

Institut für Chemie und Biochemie	
der Freien Universität Berlin	
Nachklausur zur Vorlesung OC I	23.03.2016
Prof. Dr. Christoph Schalley	
Höchstpunktzahl:	100
Davon erreicht	

Bitte füllen Sie den nachfolgenden Block aus:

Nachname:		Fachrichtung
	+-----+ <i>Lösung</i>	() Biochemie
Vorname:		() Chemie
	+-----+	() Biologie
Matrikelnr.:		() andere
	+-----+	

Bitte beachten Sie:

- Verwenden Sie zur Beantwortung der Fragen ausschließlich die ausgehändigten Blätter!
- Verwenden Sie die Rückseiten bei Bedarf als Entwurfspapier! Lösungen auf den Rückseiten werden nur dann bei der Korrektur berücksichtigt, wenn eindeutig und ausdrücklich darauf hingewiesen wird! Ansonsten werden Rückseiten als "Schmierpapier" nicht in die Wertung einbezogen!
- Verwenden Sie KEINEN Bleistift und KEINE Korrekturflüssigkeiten!
- Heftung bitte nicht öffnen! Bei der Abgabe der Klausur müssen alle Blätter wieder abgegeben werden. Klausuren gelten erst dann als abgegeben, wenn sie sich in sicherem Gewahrsam des Assistenten befinden.

Hinweis zum Datenschutz:

Die Klausurergebnisse stellen wir in einer Liste nach Matrikelnummern ohne Namensnennung und durch ein Passwort geschützt ins Netz. Sie können dieser Regelung zur Notenbekanntgabe widersprechen, wenn Sie damit nicht einverstanden sind. Wegen begrenzter Ressourcen können wir Ihnen Ihre Ergebnisse dann nur in der Klausureinsicht persönlich bekannt geben.

- ☐ **Mit der Regelung bin ich NICHT einverstanden; mein Ergebnis soll NICHT in die Notenliste aufgenommen werden.**

Aufgabe 1:**insgesamt: 19 Punkte**

Sie haben aus Rohöl eine sehr unpolare, bei Raumtemperatur flüssige Fraktion abgetrennt, deren Summenformel und Struktur Sie aber nicht kennen. Die vollständige Verbrennung von 1 g dieser Substanz in reiner Form liefert 3,38448 g CO_2 und 0,69228 g H_2O . Stickstoffhaltige Verbindungen entstehen bei der Verbrennung nicht. Aus einem Massenspektrum wissen Sie, dass diese Substanz ein Molekulargewicht von 78 g/mol hat. Im NMR-Spektrum sehen Sie nur ein einziges Signal, so dass Sie schließen können, dass alle Wasserstoffatome äquivalent sein müssen.

- a) Berechnen Sie aus diesen Daten die Summenformel des Moleküls! Geben Sie dabei Ihren Rechenweg an!

7 Punkte

$$M_{\text{CO}_2} = 44, M_{\text{C}} = 12 \quad (\text{g/mol})$$

$$3,38448 \text{ g } \text{CO}_2 \hat{=} 0,92304 \text{ g C} \quad (2\text{P})$$

$$M_{\text{H}_2\text{O}} = 18, M_{\text{H}} = 1 \quad (\text{g/mol})$$

$$0,69228 \text{ g } \text{H}_2\text{O} \hat{=} 0,07692 \text{ g H} \quad (2\text{P})$$

$$Z = 0,99996 \text{ g}$$

$\Rightarrow$ Verbindung enthält mol C + H

$$M = 78 \text{ g/mol}$$

$$\text{Verhältnis C:H} \hat{=} 0,92304/12 : 0,07692/1$$

$$\hat{=} 1 : 1 \quad (2\text{P})$$

$\Rightarrow$ Verbindung enthält

6 x C und 6 x H

$$\text{Summenformel: } \text{C}_6\text{H}_6 \quad (1\text{P})$$

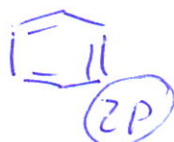
- b) Zeichnen Sie die Strukturformel des Moleküls! Geben Sie den Namen an!

3 Punkte

alle H-Atome gleich

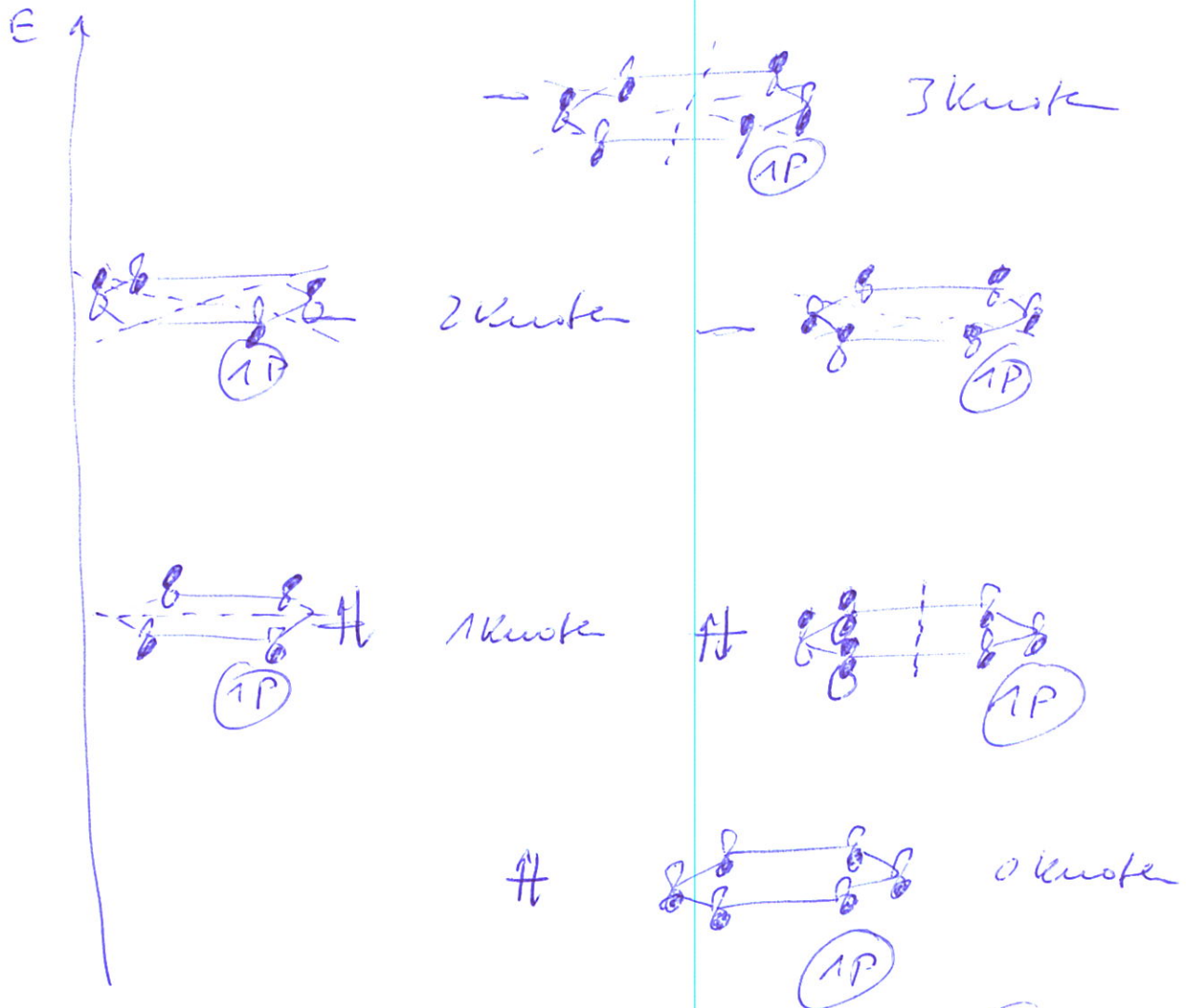
$\Rightarrow$ 6-zählige Symmetrie

$\Rightarrow$



Benzol 1P

- c) Zeichnen Sie mit Hilfe der Knotenregel alle Molekülorbitale des π -Systems Ihres Moleküls in der richtigen energetischen Abfolge! Besetzen Sie sie mit Elektronen!
9 Punkte

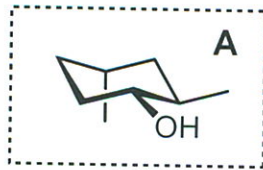
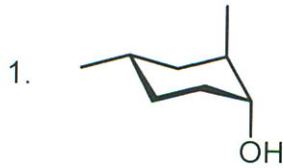


- Besetzung mit Elektronen (1P)
- richtige energetische Abfolge (1P)
- paarweise Entartung (1P)

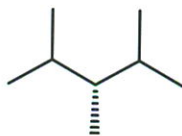
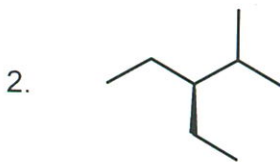
Aufgabe 2:**insgesamt: 26 Punkte**

a) Bestimmen Sie für die folgenden Paare von Verbindungen, um welche Art von Isomerie es sich jeweils handelt!

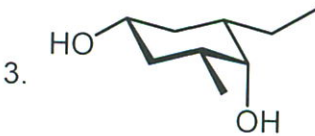
14 Punkte



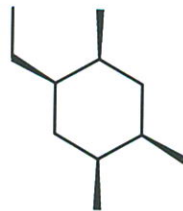
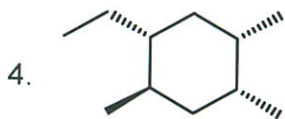
Konformer (2P)



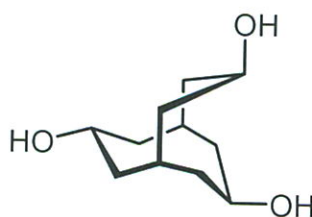
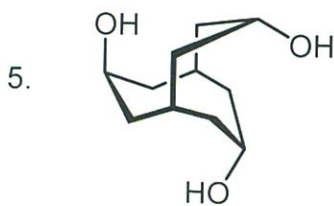
Konstitutions-
isomere (2P)



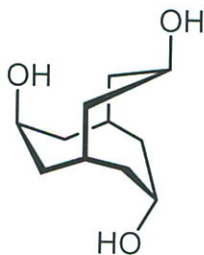
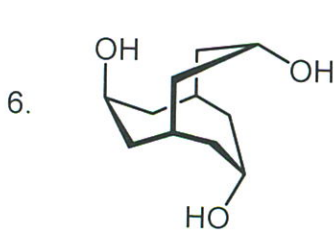
identisch (2P)



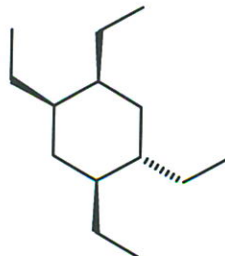
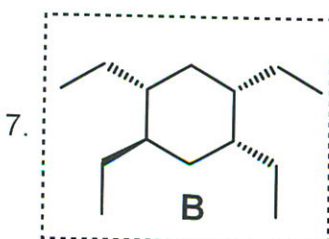
Konfigurations-
isomere
(Diastereomere) (2P)



Konformer (2P)



Konfigurations-
isomere
(Diastereomere) (2P)



Konfigurations-
isomere
(Enantiomere) (2P)

- b) Zwei der Moleküle in Aufgabe (a) sind mit gestrichelten Kästchen umgeben. Benennen Sie diese beiden Moleküle mit dem korrekten und vollständigen IUPAC-Namen!

12 Punkte

A: (1R, 2R, 4S) - 2,4-Dimethylcyclohexanol
 (1P) (1P) (1P) (1P) (1P) (1P)

B: (1R, 2R, 4R, 5S) - 1,2,4,5-Tetraethylcyclohexan
 (1P) (1P) (1P) (1P) (1P)

Aufgabe 3:

insgesamt: 24 Punkte

- a) Berechnen Sie die Verbrennungswärmen der folgenden Moleküle aus den angegebenen Bildungswärmen!

10 Punkte

1. Cyclohexan

 $\Delta H_f(\text{CO}_2) = -393,5 \text{ kJ/mol}$; $\Delta H_f(\text{H}_2\text{O}) = -285,9 \text{ kJ/mol}$; $\Delta H_f(\text{C}_6\text{H}_{12}) = -156,2 \text{ kJ/mol}$

Verbrennungswärme: $\text{C}_6\text{H}_{12} + 9\text{O}_2 \rightarrow 6\text{CO}_2 + 6\text{H}_2\text{O}$ (4P)

$$\Delta H_v(\text{C}_6\text{H}_{12}) = 6 \cdot \Delta H_f(\text{CO}_2) + 6 \cdot \Delta H_f(\text{H}_2\text{O}) - \Delta H_f(\text{C}_6\text{H}_{12}) = -3920,2 \text{ kJ/mol}$$

Verbrennungswärme pro Methylengruppe:

$$-653,4 \text{ kJ/mol} \quad (1P)$$

2. Cyclopropan

 $\Delta H_f(\text{CO}_2) = -393,5 \text{ kJ/mol}$; $\Delta H_f(\text{H}_2\text{O}) = -285,9 \text{ kJ/mol}$; $\Delta H_f(\text{C}_3\text{H}_6) = +54,5 \text{ kJ/mol}$

Verbrennungswärme: $\text{C}_3\text{H}_6 + 4,5\text{O}_2 \rightarrow 3\text{CO}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$ (4P)

$$\Delta H_v(\text{C}_3\text{H}_6) = 3 \cdot \Delta H_f(\text{CO}_2) + 3 \cdot \Delta H_f(\text{H}_2\text{O}) - \Delta H_f(\text{C}_3\text{H}_6) = -2092,4 \text{ kJ/mol}$$

Verbrennungswärme pro Methylengruppe:

$$-697,5 \text{ kJ/mol} \quad (1P)$$

- b) Berechnen Sie mit den folgenden zusätzlichen Angaben (die Dichten beziehen sich in beiden Fällen auf die Flüssigkeit) den Energieinhalt eines Liters Cyclopropan im Vergleich zu einem Liter Cyclohexan! Welche Verbindung ist der bessere Treibstoff?

10 Punkte

$$D(C_3H_6) = 0,68 \text{ kg/l}; M(C_3H_6) = 42 \text{ g/mol}$$

$$D(C_6H_{12}) = 0,78 \text{ kg/l}; M(C_6H_{12}) = 84 \text{ g/mol}$$

Energieinhalt 1 L Cyclopropan:

$$1 \text{ L } C_3H_6 \hat{=} 680 \text{ g} \hat{=} 16,2 \text{ mol} \quad (4P)$$

$$16,2 \text{ mol} \cdot (-2092,4 \text{ kJ/mol}) = -33877,0 \text{ kJ/mol}$$

Energieinhalt 1 L Cyclohexan:

$$1 \text{ L } C_6H_{12} \hat{=} 780 \text{ g} \hat{=} 9,3 \text{ mol} \quad (4P)$$

$$9,3 \text{ mol} \cdot (-3920,2 \text{ kJ/mol}) = -36401,9 \text{ kJ/mol}$$

Besserer Treibstoff:

Cyclohexan (2P)

- c) Berechnen Sie aus den oben ermittelten Werten die Gesamtringspannung im Cyclopropangerüst! Welche Arten von Molekülspannung wirken sich hier aus?

4 Punkte

Spannung pro CH_2 -Gruppe

$$-653,4 + 697,5 = 44,1 \text{ kJ/mol} \quad (1P)$$

Gesamtspannung:

$$3 \cdot 44,1 \text{ kJ/mol} = 132,3 \text{ kJ/mol} \quad (1P)$$

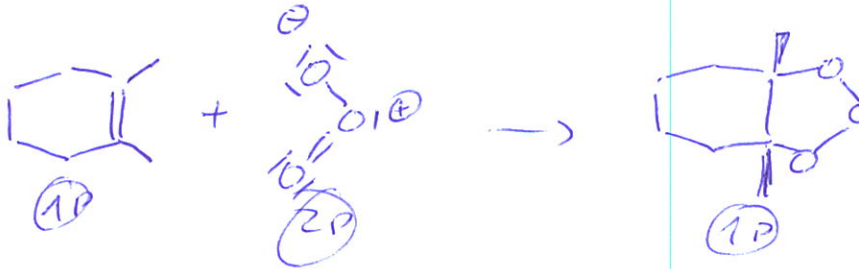
Winkeldeformationspannung (1P)

ecliptische H-Atome (1P)

Aufgabe 4:**insgesamt: 18 Punkte**

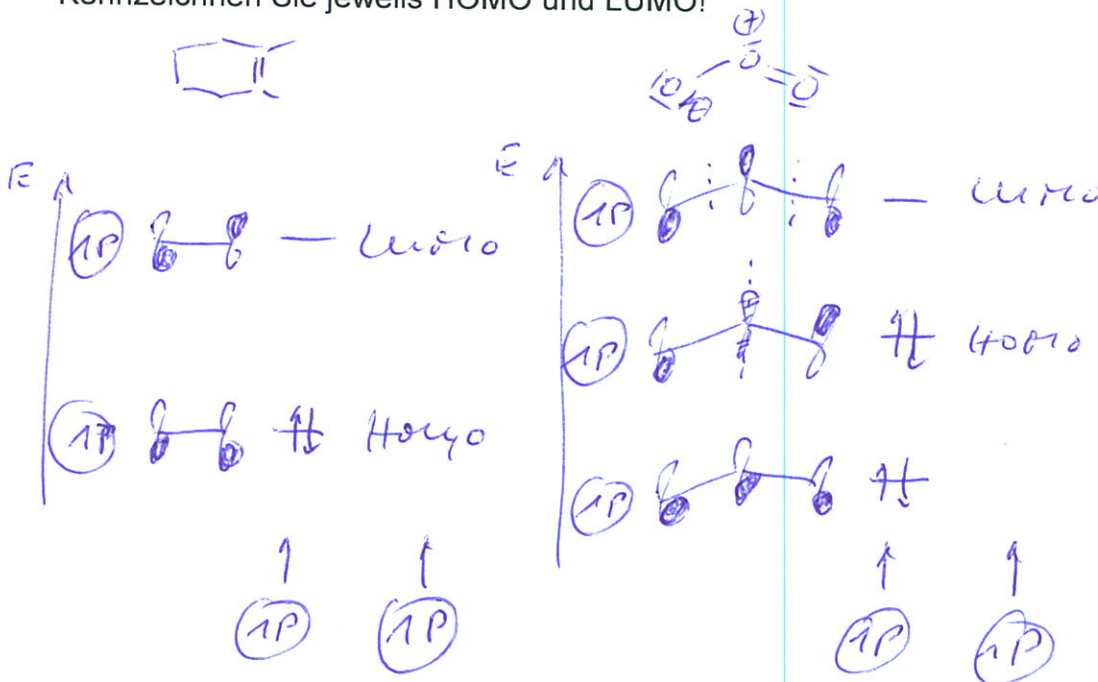
- a) Der erste Reaktionsschritt der Ozonolyse von 1,2-Dimethylcyclohexen ist eine 1,3-dipolare Cycloaddition. Zeichnen Sie die beiden Edukte und das im ersten Schritt unmittelbar gebildete Reaktionsprodukt!

4 Punkte



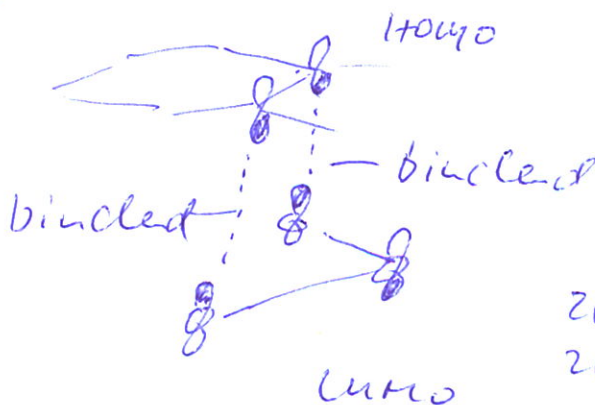
- a) Zeichnen Sie die Molekülorbitale der π -Systeme beider Edukte in der richtigen energetischen Abfolge! Besetzen Sie die Orbitale korrekt mit Elektronen! Kennzeichnen Sie jeweils HOMO und LUMO!

9 Punkte



- c) Zeichnen Sie den Übergangszustand für diese 1,3-dipolare Cycloaddition so, dass man die räumliche Anordnung der beiden Edukte zueinander eindeutig erkennen kann! Tragen Sie die passenden Orbitale in diese Zeichnung ein und begründen Sie, warum die Reaktion nach den Woodward-Hoffmann-Regeln thermisch erlaubt ist!

5 Punkte



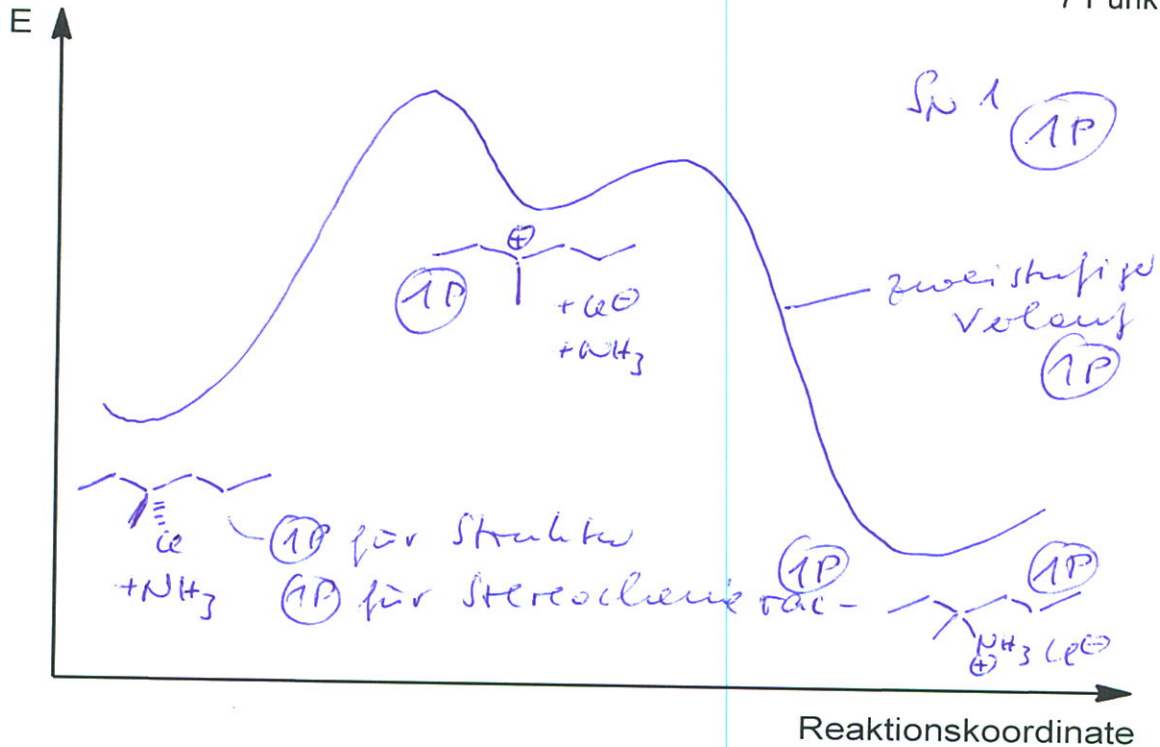
(alternativ
unvollständig
HOMO-LUMO-
Paarung)

2P für korrekte Geometrie
2P für HOMO/LUMO-Paarung
1P für Begründung

Aufgabe 5:**insgesamt: 13 Punkte**

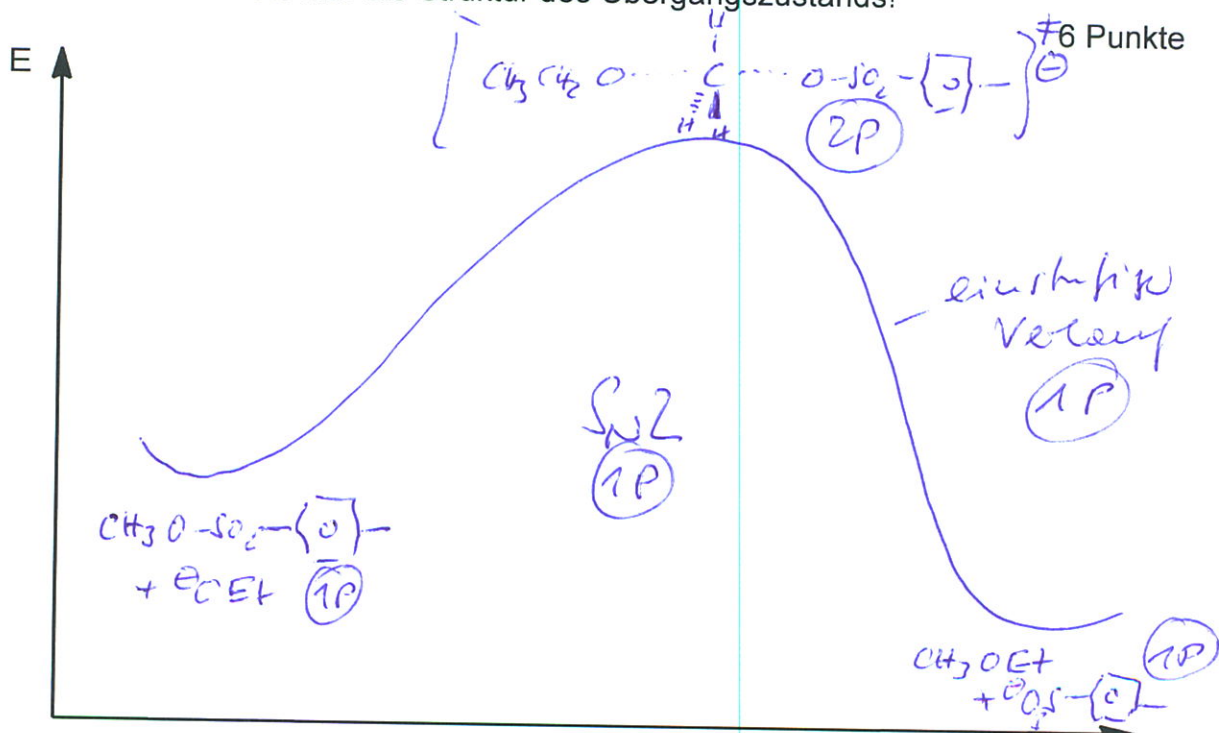
- a) Zeichnen Sie die Potentialenergiekurve der Reaktion von (R)-3-Chlor-3-methylhexan mit Ammoniak in Methanol! Um welchen Reaktionstyp handelt es sich? Geben Sie die Stereochemie des Produkts an!

7 Punkte



- a) Zeichnen Sie die Potentialenergiekurve der Reaktion von Methyltosylat mit Natriummethanolat in Dimethylformamid! Um welchen Reaktionstyp handelt es sich? Skizzieren Sie hier die Struktur des Übergangszustands!

6 Punkte



Anmerkung: Eine Potentialenergiekurve beschreibt die Abhängigkeit der Energie von einer Strukturveränderung entlang der Reaktionskoordinate. Daher sind selbstverständlich für konkret genannte Reaktionen wie hier auch die Strukturen mindestens der Edukte, der Zwischenstufe und der Produkte anzugeben.