

Übung 1 zur Vorlesung Aromaten und Heteroaromaten

1. Synthetisieren Sie Pseudopelletierin aus Acetondicarbonsäuredimethylester, Methylamin und Glutarialdehyd und wandeln Sie es in 5 Stufen in Cyclooctatetraen um.
2. Geben Sie sämtliche Symmetrieelemente des Benzols an.
3. Geben Sie sämtliche Kekule-Formeln des Phenanthrens und des Anthracens an. Welche Konsequenz ersehen Sie daraus für die Reaktivität an den Atomen 9,10 im Verhältnis zu den anderen Atomen?
4. Berechnen Sie die π -Bindungsordnung zwischen den C-Atomen 1,2 und die π -Ladungsdichte am C-1

Übung 2 zur Vorlesung Aromaten und Heteroaromaten

1. Erklären Sie die Tieffeld-Verschiebung der ortho-Protonen in Triphenylen ($\delta = 8.54$) im Verhältnis zu Diphenyl ($\delta = 7.63$)
2. Berechnen Sie die Resonanzenergie des Benzols aus a) den Atomisierungsenergien und mittleren Bindungsenergien und der Bildungsenthalpie des Benzols sowie aus b) der Hydrierwärme des Benzols und des Cyclohexens und stellen Sie die Energieschemata auf.

A: Atomisierungsenergie: $C_{\text{Graphit}} \rightarrow C_{\text{Atom}} : \Delta H_f = 716 \text{ kJ/mol}$; $H_2 \rightarrow H_{\text{Atom}} \Delta H_f = 218 \text{ kJ/mol}$
Bindungsenergien: C-C: $\Delta H_f = -348 \text{ kJ/mol}$; C=C : $\Delta H_f = -611 \text{ kJ/mol}$; C-H: $\Delta H_f = -415 \text{ kJ/mol}$

Cyclohexatrien: Gesamtbindungsenergie = $6 (\text{CH}) + 3 (\text{C-C}) + 3 (\text{C=C}) = .2490 + -1833 + -1044 = -5367$

Gesamtatomisierungsenergie für 6 C und 6 H: $6 * 716 \text{ kJ/mol} + 6 * 218 \text{ kJ/mol} = 5604 \text{ kJ/mol}$

Bildungsenthalpie des Benzols: 83 kJ/mol

Hydrierwärme Cyclohexen: $-119,7 \text{ kJ/mol}$ Hydrierwärme Benzol $-208,2 \text{ kJ/mol}$

Welche Aussage kann man aus der Hydrierwärme des 1,3-Cyclohexadiens ($\Delta H = -230 \text{ kJ/mol}$) ziehen?

Berechnen Sie die Resonanzenergien des Benzols und Cyclobutadiens mit Hilfe isodesmischer Reaktionen.

Cyclohexen $\Delta H_f = -1,2 \text{ kcal/mol}$; Benzol: $\Delta H_f = +19,7 \text{ kcal/mol}$, Cyclohexan: $\Delta H_f = -29,4 \text{ kcal/mol}$, Cyclobuten: $\Delta H_f = +37,5 \text{ kcal/mol}$, Cyclobutan: $\Delta H_f = +6,7 \text{ kcal/mol}$, Cyclobutadien $\Delta H_f = +114 \text{ kcal/mol}$ und berücksichtigen Sie dabei das Benzol und Cyclohexan als spannungsfrei, Cyclohexen aber mit einer Spannungsenergie von ca $1,4 \text{ kcal/mol}$ belastet ist.

Welche Produkte resultieren aus der Ce^{4+} -Oxidation der Cyclobutadien-Eisencarbonylkomplexes in Abwesenheit anderer reaktiver Species?

