



ACOC I Übungsstunde: Konformationsanalyse II

Dominik Götz
04.12.2023



Outline

1. Feedback an Euch
2. Prüfungsaufgabe: Symmetrie
3. Nachbesprechung
Homodesmische Reaktion
Nachbesprechung Serie 10 Aufgabe 5
4. Theorie für Serie 11
5. Serie 11
6. Feedback
7. Mental Health

Outline

1. Feedback an Euch
2. Prüfungsaufgabe: Symmetrie
3. Nachbesprechung
 - Homodesmische Reaktion
 - Nachbesprechung Serie 10 Aufgabe 5
4. Theorie für Serie 11
5. Serie 11
6. Feedback
7. Mental Health

Formsache

- Wir haben es bald geschafft, nur noch 2 Serien. Als Belohnung, wenn ihr die letzte Serie macht, wird es etwas Besseres als Schokobons geben.
- In der letzten Stunde werden wir ein zusammenfassendes Kahoot machen und darüber sprechen, was die wichtigen Themen des Semesters waren und wie man auf sie lernt.
- Thermo Serie wurde gut gemacht, bin stolz auf euch!
- Wenn ihr etwas rechnet, bitte klatscht nicht einfach nur die Lösung hin, das gibt keine Punkte in der Prüfung.
- Und wenn ihr etwas rechnet, bitte gebt an, was das ist, und schreibt einmal die Gleichung ohne Zahlen auf. Achtet einfach auf die Form, wie ihr das angebt!

Outline

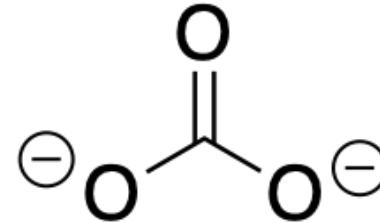
1. Feedback an Euch
2. Prüfungsaufgabe: Symmetrie
3. Nachbesprechung
Homodesmische Reaktion
Nachbesprechung Serie 10 Aufgabe 5
4. Theorie für Serie 11
5. Serie 11
6. Feedback
7. Mental Health

Aufgabe

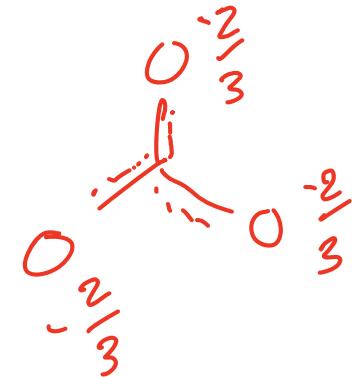
Wir skippen die Punktgruppe, aus Zeitgründen.



A

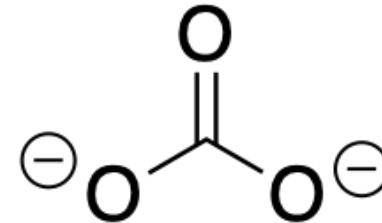


B



Molekül	Symmetrieelemente								Punktgruppe
	E	C ₂	C ₃	σ _h	σ _v	S ₃	S ₄	i	
A									
B									

Lösung



A

B

Molekül	Symmetrieelemente								Punktgruppe
	E	C ₂	C ₃	σ _h	σ _v	S ₃	S ₄	i	
A	1	∞	∞		∞				C _{∞v}
B	1	3	1	1	3	1			D _{3h}

Outline

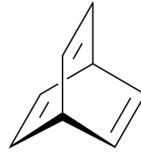
1. Feedback an Euch
2. Prüfungsaufgabe: Symmetrie
3. Nachbesprechung
Homodesmische Reaktion
Nachbesprechung Serie 10 Aufgabe 5
4. Theorie für Serie 11
5. Serie 11
6. Feedback
7. Mental Health

Homodesmische Reaktion

Wir waren auf der TA Seite etwas unsicher mit der Definition der Homodesmischen Reaktionen und haben uns jetzt auf die Folgende geeinigt:

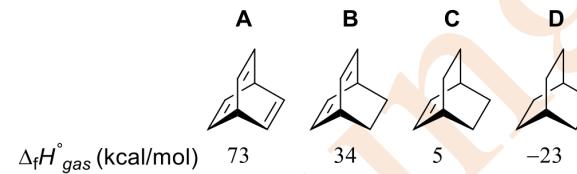
- a: Gleiche Zahl und Art der Bindungen ($\text{Csp}3\text{-}\text{Csp}3$, $\text{Csp}2=\text{Csp}2$, $\text{Csp}2\text{-}\text{Csp}2$,...)
- b: Gleiche Anzahl und Art der Kohlenstoffe, mit 0, 1, 2 oder 3 Wasserstoffen.

Aufgabe: Barrelen

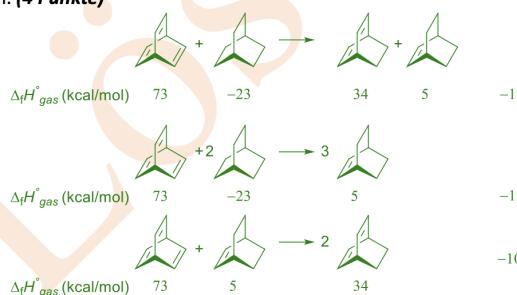


Barrelen

Obwohl die Doppelbindungen ziemlich weit auseinander liegen, wurde eine Überlappung zwischen den π -Orbitalen vorgeschlagen. Dieses spezielle System mit sechs π -Elektronen könnte daher dem Molekül einen aromatischen Charakter verleihen (Homoaromatizität).



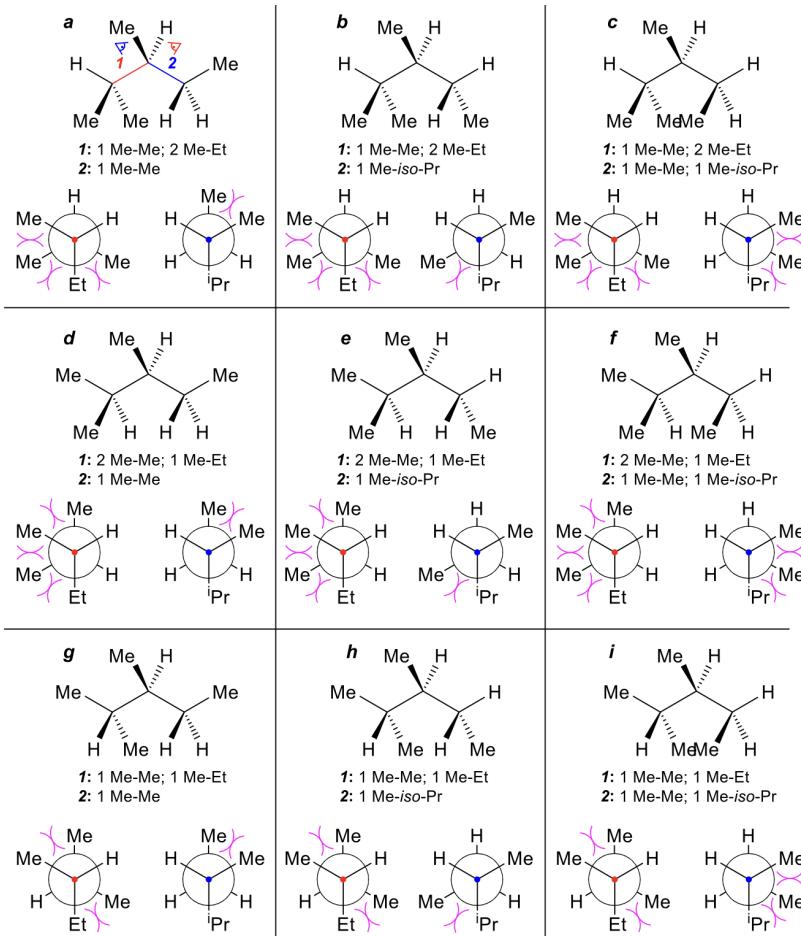
5.1.1 Formulieren Sie mit Hilfe der gegebenen Verbindungen (A-D) eine **homodesmische Reaktion** für Barrelen (A), um den Beitrag einer möglichen Homoaromatizität herauszufinden. **(4 Punkte)**



Organic Chemistry: Theory, Reactivity and Mechanisms in Modern Synthesis. 4.7.6
"Barrelen effect" P. 313. Standardbildungsenthalpien S58 Table 1.A.3

Serie 10 Aufgabe 5

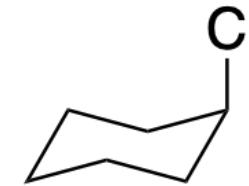
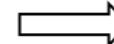
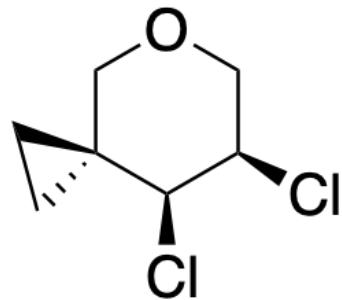
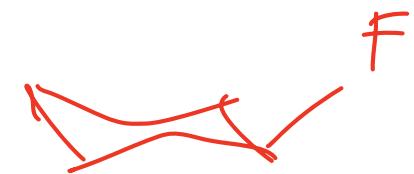
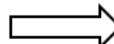
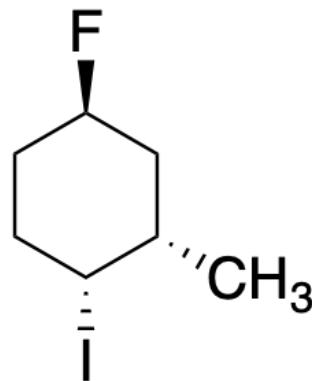
1
2



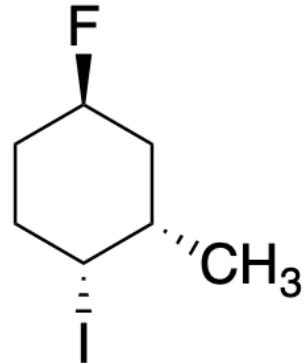
Outline

1. Feedback an Euch
2. Prüfungsaufgabe: Symmetrie
3. Nachbesprechung
Homodesmische Reaktion
Nachbesprechung Serie 10 Aufgabe 5
4. Theorie für Serie 11
5. Serie 11
6. Feedback
7. Mental Health

Sesselkonformationen zeichnen

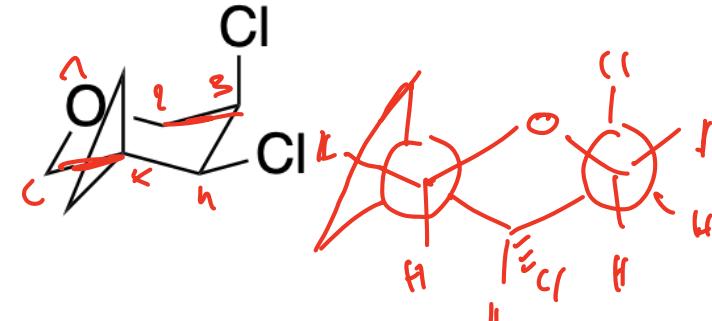
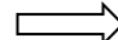
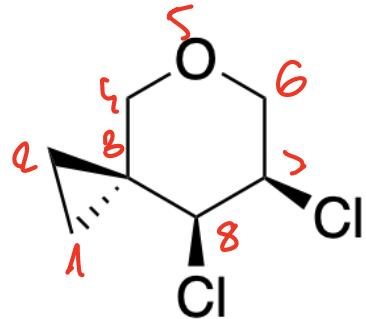
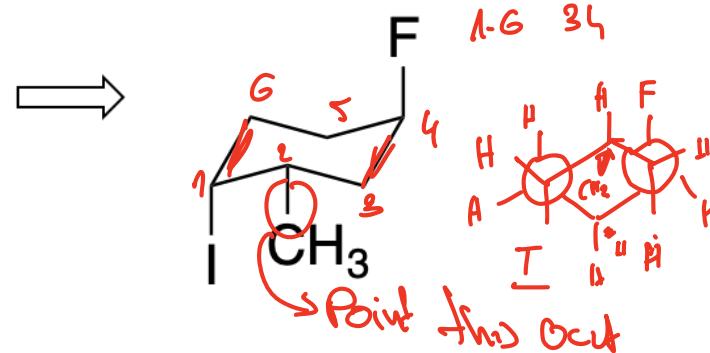


Sesselkonformationen zeichnen



(1R,2S,4R)-4-Fluor-1-methylcyclohexane

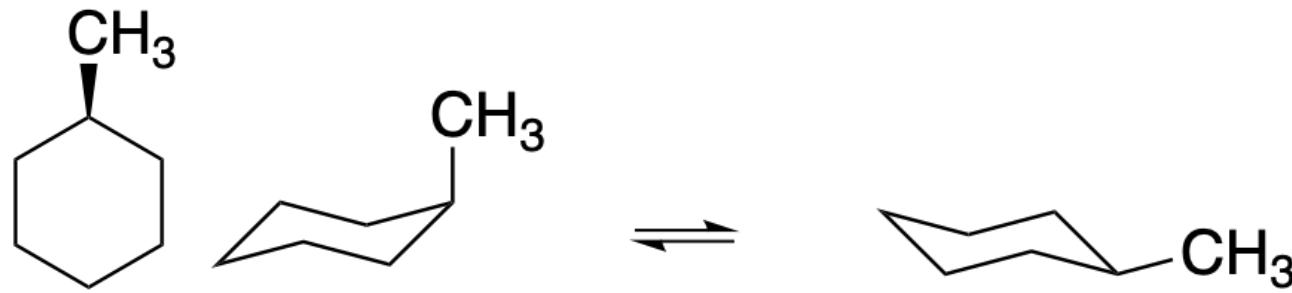
1-methylcyclohexane



(7R,8S)-7,8-dichloro-5-oxaspiro[2.5]octane

A-Values

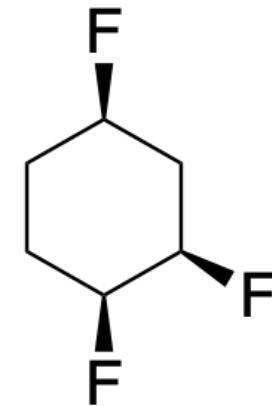
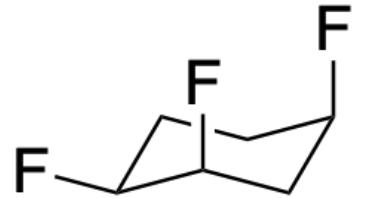
Ist die Energie, die es braucht, um einen Substituenten in die axiale Position zu flippen.



$A_1 \neq 0 \text{ cal/mol}$

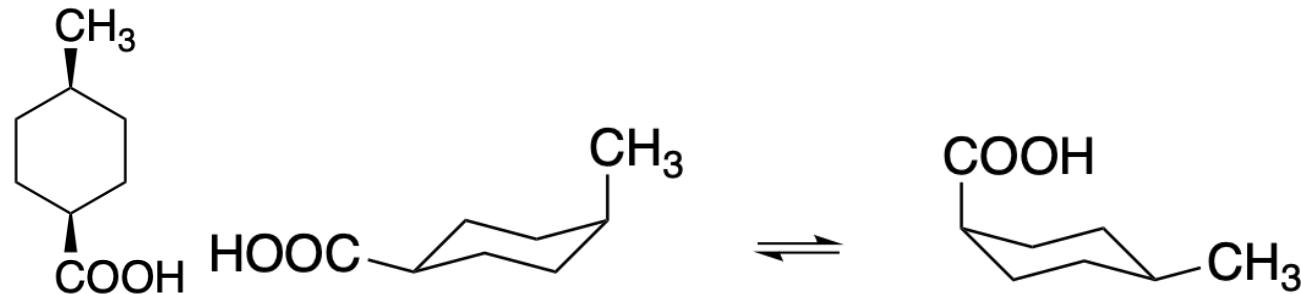
Ringflips

Was ist hier falsch?



Ringflip

- Me: 1.7 kcal/mol
- COOH: 1.2 kcal/mol
- COO⁻: 2.3 kcal/mol
- Mit $\Delta G^\circ = -RT \cdot \ln(K)$ könnt ihr dann die Gleichgewichtskonstante berechnen. Oder ihr könnt den Einfluss des pHs auf die Gleichgewichtskonstante bestimmen.



Outline

1. Feedback an Euch
2. Prüfungsaufgabe: Symmetrie
3. Nachbesprechung
Homodesmische Reaktion
Nachbesprechung Serie 10 Aufgabe 5
4. Theorie für Serie 11
5. Serie 11
6. Feedback
7. Mental Health

Priorität Serie 11

1. 1
2. 4
3. 5
4. 6
5. 2
6. 3

Tipps Serie 11

- Keine Tipps für diese Serie ;)

Outline

1. Feedback an Euch
2. Prüfungsaufgabe: Symmetrie
3. Nachbesprechung
Homodesmische Reaktion
Nachbesprechung Serie 10 Aufgabe 5
4. Theorie für Serie 11
5. Serie 11
6. Feedback
7. Mental Health

Feedback

- Bitte füllt wieder das Feedback  aus, damit ich euch besser unterrichten kann :)

Outline

1. Feedback an Euch
2. Prüfungsaufgabe: Symmetrie
3. Nachbesprechung
Homodesmische Reaktion
Nachbesprechung Serie 10 Aufgabe 5
4. Theorie für Serie 11
5. Serie 11
6. Feedback
7. Mental Health

Mental Health

- Unter diesem Link  findet ihr Hilfe, falls es euch nicht gut geht.

**Vielen Dank für eure
Aufmerksamkeit!**

Dominik Götz dgoetz@ethz.ch