Reaktion
- Stereochemie beim trigonalen Kohlenstoff 193
- Sulfoniumverbindung
- Reaktionsgeschwindigkeit des nukleophilen Angriffs 160
- Superdelokalisierbarkeit 152
- syn-Kopf/Kopf-Addukt 359
- syn-Kopf/Kopf-Produkt 359
- syn-Selektivität 204
- σ -Akzeptor 70, 326
- σ -Bindung 47, 82, 106, 372
- gespannte 46
- σ -Donor 70
- σ -Konjugation 78 ff.
- σ -Überlappung 82
- β -Sauerstoffeffekt 335
- [1,3]-sigmatrope Umlagerung 244
- suprafaciale 355
- [1,5]-sigmatrope Umlagerung 304
- [1,7]-sigmatrope Umlagerung 219, 304
- suprafaciale 355
- [2,3]-sigmatrope Umlagerung 242

- [3,3]-sigmatrope Umlagerung 219, 241, 301
- [m,n]-sigmatrope Umlagerung 233

T

- trans-Decalin 341
- trans-Decalon 341
- trans-Methylstyrol 363
- trans-Ringverknüpfung 362
- trans-Stilben 363
- tau-Bindungsmodell 61, 185
- Tetracyanoethen 226
- tetraedrisches Elektrophil 159
- Tetraen 225
- thermische pericyclische Reaktion 217 ff.
- thermische Reaktion
- Woodward–Hoffmann-Regel 355
- Thermodynamik 115
- Thiocyanat 143
- Thiocyanatanion 142
- Thiophen 155
- Torquoselektivität 310 ff.
- Torsionsspannung 201
- Trajektorie 190
- Tributylzinnhydrid 333
- Tributylzinnradikal 323, 333
- Trimethylsilyladamantansystem 214
- Triplettzustand 358 ff.
- angeregter 356
- $n-\pi^*$ 375
- Triquinazen 45
- Tris(trimethylsilyl)silylradikal 335
- Trishomobenzol 45
- Trishomocyclopropenylkation 44
- Tropon 225, 309
- [6 + 4]-Reaktion mit Cyclopentadien 306
- Grenzorbitalkoeffizient 273
- Tunnelprozess 355

U

- Übergangszustand 120
- aromatischer 251
- Dimerisierung von Cyclopentadien 277
- Möbius-artiger aromatischer 305
- nukleophiler Angriff an Carbonylgruppen 157
- relative Energie 157 ff.
- Rotation 103
- Stabilisierung 103
- Überlappung
- antiperiplanare 94
- synperiplanare 94
- Überlappungsintegral 4 ff., 22

- Ultraviolett-spektroskopie (UV/Vis-Spektroskopie) 62
Umlagerung
– [1,4] 232
– [1,7] 373
– [1,7]-antarafaciale 231
– [1,n] 232
– suprafacial/suprafaciale [m,n] 233
Umwandlung
– disrotatorische 238
– konrotatorische 238
1,2-Umlagerung 304
– Yliden 246
- V**
Van-der-Waals-Kraft 112
Van-der-Waals-Wechselwirkung 111
Verbindung
– hypervalente 109
vertikale Stabilisierung 82
Vinylboran 271
Vinylchlorid 183
Vinylkation 249
Vinylogie 104
Vinylogieprinzip 104
- W**
Wagner–Meerwein-Umlagerung 232
Walsh-Diagramm 84
Walsh-Orbitale
– Cyclopropan 48
Wanderung
– antarafaciale 230
– suprafaciale 230
Wasserstoffatom
– Abstraktion 322 ff.
– 1s-Atomorbital 2, 19
Wasserstoffbrückenbindung 106
– Molekülorbital der symmetrischen Wasserstoffbrückenbindungen im HF_2^- 107
Wasserstoffmolekül 2
– Molekülorbitale 3
Wasserstoffquelle
– Einfluss der Struktur 323
Wechselwirkung 7
– antibindende 30
– antibindende π 42
– bindende 30
– Dipol–Dipol 111
– groß-groß 357
– groß-groß/klein-klein 268
– groß-klein/klein-groß 268
– HOMO/HOMO 123
– HOMO/‘HOMO’ 349 ff., 361 ff.
– ‘HOMO’/HOMO 354
– $\text{HOMO}_{(\text{Carben})}/\text{LUMO}_{(\text{Alken})}$ 174
– $\text{HOMO}_{(\text{Dipol})}/\text{LUMO}_{(\text{Dipolarophil})}$ 284
– HOMO/LUMO 123, 144, 349
– $\text{LUMO}_{(\text{Dipol})}/\text{HOMO}_{(\text{Dipolarophil})}$ 284
– LUMO/‘LUMO’ 349 ff., 361
– Molekülorbital 123
– nichtkovalente 106
– Orbital 125 f.
– π – π 111
– schwache 110
– SOMO/HOMO 328 f.
– SOMO/LUMO 328
– Van-der-Waals 111
Wellenfunktion 1 ff.
– Konturfläche 15
– Konturlinie 7 ff.
– π 25
– π^* 25
Wheland-Intermediat
– monosubstituiertes Benzolderivat 153
Woodward–Hoffmann-Regel 223 ff.
– allgemeine 235
– Begründung 251
– Cycloaddition 235
– pericyclische Reaktion 235
– photochemische Reaktion 353
– thermische Reaktion 355
– Zeichnen von Diagrammen 243
[1,2]-Wanderung 304
[1,3]-Wanderung 245
– suprafaciale 232
[1,7]-Wanderung 219
[3,3]-Wanderung 219
[1,5]-Wasserstoffwanderung
– suprafaciale 240
[1,7]-Wasserstoffwanderung 219, 373
– antarafaciale 241
– suprafaciale 372
[1,n]-Wasserstoffwanderung 230
[2,3]-Wittig-Umlagerung
– anionische 233
- X**
X–H... π -Bindung 108
X–H...X-Bindung 106
X-Substituent 74 ff., 141, 158, 261 f., 350
– Allylsystem 166
– Definition 70
– Eigenschaft 70

- Konjugation mit einem Z-substituierten Radikal 79
- 2,6-Xylochinon 272

- Y**
- Ylid 175

- Z**
- Z-Butadienylketon 311
- Z-2-Buten 96
- Z-Substituent 71 ff., 141, 158 f., 261 ff., 333, 352
- Definition 70
- Eigenschaft 70
- Konjugation 77
- Zinnradikal 332
- Zustand
- angeregter 348 f.
- erster angeregter (1. AZ) 259, 352
- Grenzorbinitalwechselwirkung mit Molekül im Grundzustand 348
- $n-\pi^*$ 347
- $\pi-\pi^*$ 347
- symmetrischer 258
- zweifach angeregter (2. AZ) 258 f.

