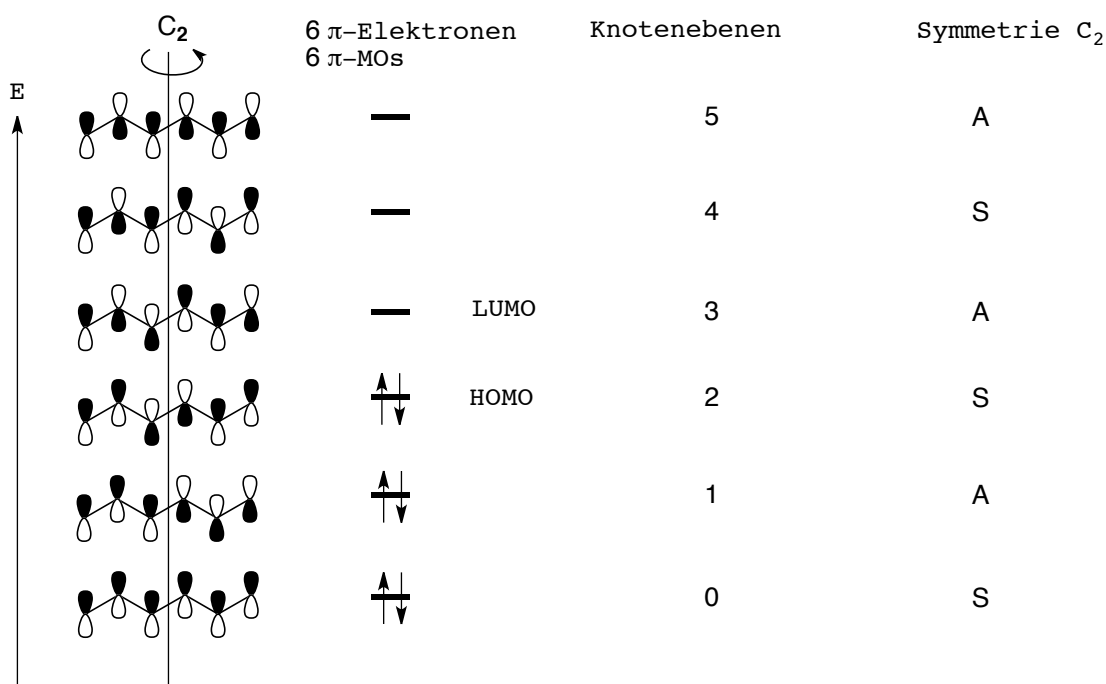
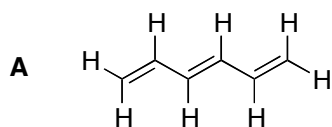


Vorlesung "Organische Chemie 1"

Übungsblatt 2

Ü1: Beschreiben Sie das π -System von Hexa-1,3,5-trien **A** mit der Molekülorbital-Theorie: Wieviele π -MOs erwarten Sie? Wieviele π -Elektronen sind vorhanden? Welche Struktur haben die π -MOs?



LUMO = Lowest Unoccupied Molecular Orbital
HOMO = Highest Occupied Molecular Orbital

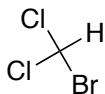
Take-Home-Message:

Was sind die Unterschiede zwischen der VB- und MO-Theorie?

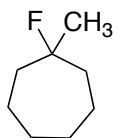
VB-Theorie betrachtet mit Hilfe von Lewis-Strukturen lokalisierte Bindungen, die durch Überlappung von (Hybrid)-Orbitalen (sp^3 , sp^2 , sp – Beschreibung von σ -Bindungen) aufgebaut werden. Bei der MO-Theorie werden n AOs zu n MOs (bindend – niedrigere Energie und antibindend – höhere Energie) kombiniert. Die Symmetrie bezüglich der vorhandenen Symmetrieelemente bleibt stets erhalten. Die Anzahl der Knoten(flächen)steigt mit zunehmender Energie. Die MOs werden basierend auf dem Aufbauprinzip – Pauli-Prinzip – Hund'scher Regel besetzt.

Ü2: Zeichnen Sie für folgende Verbindungen eine Strukturformel: a) 1-Brom-1,1-dichlormethan; b) 1-Fluor-1-methylcycloheptan; c) 2,2,7,7-Tetramethyloctan; e) (1-Iodpropyl)cyclohexan.

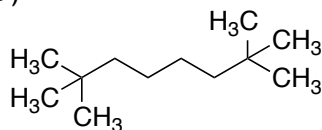
a)



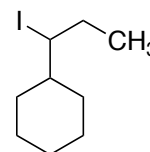
b)



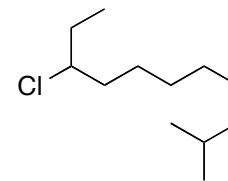
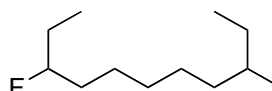
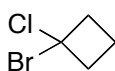
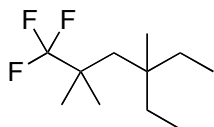
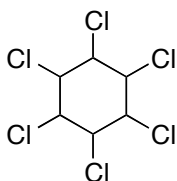
c)



d)



Ü3: Benennen Sie folgende Verbindungen nach der IUPAC-Nomenklatur.



1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexan

4-Ethyl-1,1,1-trifluor-2,2,4-trimethylhexan

Längste Kette und enthält niedrigste Zahl (Loktanten) für Verzweigungen, nicht: 3-Ethyl-6,6,6-trifluor-3,5,5-trimethylhexan

1-Brom-1-chlorcyclobutan

B kommt im Alphabet vor C, nicht 1-Chlor-1-bromcyclobutan

3-Fluor-9-methylundecan

Bei gleicher Position in der Kette erhält der alphabetisch zuerst genannte Substituent die niedrigere Positionsbezeichnung, nicht 9-Fluor-3-methylundecan

9-Chlor-2-methylundecan

Niedrigste Zahl (Loktanten) für Verzweigungen

Take-Home-Message:

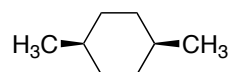
Regeln zur Benennung von Alkanen mit und ohne Halogensubstituenten nach der IUPAC siehe Notizen zur Vorlesung S.26ff, Vollhardt 4. Auflage S. 73f oder <http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/>.

WICHTIG: Die Benennung einer Verbindung muss eindeutig die Struktur wiedergeben, d. h. die Reihenfolge der Zahlen oder die alphabetische Reihenfolge der Substituenten muss zusammenhängend stimmig sein. In der Klausur werden für falsche Namen, die die richtige Struktur beschreiben, zwar nicht alle Punkte vergeben, aber auch nicht die Aufgabe als falsch gewertet. Die Verwendung von Trivialnamen ist erlaubt.

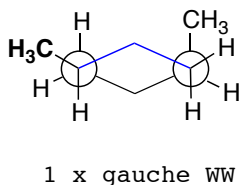
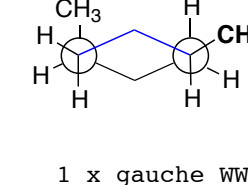
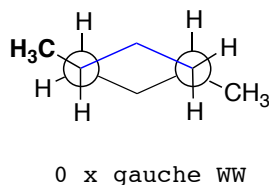
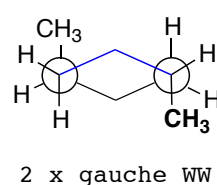
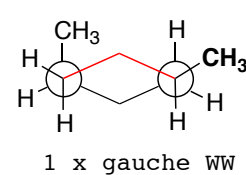
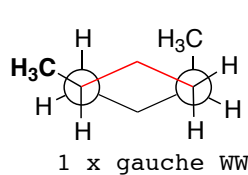
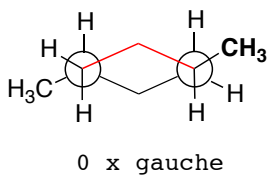
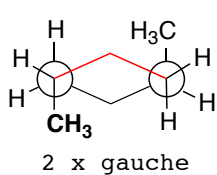
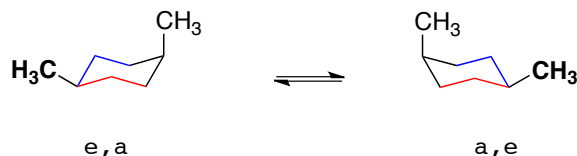
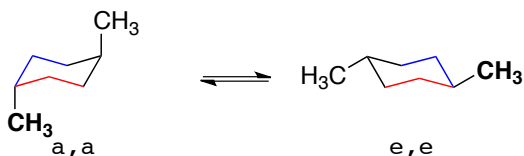
Ü4: Welche Konformationen sind für 1,4-Dimethylcyclohexan denkbar, in denen ekliptische Wechselwirkungen weitgehend vermieden werden?



trans-1,4-Dimethylcyclohexan (achiral)

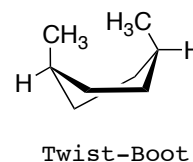
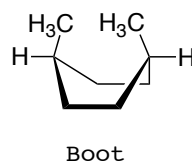
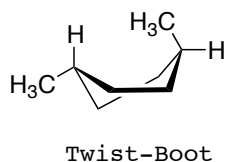
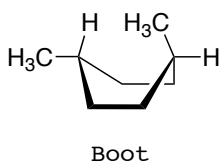


cis-1,4-Dimethylcyclohexan (achiral)



| | | | |
|---------------|---------------|---------------|---------------|
| 4 x gauche WW | 0 x gauche WW | 2 x gauche WW | 2 x gauche WW |
|---------------|---------------|---------------|---------------|

Ungünstigere Konformationen:



Take-Home-Message:

Newman-Projektionen, welche Konformationen gibt es für Cyclohexan (Sessel (chair), Boot (boat), Twist-Boot). Was bedeutet gauche, ekliptisch (ecliptic) und gestaffelt (staggered). 1,4-Dimethylcyclohexan kann als *trans*- oder *cis*-Isomer vorliegen. Beide Isomere sind symmetrisch und besitzen eine Spiegelebene, welche senkrecht durch die beiden Methylgruppen an C1 und C4 verläuft. Daher sind beide Formen achiral! Das *trans*-1,4-Cyclohexan in der e,e-Konformation ist am stabilsten und zeigt keine *gauche*-Wechselwirkungen. Alle anderen Konformationen besitzen wenigstens einen Me-Gruppe in einer ungünstigen axialen Position.

Typische Energiewerte für 1,2-Wechselwirkungen (normiert auf Ethan C₂H₆):

C-H/C-H (ekliptisch) 4.2 kJ mol⁻¹

C-CH₃/C-H (ekliptisch) 5.8 kJ mol⁻¹

C-CH₃/C-CH₃ (ekliptisch) 10.5 kJ mol⁻¹

C-CH₃/C-CH₃ (gauche) 3.8 kJ mol⁻¹

C-H/C-H (gauche) 0.0 kJ mol⁻¹