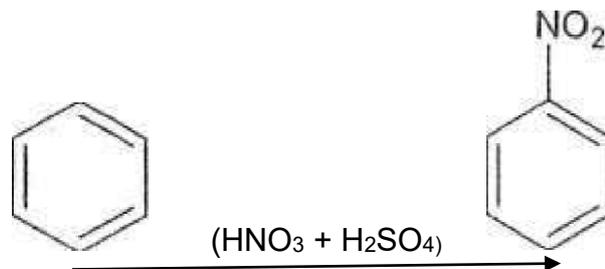


G8 Abituraufgaben Chemie aromatische Kohlenwasserstoffe

2011/B1

2.2 Bereits 1826 gelang dem Kaufmann und Apotheker Otto Unverdorben die Darstellung von Anilin aus Indigo. Seit 1873 wird Anilin großtechnisch aus Benzol hergestellt.

Hierbei wird Benzol zunächst mit einem Gemisch aus Schwefelsäure und Salpetersäure nitriert:



In einem ersten Reaktionsschritt entstehen dabei Nitronium-Ionen (NO_2^+):



Formulieren Sie den Reaktionsmechanismus für die Bildung von Nitrobenzol aus Benzol und Nitronium-Ionen (NO_2^+) unter Mitverwendung mesomerer Grenzstrukturformeln! Der Einfluss eines Katalysators muss nicht berücksichtigt werden. [6 BE]

2012 A 2.2

2.2 Bei der Haarfärbung werden unter anderem leicht oxidierbare aromatische Verbindungen, z. B. Brenzkatechin (1,2-Dihydroxybenzol) auf das Haar gebracht. Das farblose Brenzkatechin wird in basischer Lösung durch Wasserstoffperoxid zum farbigen 1,2-Benzochinon oxidiert.

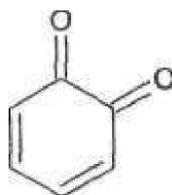


Abb. 2: Strukturformel von 1,2-Benzochinon

Entwickeln Sie über Teilgleichungen die Redoxgleichung für die Reaktion von Brenzkatechin mit Wasserstoffperoxid (H_2O_2)! [6 BE]

2.2 Eine wässrige Lösung von 1,2-Benzochinon ist bei pH-Werten über 7 braun gefärbt, während eine schwach saure Lösung dieser Substanz eine leichte Grünfärbung zeigt.

Der pH-Wert einer Farbstofflösung soll auf 9,0 eingestellt werden. Dies kann entweder durch Zusatz von Natriumhydroxid oder Natriumacetat (Natriumethanoat) zu neutralem Wasser erfolgen. Zum Abwiegen steht eine Waage mit einem Wägebereich von 10^{-3}g bis 100 g zur Verfügung.

Berechnen Sie die Masse an Natriumhydroxid bzw. Natriumacetat, die in Wasser gelöst werden muss, um einen Liter Lösung mit dem pH-Wert von 9,0 herzustellen, und begründen Sie, welches Salz verwendet werden muss! pK_B : Natriumethanoat 9,25 [8 BE]

2013 C/1

1 Viele Kunst- und Farbstoffmoleküle enthalten aromatische Ringsysteme.
1.1 Die Grundlage für die Erforschung der Chemie der Aromaten legte Michael Faraday mit der Entdeckung von Benzol im Steinkohlenteer im Jahr 1862. Nach Aufklärung der Summenformel C_6H_6 wurde unter anderem folgende Strukturformel vorgeschlagen:

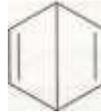


Abb. 1: Strukturformelvorschlag für Benzol nach James Dewar Zur Aufklärung der Struktur des Benzols wurden verschiedene Experimente durchgeführt. Im Folgenden sind die Ergebnisse der Experimente dargestellt: i. Es gibt genau ein Monobrombenzol.

- ii. Es gibt genau ein 1,2-Dibrombenzol.
- iii. Es gibt genau drei Dibrombenzole.
- iv. Benzol reagiert bei Raumtemperatur im Dunkeln nicht mit Brom.

Stellen Sie ausgehend vom Strukturformelvorschlag nach Dewar unter Mitverwendung von Strukturformeln dar, dass die unter I bis IV angegebenen Beobachtungen mit diesem Strukturformelvorschlag nicht übereinstimmen!

[8 BE]

1.2 Aus Benzol können zahlreiche weitere aromatische Verbindungen hergestellt werden wie zum Beispiel Methylbenzol, das als Weichmacher in der Kunststoffindustrie Verwendung findet. Es kann durch Umsetzung von Chlormethan mit Benzol synthetisiert werden. Wie bei der Halogenierung von Benzol muss hierbei Aluminiumchlorid oder Eisen(III)-chlorid als Katalysator eingesetzt werden.

Formulieren Sie den Mechanismus dieser elektrophilen aromatischen Substitution unter Mitverwendung mesomerer Grenzstrukturformeln! [8 BE]

2013/C2

1.1 Formulieren Sie den Reaktionsmechanismus der Nitrierung von Toluol zum 2-Nitrotoluol unter Mitverwendung mesomerer Grenzstrukturformeln! Als Elektrophil fungiert das Nitronium-Ion (NO_2^+). [6 BE]

2014 C1 sekundäre Pflanzenstoffe sind charakteristisch für verschiedene Pflanzengruppen und besitzen oft eine spezifische ökologische Funktion, z. B. das Anlocken von Tieren mithilfe von Färb-, Duft- und Geschmacksstoffen, aber auch die Abwehr von Fraßfeinden. Die Gruppe der sekundären Pflanzenstoffe ist sehr heterogen, u. a. gehören hierzu die Polyphenole, bei denen mindestens zwei Hydroxy-Gruppen an einen aromatischen Ring gebunden sind.

1 Der Saft der Gerber-Akazie enthält das Polyphenol Catechin, aus dem früher durch Pyrolyse Brenzkatechin (1,2-Dihydroxybenzol) gewonnen wurde. Brenzkatechin ist ein Ausgangsmaterial für die Synthese verschiedener Farbstoffe,

Duftstoffe und Arzneimittel. Die folgende Abbildung zeigt schematisch, wie sich heute Brenzkatechin aus Phenol im Labor synthetisieren lässt:

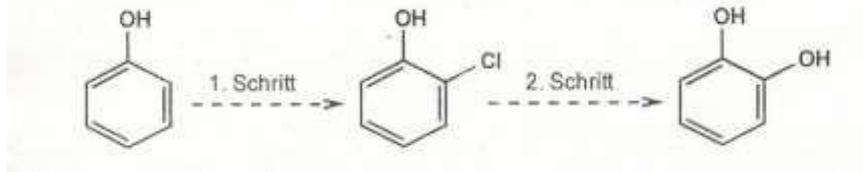
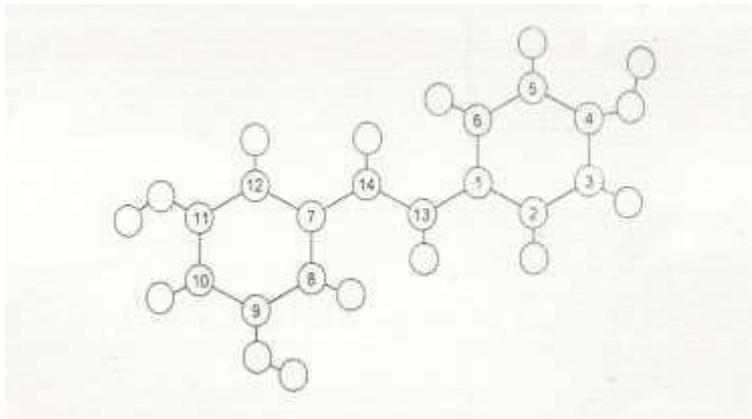


Abb. 1: Schritte der Brenzkatechin-Synthese im Labor

Formulieren Sie den Reaktionsmechanismus mit Strukturformeln für den ersten Schritt der Brenzkatechin-Synthese im Labor! Für Phenol kann vereinfacht die gleiche Reaktivität wie bei Benzol angenommen werden. [6 BE]

2 Im roten Traubensaft ist das antioxidativ wirkende Polyphenol (E)-Resveratrol ($C_{14}H_{12}O_3$) enthalten. Forschungen konnten im Tierversuch eine lebensverlängernde Wirkung nachweisen und wecken das Interesse an Resveratrol als funktionellem Lebensmittelzusatz.

Die folgende Abbildung zeigt die modellhafte Darstellung eines (E)-Resveratrol-Moleküls:



An (E)-Resveratrol wurde eine schwingungsspektroskopische Strukturanalyse durchgeführt, deren Ergebnisse die folgende Tabelle zeigt:

Tab. 1: Bindungslängen der Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindungen in (E)-Resveratrol¹
[40 BE]

Abbildungen und Tabellen:

¹ F. Billes, I. Mohammed-Ziegler, H. Mikosch, E. Tyihak: *Vibrational spectroscopy of resveratrol* In: *Spectrochimica Acta Part A*. 68. Jg. 2007, S. 671

Bindung	Länge in pm	Bindung	Länge in pm	Bindung	Länge in pm
C1-C2	140	C6-C1	140	C11-C12	137
C2-C3	137	C7-C8	140	C12-C7	140
C3-C4	139	C8-C9	137	C7-C14	146

C4-C5	138	C9-C10	138	C1-C13	147
C5-C6	137	C10-C11	137	C13-C14	133

Strukturanalysen ergaben eine Bindungslänge der Kohlenstoff- Kohlenstoff-Bindung im Ethan-Molekül von 154 pm und im Ethen- Molekül von 134 pm.

Zeichnen Sie die Strukturformel eines (E)-Resveratrol-Moleküls und erklären Sie die Bindungslänge zwischen den Kohlenstoffatomen C1 und C2 im (E)-Resveratrol-Molekül im Vergleich zu den Bindungslängen zwischen den Kohlenstoffatomen im Ethan- und im Ethen-Molekül! [7 BE]

3 Die Löslichkeit von Polyphenolen in Wasser ist pH-abhängig. Erläutern Sie diese Beobachtung! [6 BE]

2014 C2

Ambroxol ist eine Substanz mit schleimlösender Wirkung, die in vielen Medikamenten zur Behandlung von festsitzendem Husten eingesetzt wird.

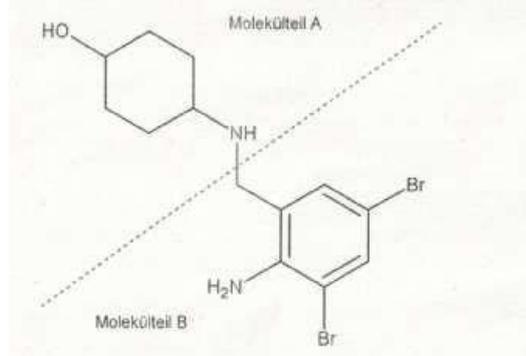


Abb. 1: Strukturformel von Ambroxol

1 Bei der Herstellung von Ambroxol werden zunächst die Vorstufen der Molekülteile A und B getrennt synthetisiert.

Zur Synthese der Vorstufe von Molekülteil A wird Phenol mit Nitriersäure zu 4-Nitrophenol umgesetzt. Durch Reaktion mit Zinn in essigsaurer Lösung reagiert 4-Nitrophenol zu 4-Aminophenol, das anschließend durch katalytische Hydrierung zu 4-Aminocyclohexanol reduziert wird. Formulieren Sie den Reaktionsmechanismus mit Strukturformeln für die Bildung von 4-Nitrophenol aus Phenol! Das reagierende Teilchen in der Nitriersäure ist das Nitronium-Ion (NO_2^+). Für Phenol kann vereinfacht die gleiche Reaktivität wie bei Benzol angenommen werden. [6BE]

2 Im Ambroxol Molekül finden sich zwei Ringstrukturen aus Kohlenstoffatomen. Vergleichen Sie die Molekülgeometrie dieser Ringstrukturen! [6 BE]

Um den Wirkstoff Ambroxol haltbarer zu machen, wird er mit Wasserstoffchlorid versetzt und so in Ambroxolhydrochlorid überführt. Die Protonierung des Ambroxols erfolgt dabei an einem der Stickstoffatome. Begründen Sie unter Verwendung einer weiteren Grenzstrukturformel, welches Stickstoffatom bevorzugt protoniert wird! [6 BE]

2 Ambroxol Saft wird in braunen Plastikflaschen aus Polyethylenterephthalat (PET) vertrieben. PET-Einwegflaschen werden in Deutschland größtenteils

werkstofflich recycelt. Hierbei wird in einem Verfahren A durch Zerkleinern, Reinigen und Abtrennen anderer Bestandteile ein Teil des PET als so genannte „Flakes“ zurückgewonnen, aus denen nach Zusatz von frischem PET erneut Flaschen hergestellt werden können. In einem Verfahren B können die PET-Abfälle alternativ in einem rohstofflichen Recycling-Verfahren nach Reinigen und Abtrennen anderer Kunststoffabfälle in einer basischen Lösung unter 20 bar Druck und bei einer Temperatur von 200 °C nahezu vollständig in die Kunststoff- Monomere zerlegt werden.

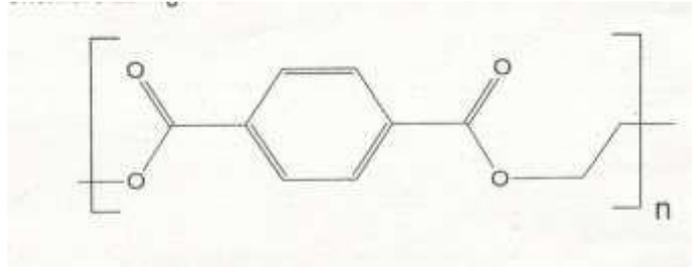


Abb. 2: Strukturformelausschnitt von PET

- 4.1 Formulieren Sie die Strukturformelgleichung für die Reaktion bei Verfahren B und benennen Sie den Reaktionstyp! [4 BE]
 4.2 Diskutieren Sie Vor- und Nachteile beider Recycling-Verfahren und gehen Sie dabei auf die prinzipielle Notwendigkeit des Kunststoff- Recyclings ein! [6BE]

2015/C1

Vanillin ($C_8H_8O_3$) ist der weltweit am häufigsten produzierte Aromastoff. Es wird unter anderem in Getränken, Speiseeis und Backwaren verwendet.

- 1 Vanillin kann in zwei tautomeren Formen auftreten. Als Tautomere bezeichnet man Isomere, die sich reversibel ineinander umlagern können.

Die folgende Abbildung zeigt das Tautomerie-Gleichgewicht des Vanillins.

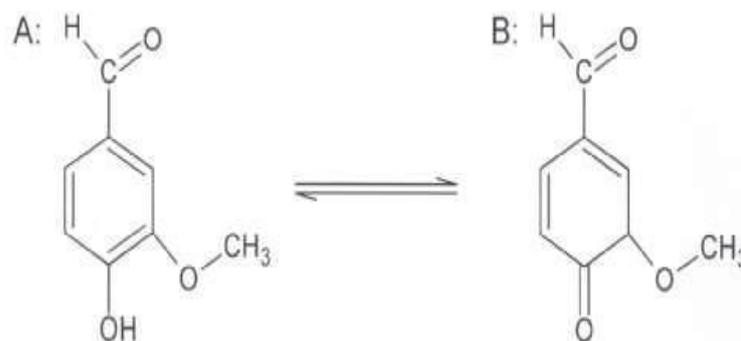


Abb. 1: Tautomerie-Gleichgewicht des Vanillins

Begründen Sie unter Berücksichtigung energetischer Aspekte, warum Vanillin bevorzugt in Form A vorliegt! [4 BE]

- 2 Der Inhalt eines Päckchens Vanillinzucker hat eine Masse von 8,0 g und enthält neben dem Aromastoff Vanillin nur Saccharose. Der Vanillin gehalt muss aufgrund einer Norm zwischen 1,6 und 2,4 % liegen. Die

Gehaltsbestimmung von Vanillin kann durch Titration mit Natronlauge erfolgen. Hierbei werden zur vollständigen Neutralisation des Vanillins aus einem Päckchen Vanillinzucker 8,6 ml Natronlauge mit der Konzentration $c(\text{NaOH}) = 0,10 \text{ mol/l}$ benötigt.

Ermitteln Sie, ob der Gehalt der Probe den Vorgaben der Norm entspricht! [8 BE]

- 3 Die folgende Abbildung zeigt die Titrationskurve der Titration einer Vanillinlösung mit Natronlauge der gleichen Konzentration:

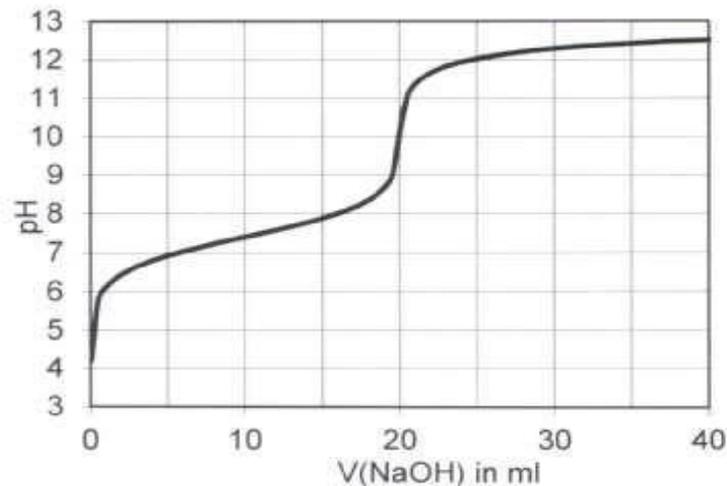


Abb. 2: Titrationskurve der Titration einer Vanillinlösung mit Natronlauge

- 3.1 Leiten Sie aus der Titrationskurve den pK_S -Wert des Vanillins ab! [5 BE]

- 3.2 Für eine weitere Titration wird der Indikator Methylrot mit einem Umschlagsbereich zwischen $\text{pH} = 4,4$ und $\text{pH} = 6,2$ verwendet.

Beurteilen Sie, ob die Titration mit diesem Indikator das richtige Ergebnis liefern kann! [3 BE]

2015/C2

Der Verbrauch an Dieselkraftstoff liegt in Deutschland jährlich bei etwa 30 Millionen Tonnen. Damit ist Diesel der prozentual wichtigste Energieträger im Verkehrssektor.

1 Dieselkraftstoff wird im Wesentlichen durch fraktionierte Destillation aus fossilem Rohöl gewonnen und hat einen Siedebereich von ca. $170 \text{ }^\circ\text{C}$ bis $390 \text{ }^\circ\text{C}$, da sich das Gemisch aus mehreren Hundert verschiedenen Verbindungen zusammensetzt. Tabelle 1 fasst die wesentlichen Substanzgruppen im Dieselkraftstoff zusammen:

Tab. 1: Zusammensetzung von Dieselkraftstoff¹

Abbildungen und Tabellen:

¹ verändert nach: *Dieselmkraftstoff – Anforderungen, Qualität, Perspektiven.*

www.fip.de/fileadmin/pdf_s/Aral-Dieselmkraftstoff.pdf, zuletzt aufgerufen am 19.11.2014

- 1.1 Die im Dieselkraftstoff enthaltenen Alkane und Aromaten reagieren unter unterschiedlichen Bedingungen mit Halogenen. Dabei finden in beiden Fällen Substitutionsreaktionen statt.

Erklären Sie den Begriff Substitutionsreaktion und formulieren Sie exemplarisch für je eine Verbindung des Dieseldraftstoffs eine Reaktionsgleichung für die Umsetzung von Chlor mit einem Alkan bzw. einem Aromaten! [7 BE]

1.2 Dieseldraftstoff enthält einen hohen Anteil an Indan.

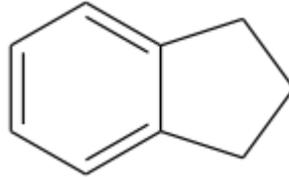


Abb. 1: Strukturformel von Indan

Beschreiben Sie die Molekülgeometrie des Indanmoleküls! [6 BE]

2. Pflanzenöle unterscheiden sich von mineralischem Dieseldraftstoff in wichtigen Kenngrößen, z. B. in der Viskosität. Sie können jedoch durch entsprechende chemische Prozesse in geeignete Kraftstoffe umgewandelt werden. Das Fettsäuremuster hierfür relevanter Öle ist in Tabelle 2 wiedergegeben.

Tab. 2: Fettsäuremuster verschiedener Öle (prozentuale Durchschnittswerte)²

	Palmitin- säure (Hexadecan- säure)	Palmitol- einsäure (Z- Hexadeca- 9-ensäure)	Stearin- säure (Octadecan- säure)	Öl- säure (Z- Octadeca- 9-ensäure)	Linol- säure (Z,Z- Octadeca- 9,12- diensäure)	Linolen- säure (Z,Z,Z- Octadeca- 9,12,15- triensäure)
Rapsöl	4,0	-	1,5	63,0	20,0	9,0
Sonnen- blumenöl	6,5	-	5,0	23,0	63,0	<0,5
Olivenöl	11,5	1,5	2,5	75,0	7,5	1,0
Palmöl	43,8	0,5	5,0	39,0	10,0	0,2

² verändert nach: M. Kaltschmitt: *Energie aus Biomasse*. Springer Verlag, Berlin, 2009, 2. Auflage

2.1 Dieseldraftstoff enthält in Deutschland derzeit eine Beimischung von maximal 7 % Fettsäuremethylestern (Biodiesel). Biodiesel wird

hierzulande vor allem aus Rapsöl hergestellt. Dabei wird das Öl mit Methanol zur Reaktion gebracht.

Formulieren Sie für die Umsetzung eines charakteristischen Fettmoleküls aus dem Rapsöl mit Methanol eine Strukturformelgleichung! [7 BE]

2.2 Ein alternatives Verfahren zur Gewinnung von Kraftstoffen aus Pflanzenölen läuft über die vollständige Hydrierung der Öle mit Wasserstoff.

Hierbei werden alle im Fettmolekül vorhandenen Sauerstoffatome zu Wassermolekülen umgesetzt und die Kohlenstoffketten nicht gebrochen.

Erklären Sie, weshalb bei der Hydrierung aller in der Tabelle genannten Öle stets ein Produktgemisch entsteht, das neben Wasser nur noch drei andere Stoffe enthält, und beurteilen Sie, welche dieser drei Stoffe dem mineralischem Dieselkraftstoff problemlos beigemischt werden können!

[8 BE]

³ Um zu verhindern, dass steuerbegünstigtes Heizöl als Kraftstoff in Fahrzeugen verwendet wird, wird dieses mit dem Farbstoff Sudan I eingefärbt.

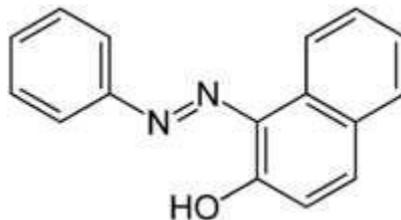


Abb. 2: Strukturformel von Sudan I

Begründen Sie die Farbigkeit dieser Verbindung unter Mitverwendung einer weiteren Grenzstrukturformel! [5 BE]

2016 B1

Schokolade enthält eine Reihe pharmakologisch wirksamer Substanzen. So kann 2-Phenylethylamin (1-Amino-2-phenylethan) den Stimmungszustand des Menschen beeinflussen. Phenylethylamin und das strukturell ähnliche Anilin können beide als Base reagieren, besitzen aber unterschiedliche pK_B -Werte.

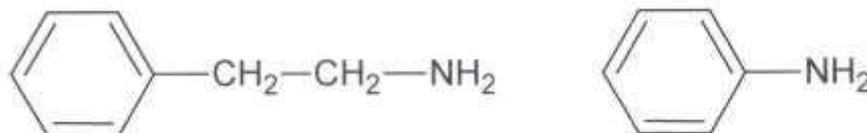


Abb. 5: Strukturformeln von Phenylethylamin und Anilin

Begründen Sie den Unterschied in den pK_B -Werten anhand mesomerer Grenzstrukturformeln! [5 BE]

2017 C 1 Lachs

Lachs ist ein geschätzter Speisefisch. Da der Bestand an wildlebenden Lachsen stark zurückgegangen ist, werden Lachse in Aquakulturen gezüchtet. Während Wildlachs einen Fettgehalt von etwa 6 % aufweist, enthalten Lachse aus Aquakulturen, die vor allem mit Fischmehl und -öl gefüttert werden, ca. 13 % Fett. Die deutsche Gesellschaft für Ernährung empfiehlt den wöchentlichen Verzehr von Seefisch, wie z. B. Lachs, warnt aber gleichzeitig vor dem hohen Fettgehalt und einer eventuellen Schadstoffbelastung der Fische. 1 Krebserregende polychlorierte Biphenyle (PCB) reichern sich aufgrund ihrer Langlebigkeit in der Nahrungskette an. Deshalb wird der im deutschen Lebensmittelhandel angebotene Lachs regelmäßig auf die Belastung mit PCB untersucht.

Polychlorierte Biphenyle sind Verbindungen mit einem Biphenyl- Grundgerüst, bei dem ein oder mehrere Wasserstoff-Atome durch Chlor- Atome ersetzt sind. Ein Beispiel ist PCB 169.

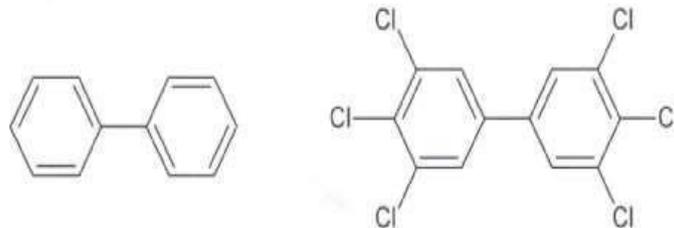


Abb. 1: Strukturformeln von Biphenyl (links) und PCB 169 (rechts)

1.1 Im Jahr 2004 wurde der PCB-Gehalt in Stichproben ermittelt:

	PCB-Gehalt pro Kilogramm Fisch
Lachs aus Aquakulturen	0,0055
Wildlachs	< 0,0002 mg

Tab. 1: PCB-Gehalt in Lachs verschiedener Herkunft

Stellen Sie ausgehend von der Struktur des PCB 169 eine begründete Hypothese auf, die den unterschiedlichen PCB-Gehalt erklärt. [5 BE]

1.2 Bei der industriellen Synthese von polychlorierten Biphenylen, die seit Ende der 1970er Jahre verboten ist, wurde Biphenyl mit einem geeigneten Katalysator und Chlor zur Reaktion gebracht. Je nach Reaktionsbedingungen bilden sich dabei unterschiedlich stark chlorierte Biphenyle. Formulieren Sie den Reaktionsmechanismus für die Bildung eines monochlorierten Biphenyls mit Strukturformeln

3 Ungesättigte Verbindungen wie Ethen und Biphenyl lassen sich in exothermen Reaktionen zu gesättigten Verbindungen hydrieren:

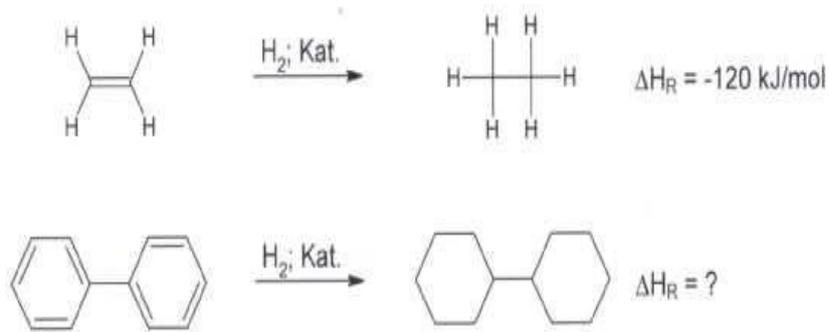


Abb. 2: Hydrierung von Ethen und Biphenyl

Schätzwert 1	Schätzwert 2	Schätzwert 3
$H_R = - 720 \text{ kJ/mol}$	$H_R = - 460 \text{ kJ/mol}$	$H_R = - 950 \text{ kJ/mol}$

Tab. 2: Schätzwerte zur Hydrierungsenthalpie von Biphenyl

Wählen Sie aus der Tabelle einen plausiblen Wert für die Hydrierungsenthalpie von Biphenyl aus und begründen Sie Ihre Entscheidung. [5 BE]

2018/A1

2 Häufig enthält moderne Zahnpasta Triclosan, um Karies verursachende Bakterien abzutöten.

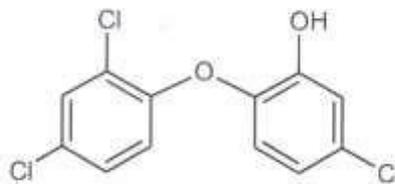


Abb. 3: Strukturformel von Triclosan

2.1 Ein Zwischenprodukt bei der Herstellung von Triclosan im Labor ist 1,4-Dichlor-2-nitrobenzol, dass bei der Reaktion von 1,4-Dichlorbenzol mit Nitriersäure entsteht. Als elektrophiles Teilchen reagiert hierbei das Nitronium-Ion. NO_2^+

Formulieren Sie den Reaktionsmechanismus für die Bildung von 1,4-Dichlor-2-nitrobenzol mit Strukturformeln. [7 BE]

2.2 In Tierversuchen konnte nachgewiesen werden, dass Triclosan Einfluss auf das Hormonsystem der Tiere hat und Krebs auslösen kann.

Bewerten Sie anhand zweier Aspekte die Durchführung von Tierversuchen zur Untersuchung der Nebenwirkungen von Triclosan. [4 BE]

2019 B1

2 Schadstoffe, wie Cadmium-Ionen oder Aromaten, sind für viele Organismen giftig und müssen aus dem Abwasser entfernt werden.

2.1 Aus Industrieanlagen können z. B. Phenol und 4-Chlorphenol ins Abwasser gelangen.

2.1.1 Das Lösen von Phenol in Wasser verändert den pH-Wert. Erklären Sie diesen Sachverhalt mithilfe von Grenzstrukturformeln. [6 BE]

2.1.2 Formulieren Sie den Mechanismus der Synthese von 4-Chlorphenol ausgehend von Phenol. [6 BE]

2021 B1

4 Viele Eltern wünschen sich für Kleinkinder weichmacherfreie Kunststoffartikel, da Weichmacher wegen ihrer möglichen gesundheitsschädlichen Wirkung in die Kritik geraten sind. Sie sind aber oft unabdingbar, um ein hartes Polymer elastisch und verformbar zu halten. Ein Beispiel für einen solchen Weichmacher ist *N*-Butylbenzolsulfonamid (Abb. 3):

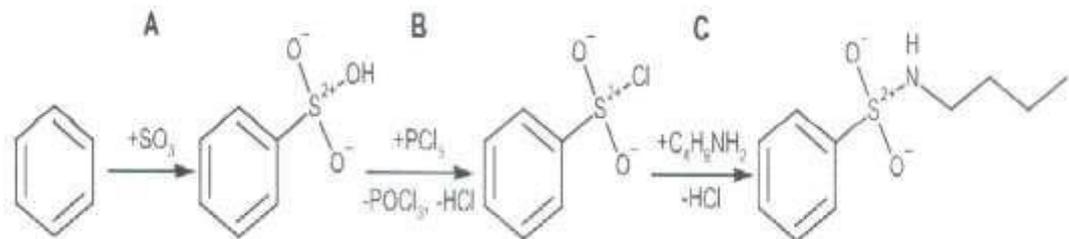


Abb.3 Reaktionsschema für die Synthese von *N*-butylbenzolsulfonamid

3.1 Formulieren Sie den Reaktionsmechanismus für Schritt A der Synthese von *N*Butylbenzolsulfonamid (Abb. 3). Als Elektrophil dient ein Schwefeltrioxid-

Molekül.

[6 BE]

3.2 In Schritt B wird Phosphorpentachlorid eingesetzt. Dieses steht mit Phosphor Trichlorid und Chlor in folgendem Gleichgewicht:
$$\text{PCl}_5(\text{g}) \rightleftharpoons \text{PCl}_3(\text{g}) + \text{Cl}_2(\text{g})$$

5

Thermodynamische Daten für die Hinreaktion:

$$\Delta H^\circ = 87,88 \text{ kJ/mol} \quad \Delta S^\circ = 170,04 \text{ J/(K}\cdot\text{mol)}$$

3.2.1 Berechnen Sie die Temperatur in Kelvin, für die $\Delta_r G^\circ = 0 \text{ kJ/mol}$ gilt. Erklären Sie die Auswirkungen einer Temperaturerhöhung über diesen Wert hinaus auf den freiwilligen Verlauf der Reaktion. [4 BE]

3.2.2 In einem geschlossenen Gefäß hat sich ein chemisches Gleichgewicht zwischen den gasförmigen Stoffen Phosphor Trichlorid, Phosphorpentachlorid und Chlor eingestellt (Abb. 4):

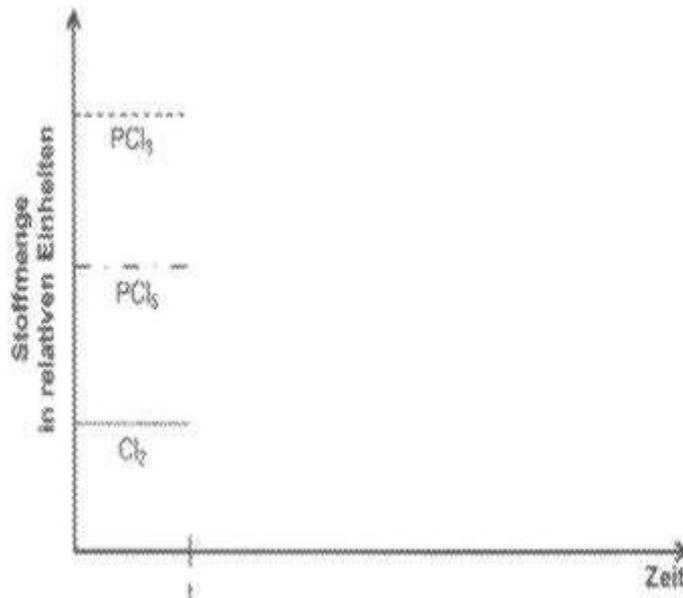


Abb. 4: Stoffmengen von Phosphor Trichlorid, Phosphorpentachlorid und Chlor in einem geschlossenen Gefäß

Zum Zeitpunkt t wird der Gesamtdruck im Gefäß erhöht. Skizzieren Sie in Abbildung 4 die mögliche Entwicklung der drei Stoffmengen ab dem Zeitpunkt t und erläutern Sie diese. [5 BE]

2021 B2

B 2 Sonnencreme

Die auf der Erdoberfläche ankommende UV-Strahlung liegt im Wellenlängenbereich von ca. 280 nm bis 380 nm. Sie trägt maßgeblich zur Entstehung von Hautkrebs bei. Zum Schutz vor Gefahren durch UV-Strahlung werden verschiedene Sonnencremes angeboten.

- 1 Oxybenzon ist ein wichtiger UV-Filter in Sonnencremes. Hergestellt wird dieser Stoff durch eine elektrophile aromatische Substitution aus den Edukten 3-Methoxyphenol und Benzoylchlorid (Abb. 1):

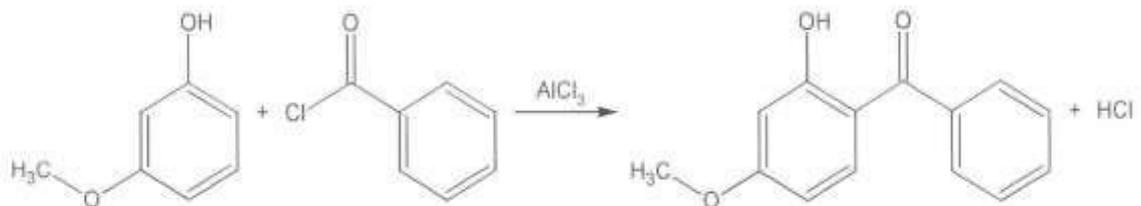


Abb. 1: Synthese von Oxybenzon aus 3-Methoxyphenol und Benzoylchlorid

Mithilfe des Katalysators Aluminium (III)-chlorid entsteht aus Benzoylchlorid das folgende Elektrophil (Abb. 2):

2021 C2

- 2.2 Eine andere Peroxidase katalysiert die Reaktion von Hydrochinon (1,4-Dihydroxybenzol) mit Sauerstoff zu 1,4-Benzochinon (Abb. 3) und Wasser



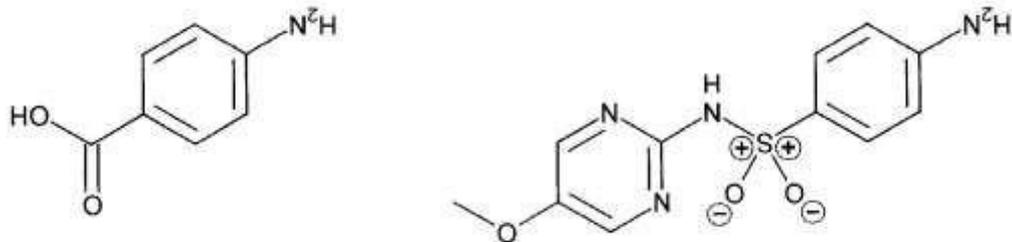
Abb. 3: Strukturformel von 1,4-Benzochinon

Formulieren Sie die Teilgleichungen für diese Redoxreaktion in schwach saurer Lösung. [5 BE]

2022 A2 Antibiotika

Antibiotika sind Wirkstoffe in Arzneimitteln, die bei bakteriellen Infektionskrankheiten eingesetzt werden. Sie beeinflussen

Stoffwechselprozesse von Bakterien und verhindern so ihre Vermehrung. 1 Das Antibiotikum Sulfamethoxydiazin (Abb. 1) stört die Synthese der für die Bakterien lebensnotwendigen Folsäure. Bakterien stellen Folsäure mithilfe des Enzyms Dihydropteroat-Synthase aus 4-Aminobenzoessäure her.



2023 C 2 Kohlenstoffdioxid als Rohstoff

2.3 Als weitere Diisocyanate lassen sich sowohl Toluol-2,4-diisocyanat als auch Isophorondiisocyanat (IPDI) (Abb. 4) einsetzen.



Abb. 4: Strukturformeln von Toluol-2,4-diisocyanat (links) und Isophorondiisocyanat (rechts)

2.3.1 Als weitere Diisocyanate lassen sich sowohl Toluol-2,4-diisocyanat als auch Isophorondiisocyanat (IPDI) (Abb. 4) einsetzen.

2.3.2 Vergleichen Sie den räumlichen Bau der Ringsysteme dieser beiden Moleküle.

Toluol-2,4-diisocyanat lässt sich aus Toluol herstellen (Abb. 5). Als reaktives Teilchen tritt dabei im ersten Reaktionsschritt das Nitronium Ion (NO_2^+)

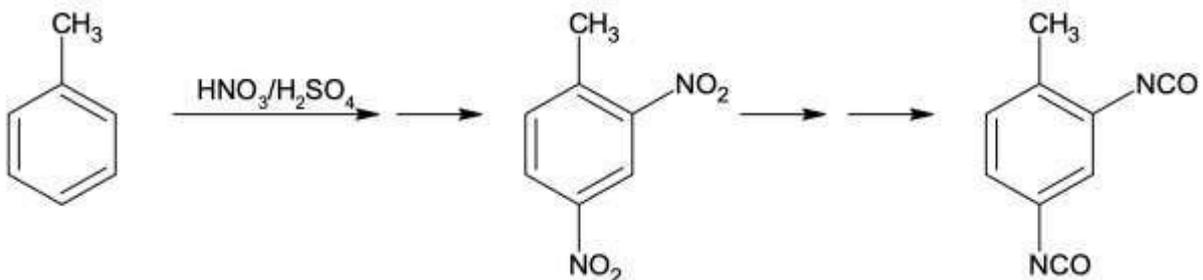


Abb. 5: Reaktionsschema zur Synthese von Toluol-2,4-diisocyanat

Formulieren Sie den Mechanismus für die Reaktion von Toluol zu

4-Nitrotoluol. Stellen Sie die Stabilisierung des Zwischenprodukts anhand mesomerer Grenzstrukturformeln dar. [6 BE]

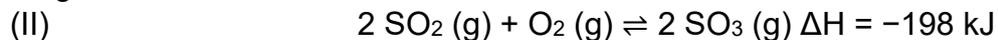
Formulieren Sie den Reaktionsmechanismus für Schritt 1 der Synthese von Pikrinsäure. Ordnen Sie der Reaktion begründet eines der

Energiediagramme aus Abbildung 3 zu. [9 BE]

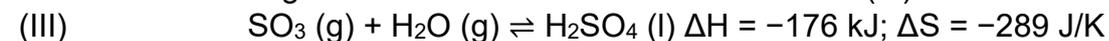
2 Die für die Synthese von Pikrinsäure benötigten Stoffe Schwefelsäure und Schwefeltrioxid können großtechnisch durch das Kontaktverfahren hergestellt werden. Dafür wird in einem ersten Schritt (I) durch die Reaktion von Schwefel mit Sauerstoff Schwefeldioxid gebildet:



Das entstehende Gasgemisch enthält etwas über 10 % Schwefeldioxid. Schwefeldioxid wird anschließend (II) mithilfe von Vanadium(V)oxid (V_2O_5) als Katalysator zu Schwefeltrioxid umgesetzt:



Schwefeltrioxid reagiert dann mit Wasser zu Schwefelsäure (III):



2.1 Erklären Sie mit Hilfe der Gibbs-Helmholtz-Gleichung, dass die Temperatur einen entscheidenden Einfluss auf die Freiwilligkeit von Reaktion (III) hat. [4 BE]

2.2 In einem Modellversuch zum Kontaktverfahren werden die Gleichgewichtskonzentrationen der an der Schwefeltrioxid-Synthese (II) beteiligten Stoffe bei 400 °C ermittelt (Tab. 1).

2025 C 1 Phenol

Phenol (Abb. 1) wird nicht nur zur Produktion von Kunststoffen genutzt, sondern auch für die Herstellung von Pikrinsäure, die in der chemischen Analytik eine wichtige Rolle spielt.

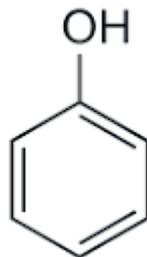


Abb. 1: Strukturformel von Phenol

1 Bei der Synthese der Pikrinsäure wird Phenol in Anwesenheit von rauchender Schwefelsäure zweifach sulfoniert (Abb. 2, Schritt 1 und 2).

Rauchende Schwefelsäure enthält immer einen Anteil an Schwefeltrioxid, das als Elektrophil an der insgesamt exothermen Reaktion beteiligt ist.

1 Bei der Synthese der Pikrinsäure wird Phenol in Anwesenheit von rauchender Schwefelsäure zweifach sulfoniert (Abb. 2, Schritt 1 und 2). Rauchende Schwefelsäure enthält immer einen Anteil an Schwefeltrioxid, das als Elektrophil an der insgesamt exothermen Reaktion beteiligt ist.

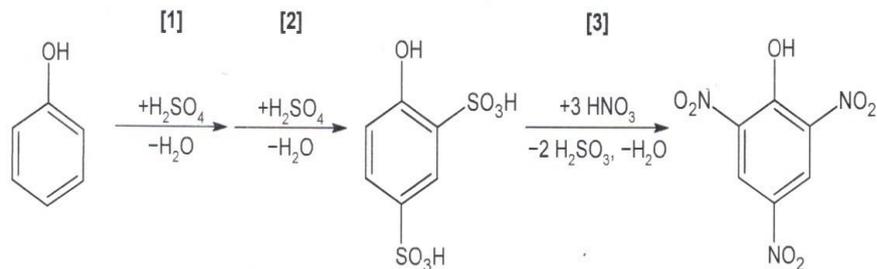


Abb. 2: Reaktionsschema zur Synthese von Pikrinsäure aus Phenol

Abb. 2: Reaktionsschema zur Synthese von Pikrinsäure aus Phenol

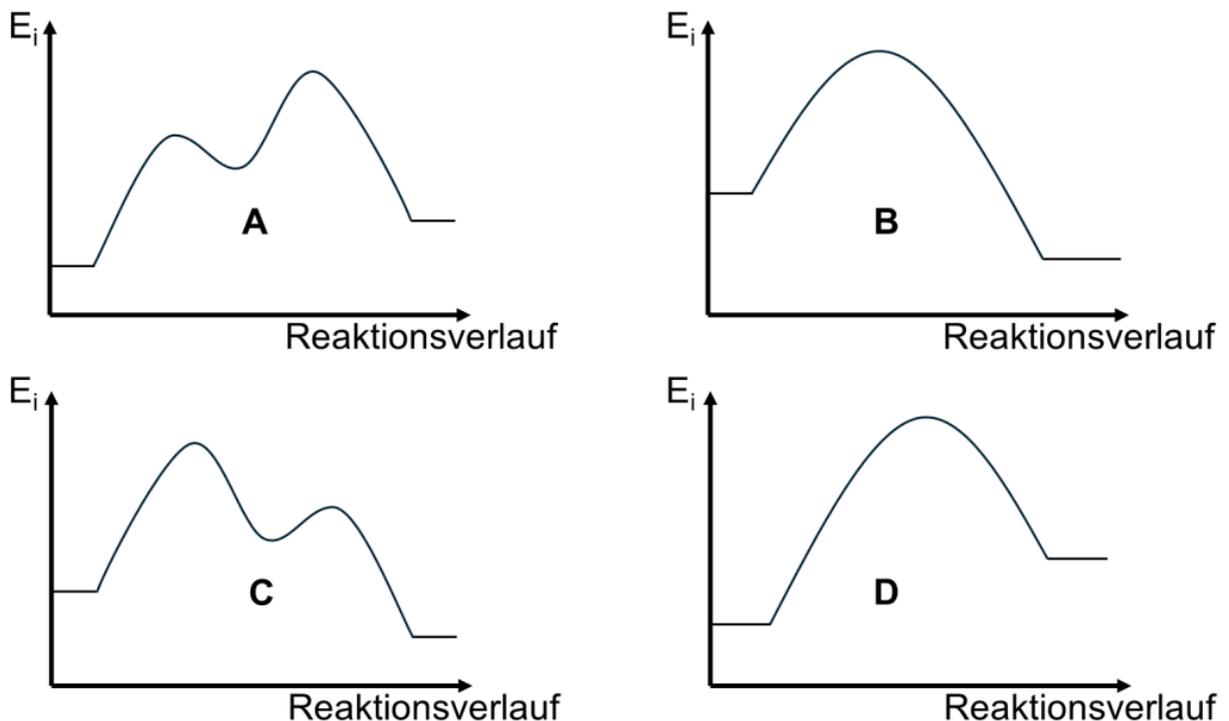
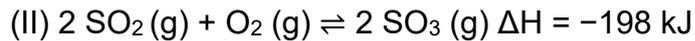


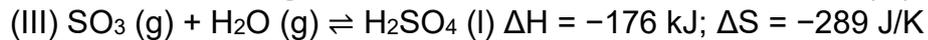
Abb. 3: mögliche Energiediagramme zu Schritt 1 der Synthese von Pikrinsäure

Formulieren Sie den Reaktionsmechanismus für Schritt 1 der Synthese von Pikrinsäure. Ordnen Sie der Reaktion begründet eines der Energiediagramme aus Abbildung 3 zu. Formulieren Sie den Reaktionsmechanismus für Schritt 1 der Synthese von Pikrinsäure. Ordnen Sie der Reaktion begründet eines der Energiediagramme aus Abbildung 3 zu. [9 BE]

2 Die für die Synthese von Pikrinsäure benötigten Stoffe Schwefelsäure und Schwefeltrioxid können großtechnisch durch das Kontaktverfahren hergestellt werden. Dafür wird in einem ersten Schritt (I) durch die Reaktion von Schwefel mit Sauerstoff Schwefeldioxid gebildet:
 (I) $S_8(s) + 8 O_2(g) \rightarrow 8 SO_2(g) \quad \Delta H = -2376 \text{ kJ}$
 Das entstehende Gasgemisch enthält etwas über 10 % Schwefel-dioxid. Schwefeldioxid wird anschließend (II) mithilfe von Vanadium(V)-oxid (V_2O_5) als Katalysator zu Schwefeltrioxid umgesetzt:



Schwefeltrioxid reagiert dann mit Wasser zu Schwefelsäure (III):



2.1

Erklären Sie mit Hilfe der Gibbs-Helmholtz-Gleichung, dass die Temperatur einen entscheidenden Einfluss auf die Freiwilligkeit von Reaktion (III) hat. [4 BE]

2.2 In einem Modellversuch zum Kontaktverfahren werden die

Gleichgewichtskonzentrationen der an der Schwefeltrioxid-Synthese (II) beteiligten Stoffe bei 400 °C ermittelt (Tab. 1).

Tab. 1: Gleichgewichtskonzentrationen der an der Schwefeltrioxid-Synthese beteiligten Stoffe bei 400 °C

Stoff	Konzentration in mol/L
Schwefeldioxid	0,58
Sauerstoff	0,25
Schwefeltrioxid	1,42

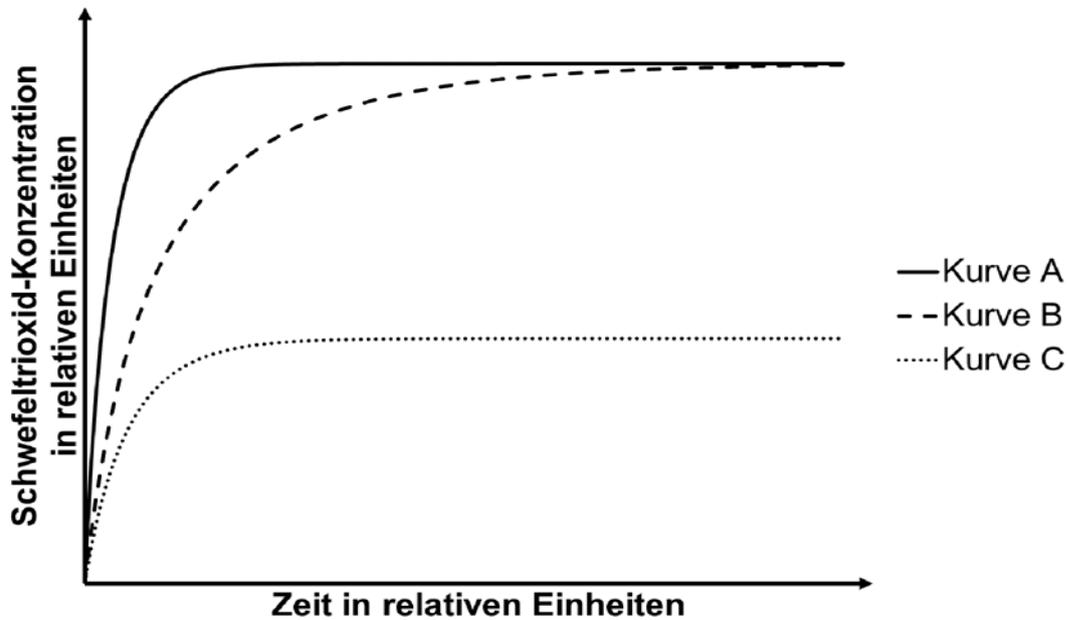
Stellen Sie das Massenwirkungsgesetz für die Schwefeltrioxid-Synthese auf und berechnen Sie anhand von Tabelle 1 die Gleichgewichtskonstante. [4 BE]

2.2 In einem weiteren Modellexperiment wird der Einfluss verschiedener Reaktionsbedingungen auf die Einstellung und die Lage des Gleichgewichts bei der Schwefeltrioxid-Synthese (II) untersucht.

Tab 2: Versuchsbedingungen im Modellexperiment ¹

Ansatz	Temperatur in Grad Celsius	Katalysator	Druck in bar
1	400	nein	1,0
2	400	ja	1,0
3	600	nein	1,0

Abbildung 4 zeigt die Ergebnisse des Modellexperiments.



Abhängigkeit der Schwefeltrioxid-konzentration von der Zeit ¹

Ordnen Sie die drei Versuchsansätze den Kurven im Diagramm begründet zu. Beurteilen Sie den Einfluss einer Druckerhöhung auf die Lage des Gleichgewichts bei Ansatz 3. [9 BE]

2925 C2 Antiseptika

Antiseptika sind chemische Stoffe, die in der Medizin zur Verhinderung von Wundinfektionen eingesetzt werden.

1 Zur Behandlung von oberflächlichen Schürfwunden können sog. Wund und Heilsalben eingesetzt werden. Diese enthalten neben antiseptisch wirkenden Substanzen wie Chlorhexidin (Abb. 1) manchmal auch Wirkstoffe wie Pramocain (Abb. 2), die schmerzlindernd wirken

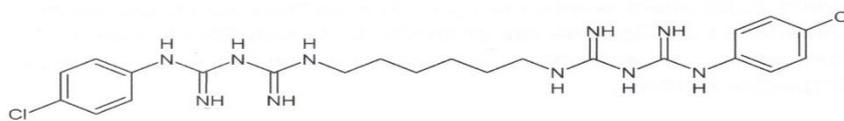


Abb. 1: Strukturformel von Chlorhexidin

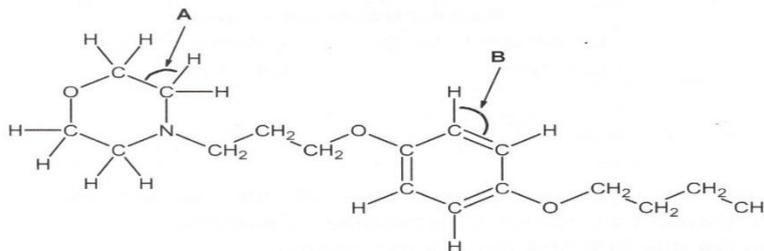


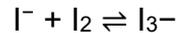
Abb. 2: Strukturformel von Pramocain

- 1.1 Im ersten Schritt der Synthese von Chlorhexidin (Abb. 1) wird Benzol zu Chlorbenzol umgesetzt. Formulieren Sie für diesen Reaktionsschritt den Reaktionsmechanismus. [6 BE]

1.3 Schätzen Sie die Größe der beiden markieren Bindungswinkel A und B im Pramocain-Molekül (Abb. 2) ab und begründen Sie Ihre Angabe. [4 BE]

2

2 Auch Iod kann zur Desinfektion von Wunden eingesetzt werden. Früher wurde dazu u. a. Lugolsche Lösung verwendet. Dabei handelt es sich um eine Mischung aus in Wasser gelöstem Kaliumiodid und Iod. In der Lösung stellt sich das folgende Gleichgewicht ein:



2.1.1 Die Bildung des Triiodid-Anions (I_3^-) verläuft exergonisch. Leiten Sie für die Enthalpieänderung ΔH und die Entropieänderung ΔS dieser Reaktion jeweils ab, ob deren Werte größer oder kleiner Null sind. [5 BE]

2.1.2 In einem Experiment wurden die Gleichgewichtskonzentrationen der verschiedenen Iod-Spezies des oben angegebenen Gleichgewichts in verdünnter und unverdünnter Lugolscher Lösung bei sonst gleichen Bedingungen ermittelt.

Tab.: Gleichgewichtskonzentrationen der Iod-Spezies in Lugolscher Lösung bei unterschiedlicher Verdünnung¹

	Konzentration in mol/L	
Jodid	Lugolsche Lösung unverdünnt	Lugolsche Lösung 1:100 verdünnt
Jod	0,42	$5 \cdot 10^{-3}$
Triiodid	$5,7 \cdot 10^{-4}$	$1,6 \cdot 10^{-3}$

Berechnen Sie die Gleichgewichtskonstante K_c für das Jod-Jodod-Triiodid-Gleichgewicht der beiden angegebenen Lösungen.

Interpretieren Sie das Ergebnis ihre Berechnungen

2.2 Ein unter dem Namen Povidon-Iod erhältliches Antiseptikum enthält den Kunststoff PVP (Polyvinylpyrrolidon), der aus Vinylpyrrolidon (Abb. 4) hergestellt wird. Wird PVP Lugolscher Lösung zugesetzt, so bildet sich Povidon-Iod. In diesem Molekül wechseln sich Abschnitte mit und ohne gebundene Triiodid-Anionen ab (Abb. 5).

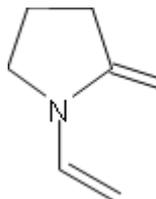


Abb.4 Strukturformel von Vinylpyrrolidon

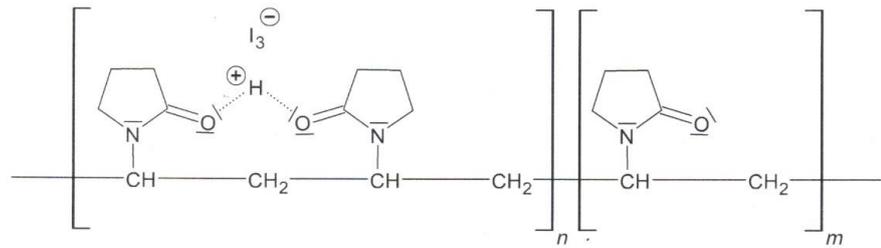


Abb. 5: Strukturformelausschnitt aus Povidon-Iod (Verhältnis n:m ca. 1:18)

Abhängig von den Reaktionsbedingungen lässt sich PVP mit verschiedenen mittleren Molekulmassen herstellen, was sich auf die physikalischen Eigenschaften auswirkt.

Der K-Wert ist dabei eine Größe, mithilfe derer die mittlere Molekülmasse der PVP-Moleküle beschrieben werden kann. Je größer dieser Wert ist, desto größer ist die mittlere Molekülmasse.

2.2.1 Formulieren Sie ausgehend von einem Startermolekül R-R den Reaktionsmechanismus der Synthese von PVP. Erklären Sie eine Möglichkeit zur Steuerung des K-Werts bei der Synthese. [10 BE]

2.2.2 Durch den Zusatz eines zweiten Monomers (Abb. 6) zu Vinylpyrrolidon kann der Kunststoff Crospovidon synthetisiert werden, der zur Herstellung eines antiseptischen Puders verwendet wird. Formulieren Sie je eine Hypothese zum Verhalten von Crospovidon sowie PVP beim Erhitzen. [6 BE]

2.2.3 PVP wird auch zur Herstellung von Gelen mit unterschiedlicher Viskosität verwendet. Je höher die Viskosität ist, desto dickflüssiger ist eine Flüssigkeit.

Erklären Sie den Zusammenhang zwischen der Viskosität des Gels und dem K-Wert des eingesetzten PVP bei ansonsten gleichen Bedingungen. [4 BE]

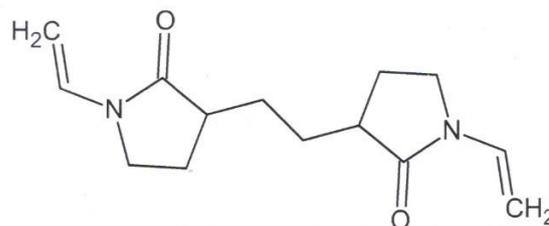


Abb. 6: Strukturformel des zweiten Monomers