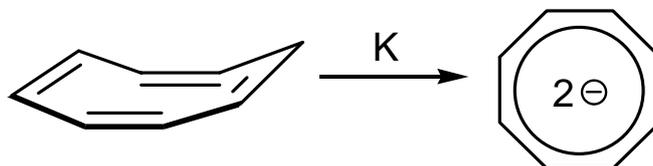


# Vorlesung Physikalisch-Organische und Supramolekulare Chemie

Prof. Dr. Christoph A. Schalley

## Quickie Nr. 9:

Erläutern Sie anhand von Molekülorbitalschemata, warum Cyclooctatetraen wannenförmig ist! Warum lässt es sich sehr leicht in sein Dianion überführen? Warum ist das Dianion eben, obwohl es in dieser Struktur nicht spannungsfrei sein kann? Zeichnen Sie die  $\pi$ -Molekülorbitale des Dianions unter Anwendung der Knotenregel! Im Cyclooctatetraen können zwei Reaktionen ablaufen: Die Ringinversion und die Wanderung aller Doppelbindungen. Geben Sie an, wie die Übergangsstrukturen aussehen müssten! Warum leidet eine davon (welche) unter einer besonderen Destabilisierung? Ist dies tatsächlich eine echte Übergangsstruktur?



Explain with the help of molecular orbital schemes, why cyclooctatetraene has a boat-like conformation! Why can it be transferred very easily into the corresponding dianion? Why is the dianion a planar molecule, although it can possibly be free of strain in this structure? Draw the  $\pi$ -molecular orbitals of the dianion applying the knot rule! Two reactions can occur within the cyclooctatetraene ring: Ring inversion and a shift of all double bonds. How do you expect the two transition structures to look like? Why does one of them (which one?) suffer from a particular destabilization effect? Is it a real transition structure?