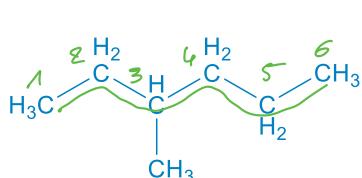


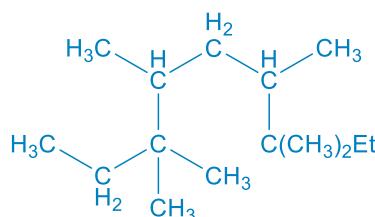
1 Strukturaufklärung organischer Verbindungen

1.1 Nomenklatur

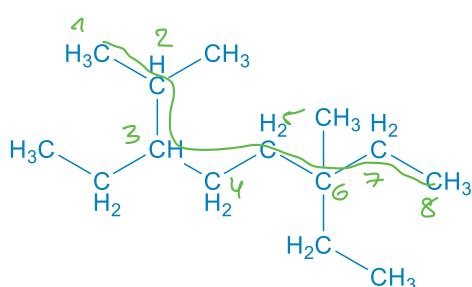
1. Benennen Sie folgende Kohlenwasserstoffe nach IUPAC.



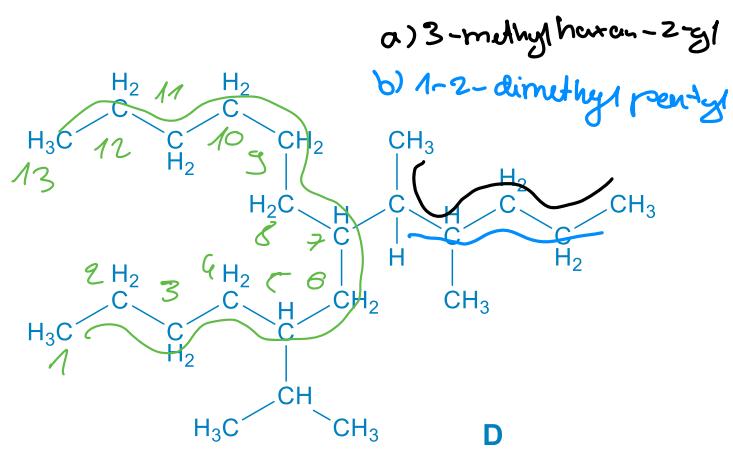
A



B



C



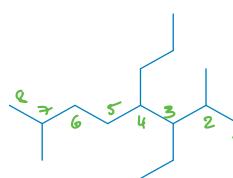
D

- A: 3-Methylhexan
 B: 3,3,4,6,7,7-Hexamethylnonan
 C: 3,6-Diethyl-2,6-dimethyloctan
 D: 7-(1,2-Dimethylpentyl)-5-isopropyltridecan oder
 5-Isopropyl-7-(3-methylhexan-2-yl)tridecan

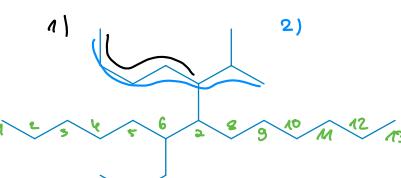
2. Die folgenden Namen sind gemäss IUPAC nicht korrekt. Wie müssten die korrekten Namen lauten?

- | | |
|-----------------------------------|----------------------------------|
| (a) 3-Propylhexan | (a) 4-Ethylheptan |
| (b) 3,5,6,7-Tetramethylnonan | (b) 3,4,5,7-Tetramethylnonan |
| (c) 3-Isopropyl-5,5-dimethyloctan | (c) 3-Ethyl-2,5,5-trimethyloctan |
| (d) 2,2-Dimethyl-3-ethylpentan | (d) 3-Ethyl-2,2-dimethylpentan |
| (e) 3-Ethyl-6,6-dimethyloctan | (e) 6-Ethyl-3,3-dimethyloctan |
| (f) 5-Isopropyl-4-propyloctan | (f) 4-Isopropyl-5-propyloctan |

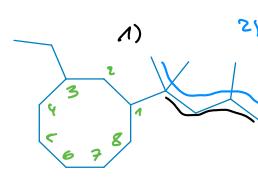
3. Benennen Sie folgende Kohlenwasserstoffe nach IUPAC.



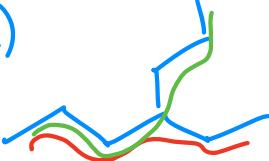
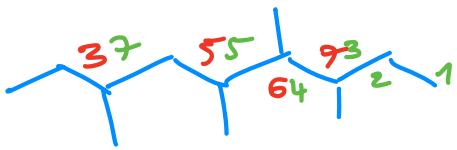
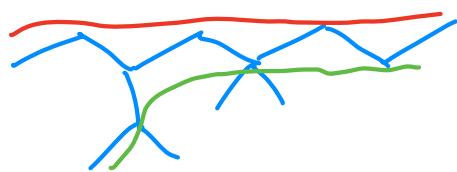
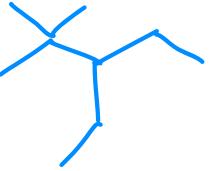
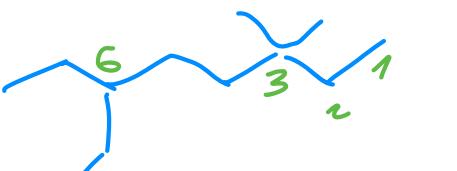
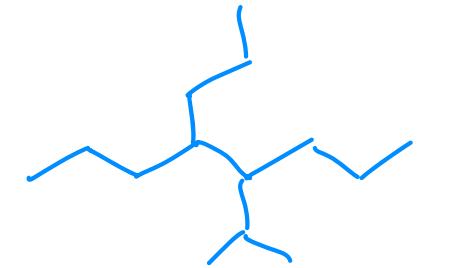
a



b



c

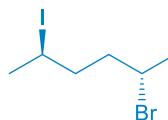
- a)  gibt also längere Hauptkette
- b)  falscher Lokantensatz
- c)  weniger verzweigte Seitenkette
- d)  alphabetisch falsch, "di" Präfix wird ignoriert
- e)  falscher Lokantensatz
- f)  kleinere lokante für verzweigter Kette

- (a) 3-Ethyl-2,7-dimethyl-4-propyloctan
 (b) 7-(1-Isopropylpentyl)-6-propyltridecan oder
7-(2-Methylheptan-3-yl)-6-propyltridecan
 (c) 1-Ethyl-3-(1,1,3-trimethylbutyl)cyclooctan oder
1-(2,4-Dimethylpentan-2-yl)-3-ethylcyclooctan

4. Benennen Sie die folgenden Verbindungen nach IUPAC (ohne Stereozentren).



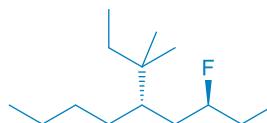
a



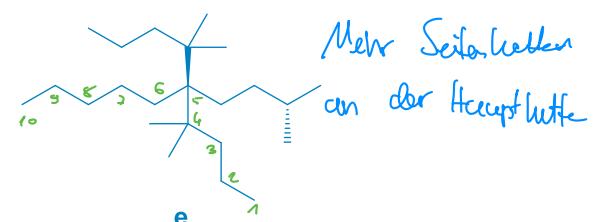
b



c



d



e

- (a) 2-Chlorpentan
 (b) 2-Brom-5-iodhexan *alphabetisch besser => kleinere Lohnanteile*
 (c) 4-(1,1-Dimethylethyl)heptan / 4-*tert*-Butylheptan
 (d) 5-(1,1-Dimethylpropyl)-3-fluoronan / 3-Fluor-5-*tert*-pentylnonan
 (e) 5-(1,1-Dimethylbutyl)-4,4-dimethyl-5-(3-methylbutyl)decan /
 5-Isopentyl-4,4-dimethyl-5-(2-methylpentan-2-yl)decan

1.2 Strukturaufklärung organischer Verbindungen

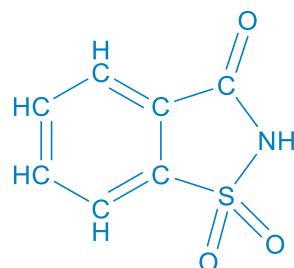
1. Was können Sie über die Struktur der gesättigten Kohlenwasserstoffe C_7H_{14} und $C_{10}H_{18}$ sagen?

Berechne Doppelbindungäquivalente mit DBA = $\frac{2 \cdot (\#C) + (\#N) - (\#H) - (\#X) + 2}{2}$ *x alle 1 bindigen atom (H oder F z.B.)*

Vergleicht man ihre Summenformeln C_7H_{14} (= C_nH_{2n}) und $C_{10}H_{18}$ (= C_nH_{2n-2}) mit der allgemeinen Formel für offenkettige Alkane (= C_nH_{2n+2}), so folgt daraus, dass sie (a) einen bzw. (b) zwei Ringe enthalten müssen. *Ring zählt als 1 DBA*

Da gesättigt => Ringe

2. Berechnen Sie die Elementarzusammensetzung (Massenanteile) von Saccharin:



Summenformel: $C_7H_5NO_3S$. Elementarzusammensetzung: C: 45.90%; H: 2.75%; N: 7.65%; O: 26.20%; S: 17.50%.

1) gesamt Masse: $m_{tot} \approx 183u$

2) Masse für Elemente: $m(C) \approx 84u$ $m(H) \approx 5u$ $m(N) \approx 14$

$m(O) \approx 48u$ $m(S) \approx 32u$

3. Die Verbrennung von 15.00 mg Cumarin liefert 40.65 mg Kohlendioxid und 5.55 mg Wasser. Berechnen Sie die Verhältnisformel. Hinweis: Cumarin enthält laut qualitativer Analyse C, H und O. Wie können Sie Ihr Ergebnis überprüfen?

Aus der Verbrennungsanalyse ergibt sich:

0.01500 g Cumarin enthalten $(0.04065:44.01) = 9.237 \cdot 10^{-4}$ mol C sowie $2 \cdot (0.00555:18.02) = 6.160 \cdot 10^{-4}$ mol H; oder $9.237 \cdot 10^{-4} \cdot 12.01 = 1.109 \cdot 10^{-2}$ g C und $6.160 \cdot 10^{-4} \cdot 1.008 = 6.209 \cdot 10^{-4}$ g H.

Daraus ergibt sich die in der Probe enthaltene Masse an Sauerstoff zu $0.01500 \text{ g} - 1.109 \cdot 10^{-2} \text{ g} - 6.209 \cdot 10^{-4} \text{ g} = 3.289 \cdot 10^{-3} \text{ g}$. Diese Menge entspricht $3.289 \cdot 10^{-3}:16.00 = 2.056 \cdot 10^{-4}$ mol O. *Der Rest des Sauerstoff kommt aus der Verbrennung*

Daraus erhält man das molare Verhältnis C:H:O = $9.237 \cdot 10^{-4} : 6.160 \cdot 10^{-4} : 2.056 \cdot 10^{-4}$ oder 9:6:2. Die Verhältnisformel lautet demzufolge $\text{C}_9\text{H}_6\text{O}_2$.

4. Eine Verbindung hat folgende Massenanteile der Elemente: 58.54% C, 4.09% H, 11.38% N und 25.99% O. Berechnen Sie die Verhältnisformel. Kann man sich damit auf eine genaue Summenformel festlegen? Hilft die Kenntnis der Doppelbindungsäquivalente (im vorliegenden Fall: 5) weiter?

Aus der prozentualen Zusammensetzung ergibt sich die Verhältnisformel $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$. Eine Aussage bzgl. der Summenformel dieser Verbindung kann man damit nicht machen, da sie auch ein ganzzahliges Vielfaches der Verhältnisformel betragen kann. Weiss man aber, dass die Struktur 5 Doppelbindungsäquivalente beinhaltet, so kann man sagen, dass auch die Summenformel $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$ lauten muss ($\text{C}_{12}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_4$ entspräche bspw. 9 Doppelbindungsäquivalenten).

1.2.2

Cumarin



$$15.00 \text{ mg} \quad 5.55 \text{ mg} \quad 40.65 \text{ mg}$$

$$m(H_2O) \approx 18 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \quad w(H) = \frac{2 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{18 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,11 \\ \hookrightarrow \text{gewichtsprozent}$$

$$\Rightarrow m(H_2O) \cdot w(H) = 0,610 \text{ mg} = m(H)$$

$$m(CO_2) \approx 44 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \quad w(C) = \frac{12 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{44 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,27$$

$$m(CO_2) \cdot w(C) = 10,8 \text{ mg} = m(C)$$

$$m(O) = 15.00 \text{ mg} - m(C) - m(H) \approx 3,49 \text{ mg}$$

$$n(C) = \frac{m(C)}{M(C)} = \frac{10,8 \text{ mg}}{12 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,91 \text{ mmol}$$

$$n(H) = \frac{m(H)}{M(H)} = \frac{0,61 \text{ mg}}{1 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,6 \text{ mmol}$$

$$n(O) = \frac{m(O)}{M(O)} = \frac{3,49 \text{ mg}}{16 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,22 \text{ mmol}$$

Verhältnis von
g: 6:2

$\Rightarrow C_6 H_6 O_2$

1.2.4

nehmen ein Molekül wiegt 100g

$$\Rightarrow m(C) = 58,54 \text{ g} \quad M(C) = 12,01 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$m(H) = 4,00 \text{ g} \quad M(H) = 1,01 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$m(N) = 11,38 \text{ g} \quad M(N) = 14,01 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$m(O) = 25,99 \text{ g} \quad M(O) = 16,00 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$n(C) = 4,87 \text{ mol}$$

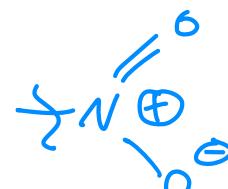
$$n(H) = 4,05 \text{ mol} \quad \frac{n(C)}{n(H)} \approx 6 \quad \frac{n(H)}{n(O)} \approx 5 \quad \frac{n(O)}{n(H)} \approx 2$$

$$n(N) = 0,81 \text{ mol}$$

$$n(O) = 1,63 \text{ mol} \quad \Rightarrow C_6H_5N$$

4 DBA für Benzol: 3 für 3DB 1/1 für Ring



knüpft noch $\text{NO}_2 \Rightarrow$  \wedge DBA

