

Vorlesung Physikalisch-Organische und Supramolekulare Chemie

Prof. Dr. Christoph A. Schalley

Quickie Nr. 3:

In der folgenden Tabelle finden Sie eine Reihe von Säurestärken von Phenolen und Benzoessäuren in Abhängigkeit vom Substituenten X und seiner Position am aromatischen Ring. Korrelieren Sie die Substituentenkonstanten σ_p und σ_m der Phenole mit denen der Säuren (ein Plot ist hier gewünscht)! Da die Substituentenkonstante nicht von der jeweils betrachteten Reaktion abhängen sollte, müsste sich eine lineare Beziehung ergeben. Falls das in Ihrer Auftragsung nicht der Fall sein sollte, finden Sie bitte eine Erklärung für die Abweichungen, die Sie feststellen!

In the following table, a series of acidity constants is given for differently substituted phenols and benzoic acids. Correlate the substituent constants σ_p und σ_m which you obtain for the phenols with those of the acids (a plot is required here)! Since the substituent constants should not depend on the reaction under study, a linear relationship is expected. If that is not the case in your plot, please explain the deviations from linearity!

Substituent X	pK _a of Phenols (XC ₆ H ₄ OH)		pK _a of Benzoic Acids XC ₆ H ₄ COOH	
	<i>meta</i>	<i>para</i>	<i>meta</i>	<i>para</i>
-NO ₂	8.35	7.15	3.45	3.45
-CN	8.61	7.66	3.61	3.56
-Cl	9.02	9.38	3.83	4.00
-H	10.02		4.20	
-Me	10.08	10.20	4.27	4.37
-OMe	9.65	10.19	4.09	4.47