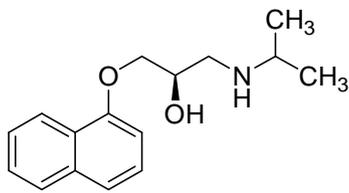


4. Übungen zur VL ORGANISCHE CHEMIE für Studierende der Biologie im SS 2010

1. Identifizieren Sie in folgenden Molekülen die funktionellen Gruppen.

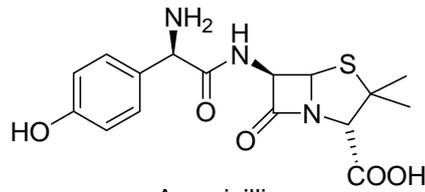
Wozu dienen diese Moleküle und wie

a)



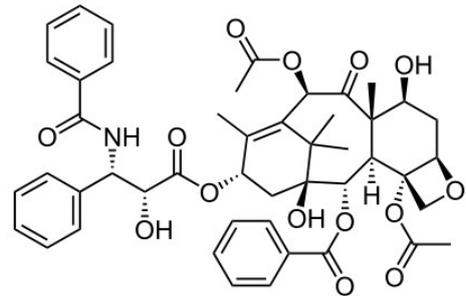
Propranolol

b)



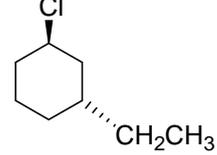
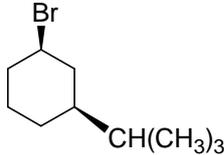
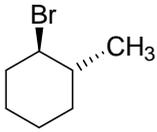
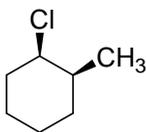
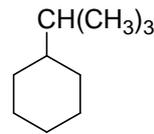
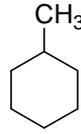
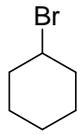
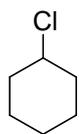
Amoxicillin

c)



Paclitaxel

2. Berechnen Sie die Gleichgewichtslagen bei folgenden Cyclohexan-Derivaten bei den angegebenen Temperaturen (Substituentenenergien¹ und Arrhenius-Gleichung² – siehe Fußnote):



3. Bestimmen Sie aus folgenden Summenformeln den Grad an Ungesättigtheit und schlagen Sie (wenn möglich!)

jeweils **drei Strukturen** vor, bei denen sich die Aufteilung zwischen Doppel-/Dreifachbindungen und Ringstrukturen ändert.

a) $C_6H_{10}NO_2$

b) C_5H_4

c) $C_7H_8OBr_2Cl_2$

d) C_6H_6

e) $C_6H_6O_4$

¹ ΔG für eine 1,3-Wechselwirkung eines axialen Substituenten in Cyclohexan (in kcal/Mol):

F (0.12), Cl (0.25), Br (0.28), CH_3 (0.9), CH_2CH_3 (0.95); $CH(CH_3)_2$ (1.1), $C(CH_3)_3$ (2.7).

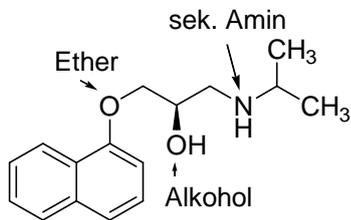
² $K = e^{-\Delta G/RT}$ mit $R = \text{cal/K Mol}$ und $T = \text{Temperatur in Kelvin } (n^\circ\text{C} + 273)$

Antworten:

1. Identifizieren Sie in folgenden Molekülen die funktionellen Gruppen.

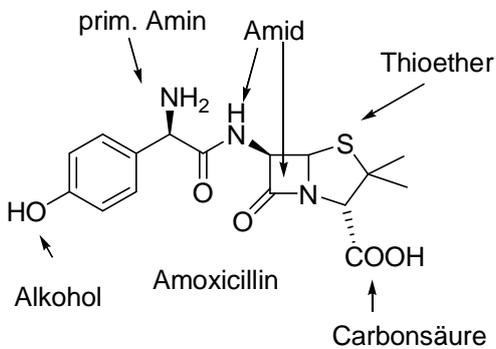
Wozu dienen diese Moleküle und wie

a)



Propranolol

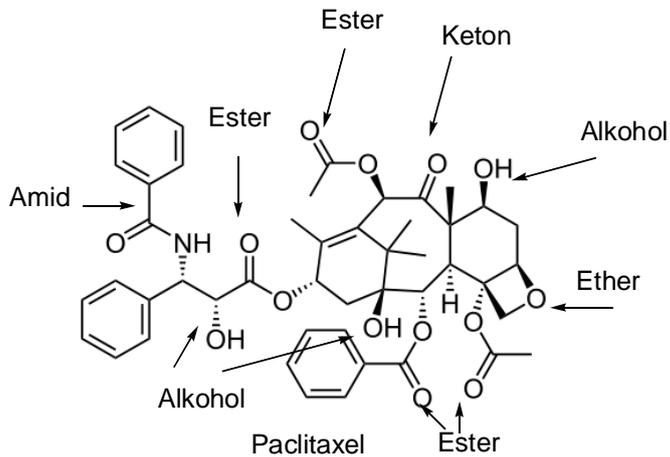
b) Propranolol = Betablocker (Medikament gegen Bluthochdruck)



Amoxicillin

Amocillin = Breitbandantibiotikum

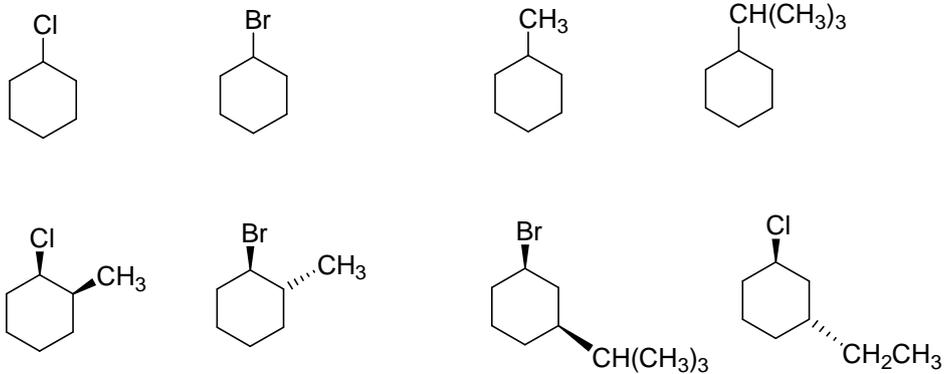
c)



Paclitaxel

Paclitaxel = Krebsmedikament

2. Berechnen Sie die Gleichgewichtslagen bei folgenden Cyclohexan-Derivaten bei den angegebenen Temperaturen (Substituentenenergien³ und Arrhenius-Gleichung⁴ – siehe Fußnote):



Lösungsweg – exemplarisch für Chlorcyclohexan:

$$\Delta_{ax/eq} = 0.25 \text{ kcal/mol}$$

$$\Delta E = 2 \times 0.25 \text{ kcal/mol} = 0.5 \text{ kcal/mol}$$

$$T = 300 \text{ K}; R = 0.002 \text{ kcal/K mol}$$

Es gilt nach der Formel in der Vorlesung:

$$(1) K = e^{-(\Delta E/RT)} = e^{-(0.5 \text{ kcal/mol} / 300 \text{ K} \times 0.002 \text{ kcal/K mol})} = 0.43$$

Des Weiteren ist das Gleichgewicht definiert als das Verhältnis der Konzentration an Stoff A (C_a) geteilt durch die Konzentration an Stoff B (C_b):

$$(2) K = C_a/C_b$$

Da $K = 0.43$ gilt:

$$K = C_a/C_b = 0.43$$

Da wir A und B in % angeben wollen muss gelten:

$$(3) C_a + C_b = 100 \%$$

Auflösen nach C_a und einsetzen von (3) in (2) führt zu:

$$100\%/C_b - 1 = K \text{ bzw. } 100\%/C_b - 1 = 0.43$$

umformen führt zu:

³ ΔG für eine 1,3-Wechselwirkung eines axialen Substituenten in Cyclohexan (in kcal/Mol):
F (0.12), Cl (0.25), Br (0.28), CH_3 (0.9), CH_2CH_3 (0.95); $\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ (1.1), $\text{C}(\text{CH}_3)_3$ (2.7).

⁴ $K = e^{-\Delta G/RT}$ mit $R = \text{cal/K Mol}$ und $T = \text{Temperatur in Kelvin (n } ^\circ\text{C} + 273)$

$$100\%/Cb = 1.43$$

$$100\%/1.43 = Cb$$

70 % = Cb somit gilt durch einsetzen in (3) Ca = 30 %

Die Gleichgewichte der anderen Verbindungen lassen sich analog ausrechnen:

t-Butylcyclohexan: $K = 1.2 \cdot 10^{-4}$; Ca = 0.01 % Cb = 99.99 %

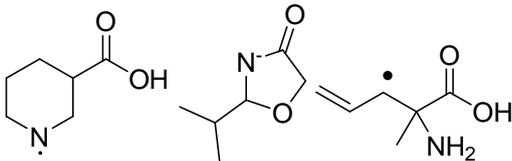
1-Chlor-2-methyl-cyclohexan: $K = 0.022$; Ca = 2 % Cb = 98 %

3. Bestimmen Sie aus folgenden Summenformeln den Grad an Ungesättigtkeit und schlagen Sie (wenn möglich!) jeweils **drei Strukturen** vor, bei denen sich die Aufteilung zwischen Doppel-/Dreifachbindungen und Ringstrukturen ändert.

$$DBA = \frac{2 \cdot \#(4\text{-wertige Atome}) + \#(3\text{-wertige Atome}) - \#(1\text{-wertige Atome})}{2}$$

a) $C_6H_{10}NO_2$

$$DB\ddot{A} = (2 \times 6 - 1 \times 10 + 1 \times 1 + 2) / 2 = 2.5$$



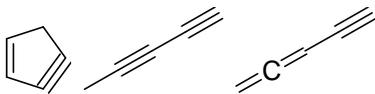
radikal

anion

radikal

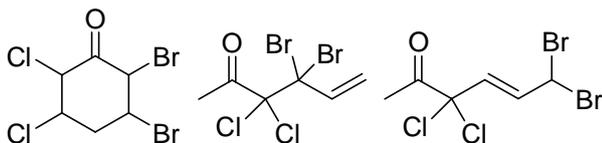
b) C_5H_4

$$DB\ddot{A} = (2 \times 5 - 1 \times 4 + 2) / 2 = 4$$



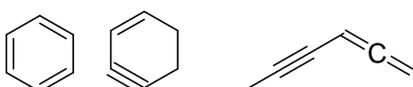
c) $C_7H_8OBr_2Cl_2$

$$DB\ddot{A} = (2 \times 7 - 1 \times 12 + 2) / 2 = 2$$



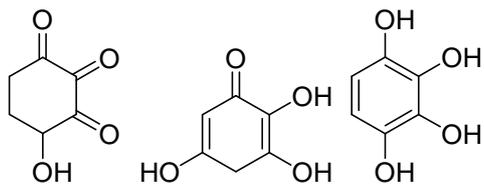
d) C_6H_6

$$DB\ddot{A} = (2 \times 6 - 1 \times 6 + 2) / 2 = 4$$



e) $C_6H_6O_4$

$$DB\ddot{A} = (2 \times 6 - 1 \times 6 + 2) / 2 = 4$$



This document was created with Win2PDF available at <http://www.win2pdf.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.
This page will not be added after purchasing Win2PDF.