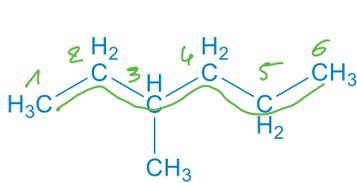


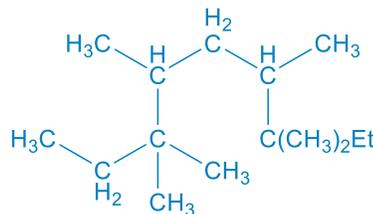
# 1 Strukturaufklärung organischer Verbindungen

## 1.1 Nomenklatur

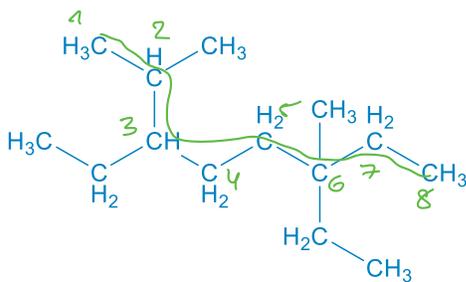
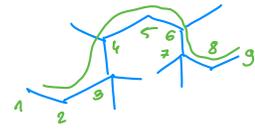
1. Benennen Sie folgende Kohlenwasserstoffe nach IUPAC.



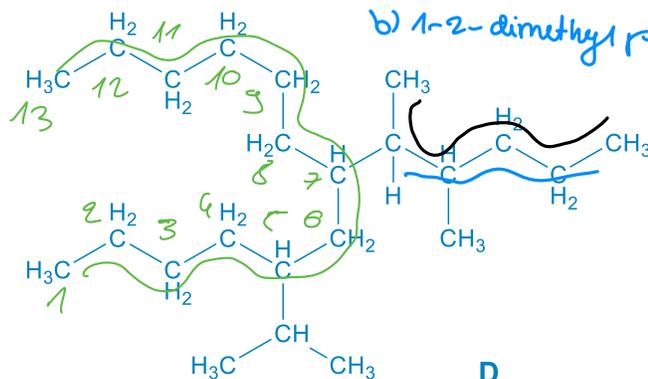
A



B



C



D

a) 3-methylhexan-2-yl

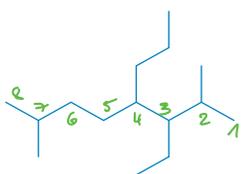
b) 1,2-dimethylpentyl

- 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

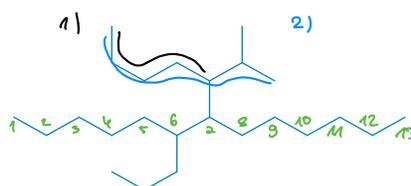
2. Die folgenden Namen sind gemäss IUPAC nicht korrekt. Wie müssten die korrekten Namen lauten?

- |                                   |                                  |
|-----------------------------------|----------------------------------|
| (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    |

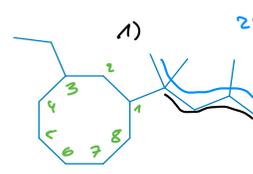
3. Benennen Sie folgende Kohlenwasserstoffe nach IUPAC.



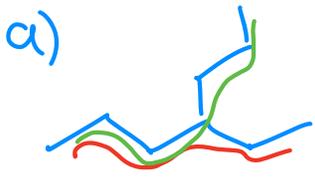
a



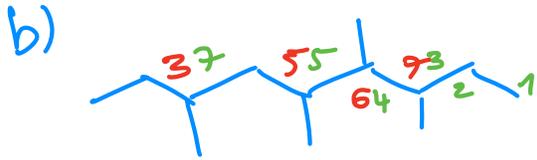
b



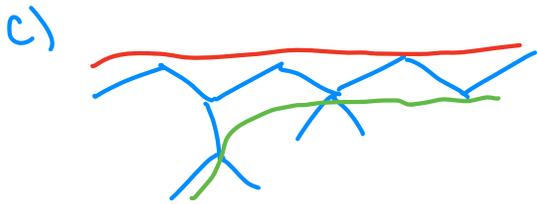
c



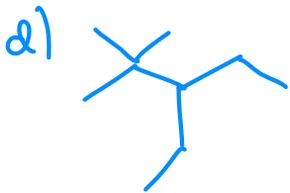
gibt also längere Hauptkette



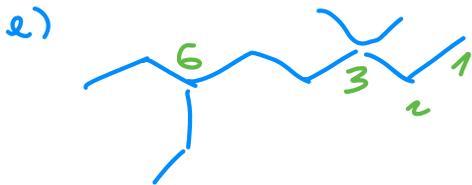
falscher Lokantensatz



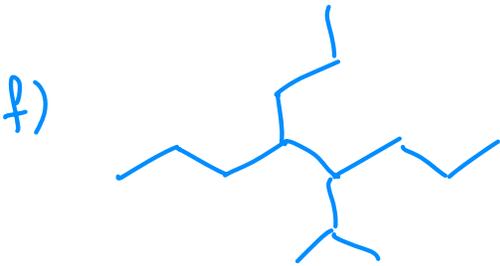
weniger verzweigte Seitenkette



alphabetisch falsch, "di" Präfix  
wird ignoriert



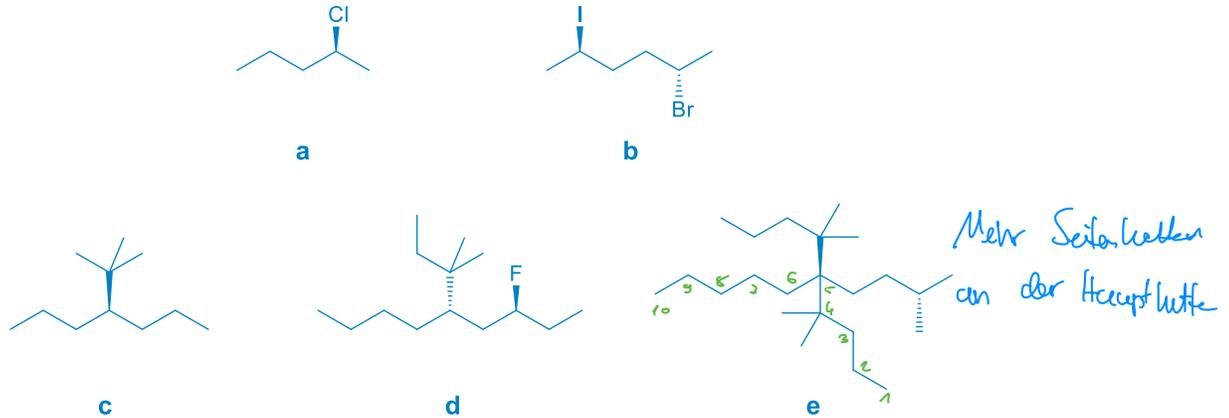
falscher Lokantensatz



kleinere Lokante für verzweigte  
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) 2-Chlorpentan  
 (b) 2-Brom-5-iodhexan *alphabetisch besser => kleinere Lokante*  
 (c) 4-(1,1-Dimethylethyl)heptan / 4-*tert*-Butylheptan  
 (d) 5-(1,1-Dimethylpropyl)-3-fluorononan / 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

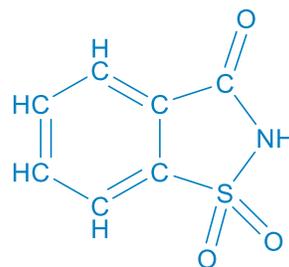
1. Was können Sie über die Struktur der gesättigten Kohlenwasserstoffe  $C_7H_{14}$  und  $C_{10}H_{18}$  sagen?

*Berechne Doppelbindungsäquivalente mit DBA =  $\frac{2 \cdot (\#C) + (\#N) - (\#H) - (\#X) + 2}{2}$  x alle 1 bindigen Atome (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:  $m(C) \approx 84u$   $m(H) \approx 5u$   $m(N) \approx 14u$   
 $m(O) \approx 48u$   $m(S) \approx 32u$*

3) Dividieren:  $\frac{m(C)}{m_{\text{mol}}}$

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

Cumolol



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

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

↳ gewichtsprozent

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

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

$$m(CO_2) \cdot \omega(C) = 10,9 \text{ mg} = m(C)$$

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

$$n(C) = \frac{m(C)}{M(C)} = \frac{10,9 \text{ mg}}{12 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,91 \text{ mmol}$$

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

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

Verhalten von  
g: 6:2



# 1.2.4

nehme ein Molekül wiegt 100g

$$\Rightarrow m(C) = 58.54 \text{ g} \quad M(C) = 12.01 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$m(H) = 4.09 \text{ g} \quad M(H) = 1.01 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$m(N) = 11.38 \text{ g} \quad M(N) = 14.01 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$m(O) = 25.99 \text{ g} \quad M(O) = 16.00 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$n(C) = 4.87 \text{ mol}$$

$$n(H) = 4.05 \text{ mol}$$

$$n(N) = 0.81 \text{ mol}$$

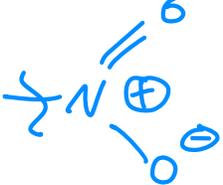
$$n(O) = 1.63 \text{ mol}$$

$$\frac{n(C)}{n(N)} \approx 6 \quad \frac{n(H)}{n(N)} \approx 5 \quad \frac{n(O)}{n(N)} \approx 2$$



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



bringt noch  $\text{NO}_2 \Rightarrow$   , / DBA

