

Zusammenarbeit mit der HTW Dresden – automatisierte Fragenpool-Generation

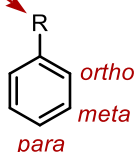
Die Idee ist die folgende: Mit der Möglichkeit einen Substituenten am Benzol automatisch variieren zu lassen (siehe ca. 15 Variationsmöglichkeiten im „Anhang“), kann man das Produkt einer Reaktion vorhersagen. Dies ist dann die Aufgabe der Studierenden und zugleich des Programms, welches dann das richtige Produkt erkennt und bewerten kann.

Das Programm müsste also von den entsprechenden Ausgangsstoffen den Ort der Reaktion ableiten können.

Wichtig: Es gibt eine weitere Matrix: Neben der Variation der Ausgangsstoffe kann man auch die eigentliche Reaktion, die am Ausgangsstoff durchgeführt wird, variieren. Ich habe das mit nur einer Reaktion gemacht, deswegen wird in meinem Beispiel immer nur ein Brom-Atom übertragen. Da gibt es aber noch einmal die Variationsmöglichkeit von knapp 10 Reaktionen, die dann auch alle vorhersagbar wären und somit die Aufgabe noch deutlich breiter aufstellen könnte. Das wäre ideal.

1. Grundlegende Idee/Fragestellung: Kann man die von der Informatik angewandten Algorithmen sinnvoll nutzen, um eine große Anzahl von Aufgaben in der organischen Chemie zu generieren? Herausforderung hierbei ist, dass die automatisch generierten Aufgaben auch „sinnvolle“ chemische Strukturen enthalten.
2. Idee hier: Wir nehmen eine chemische Reaktion, die durch relativ klare „Regeln“ beschrieben wird, und lassen aufgrund dieser „Regeln“ dann die Aufgaben generieren.
3. Fallbeispiel: Reaktionen im Bereich der „elektrophilen aromatischen Substitution“, da diese nach relativ gut verstandenen und vor allen Dingen chemisch vorhersagbaren Regeln ablaufen.
4. Fragetyp: Gegeben ist ein einfach substituiertes Benzolderivat.
 - a) Geben Sie den Ort der Zweitsubstitution in einer elektrophilen aromatischen Substitution an!
 - b) (hier weiß ich nicht, ob das nicht schon zu schwer ist) Zeichnen Sie das zu erwartende Hauptprodukt. (das mit dem Hauptprodukt ist wichtig, weil in der Praxis immer Mischungen zu erwarten sind, so macht man die Aufgaben valider)
 - c) Eventuell mögliche Bonusfrage: Erwarten Sie eine Überreaktion des Erstprodukts unter den gegebenen Reaktionsbedingungen

Gruppe R müsste durch das Programm generiert werden. Die Studierenden sollen dann voraussagen (ob die Reaktion in *ortho*-, *meta*- oder *para*-Position stattfindet

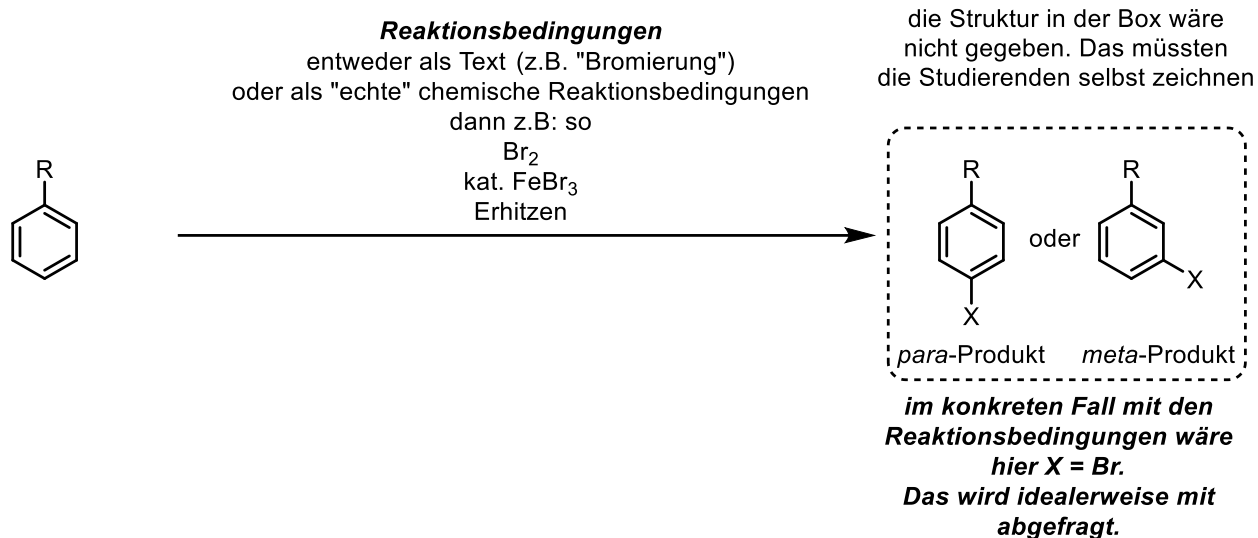



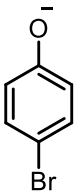
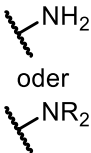
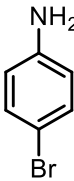
Statt "ortho/meta/para" könnten auch Zahlen verwendet werden, idealerweise könnten aber gleich diese Ausdrücke mitbenutzt werden. (Eine Sache vorneweg: "ortho" tritt alleine als Antwort nie auf. Es ist chemisch gesehen immer nur das Nebenprodukt.

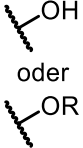

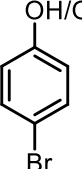
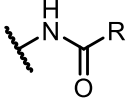
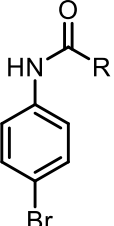
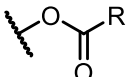
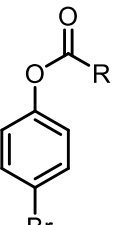
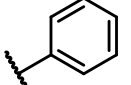
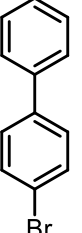

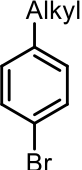
Bei diesen Aufgaben überprüft man in a), ob die Studierenden die „Regeln“ verstanden haben und den Ersts substituenten sinnvoll chemisch einordnen können. Unter b) überprüft man, ob die Studierenden auch die eigentliche Reaktion verstanden haben und das entsprechende Produkt korrekt zeichnen können. Das ist eine etwas andere Anforderung als in a). Unter c) wird es dann



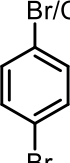


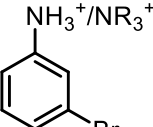

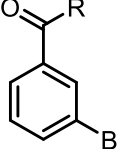

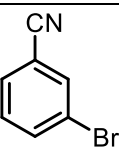
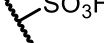
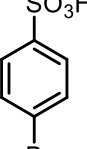

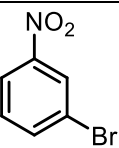
deutlich angewandter, das ist dann eher für die Praxis wichtig und hier sicherlich eher ein Add-on.

5. Hier ist eine Liste mit Gruppen R, die durch das Programm vorgegeben werden müssten, sowie die korrekte Antwort, die die Studierenden geben müssen. Im leichten Fall müssten die Antworten nur textlich „*meta*“ oder „*para*“ sein, idealerweise zeichnen die Studierenden aber die korrekte Struktur des Produkts. In diesem Fall müsste man die Reaktionsbedingungen noch mit dazuschreiben. Diese habe ich weiter unten aufgeschrieben. Die Aufgaben müssten dann so aussehen:



| Erstsubstituent R | (intern: Effekte, die durch R ausgeübt werden) | Zu erwartendes Hauptprodukt (hier immer im Fall der Bromierung, andere Reaktionen sind möglich!) | Dementsprechend: an welcher Position findet die Reaktion statt? | Wird eine Überreaktion erwartet? | |
|---|--|--|---|----------------------------------|--|
|  | +M |  | para | nein | |
|  NH ₂ oder NR ₂ | +M, -I |  | para | nein | Das R im Ausgangsstoff muss das gleiche R sein wie im Produkt (hier gelten eigene Regeln, vielleicht erstmal nur mit NH ₂ arbeiten) |

| | | | | | |
|--|--------|---|------|------|---|
|  oder  | +M, -I |  | para | nein | Das R im Ausgangsstoff muss das gleiche R sein wie im Produkt (hier gelten eigene Regeln, vielleicht erstmal nur mit OH arbeiten) |
|  | +M, -I |  | Para | nein | Das R im Ausgangsstoff muss das gleiche R sein wie im Produkt (hier gelten eigene Regeln, vielleicht erstmal nur mit R=Me arbeiten) |
|  | +M, -I |  | Para | nein | Das R im Ausgangsstoff muss das gleiche R sein wie im Produkt (hier gelten eigene Regeln, vielleicht erstmal nur mit R=Me arbeiten) |
|  | +M, -I |  | Para | nein | |
|  | +I |  | Para | Nein | Dieser Substituent macht nur Sinn, wenn man definieren kann, was eine „Alkylgruppe“ ist, sonst arbeitet man erstmal nur mit Methyl, Ethyl oder Propyl als Substituent |

| | | | | | |
|--|--------|---|------|------|---|
|  oder  | +M, -I |  | para | nein | |
|  oder  | -I |  | Meta | Nein | Das R im Produkt muss das gleiche sein, wie das R im Ausgangsstoff. Auch hierfür gibt es „chemische“ Einschränkungen. Sonst einfach mit R = Me, Et, Pr arbeiten |
|  | -M, -I |  | Meta | nein | Das R im Produkt muss das gleiche sein, wie das R im Ausgangsstoff. Auch hierfür gibt es „chemische“ Einschränkungen. Sonst einfach mit R = Me, Et, Pr arbeiten |
|  | -M, -I |  | Meta | nein | |
|  | -M, -I |  | Meta | nein | |
|  | -M, -I |  | Meta | nein | |