

Vorlesung Organische Chemie II, Teil 2, WS 2008/09

Prof. Dr. Christoph A. Schalley

Quickie Nr. 4: Pericyclische Reaktionen

- a) Zeichnen Sie die Molekülorbitale der π -Systeme von Cyclohexadien und cis-2-Buten! Besetzen Sie die Orbitale mit den π -Elektronen der beiden Moleküle und entscheiden Sie, welches Orbital jeweils das HOMO und das LUMO ist!

5 Punkte

Cyclohexadien: exakt analog zum 1,3-Butadien, der Rest des Rings besitzt kein π -System und ist deswegen für die Konstruktion der Orbitale unerheblich. cis-2-Buten: ebenso exakt analog zum Ethen, π - und π^ -Orbital. Wer das jetzt noch nicht kann, sollte es unbedingt nachschlagen... 6 Orbitale * 0,5 Punkte = 3 Punkte; mit Elektronen besetzen = je 0.5 Punkte; HOMO/LUMO zuordnen = je 0.5 Punkte*

- b) Zeichnen Sie nun den Übergangszustand der Diels-Alder-Reaktion dieser beiden Moleküle so, dass klar aus Ihrer Zeichnung hervorgeht, wie sich die beiden Moleküle einander annähern!

1 Punkt

Annäherung der beiden Moleküle so, dass die π -Systeme coplanar liegen

- c) Begründen Sie mit Hilfe der Grenzorbitale, warum diese Diels-Alder-Reaktion thermisch erlaubt ist! Tragen Sie dazu die geeigneten Orbitale in den von Ihnen gezeichneten Übergangszustand ein!

2 Punkte

1 Punkt für die Wahl einer HOMO/LUMO-Paarung

1 Punkt für die richtige Zeichnung mit zwei bindenden Wechselwirkungen

- d) Zeigen Sie analog, dass die [2+2]-Cycloaddition zweier cis-2-Butenmoleküle thermisch verboten ist!

2 Punkte

HOMO/LUMO-Kombi zeichnen für 2 Ethenmoleküle wird vermutlich jeder schaffen. Eine antibindende WW zeigt, dass Reaktion verboten ist. 1 Punkt für richtige ÜZ-Geometrie, 1 Punkt für richtige Orbitalwahl