

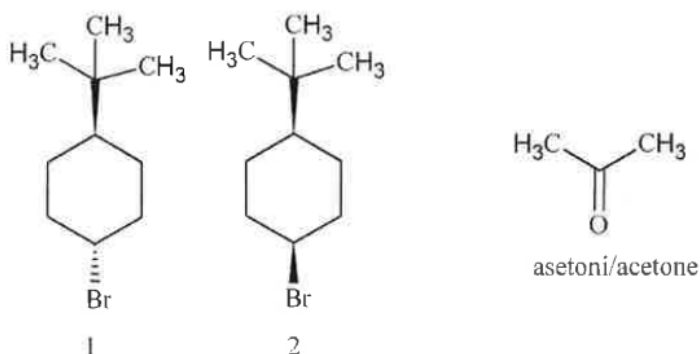
Merkitse vastauspaperiisi tarkasti se kurssikoodi, josta haluat suorituksen (781305A on nyt luennoitu 5 op:n kurssi ja 780389A on aiemmin luennoitu 6 op:n kurssi). Välikokeessa on kolme kysymystä, joista kaikkiin vastataan. Perustele vastauksesi hyvin sekä kuvin, että lyhyin sanallisin perusteluin (ei esseevastauksia).

Kokeessa saa käyttää apuna molekyyylimallisarjaa ja MAOL-taulukoita.

Mark the course code in your answer paper: 781305A (5 credits), 780389A (6 credits). There are three questions and you will answer all of them. Support your answers by pictures and concise sentences (no essays).

Use of molecular structure models and MAOL table book is allowed.

1. Alla esitetyt yhdisteet 1 ja 2 reagoivat kaliumjodidin (KI) kanssa asetonissa S_N2 -reaktiolla. (7 p)
The following compounds 1 and 2 react with potassium iodide (KI) in acetone by S_N2 reaction.



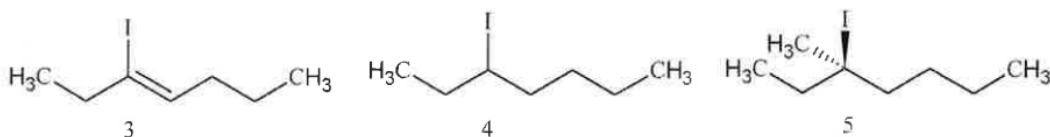
- Piirrä molemmille yhdisteille (1 ja 2) stabiilein tuolikonformaatio.
Present the most stable chair conformation for each compound (1 and 2).
- Kumpi yhdisteistä (1 vai 2) reagoi nopeammin kaliumjodidin kanssa? Miksi?
Which of the compounds (1 or 2) reacts faster with potassium iodide? Why?
- Esitä tuolikonformaatioita käyttäen yksityiskohtainen reaktiomekanismi molempien yhdisteiden (1 ja 2) reaktiolle kaliumjodidin kanssa. Mekanismeista tulee käydä ilmi myös transitiotilan rakenne.
Using chair conformations present a detailed reaction mechanism for both compounds (1 and 2) with potassium iodide. Mechanisms should show also the structure of the transition state.
- Miksi asetoni on hyvä liuotin S_N2 -reaktiossa?
Why is acetone a good solvent for S_N2 -reaction?

2.

(7 p)

- a) Piirrä metanolin ($\text{H}_3\text{C-OH}$) molekyyliorbitaalidiagrammi C–O –sidoksen suhteen.
Draw the molecular orbital diagram for the C–O –bond of methanol ($\text{H}_3\text{C-OH}$).
- b) Metanoli voi toimia nukleofiilinä $\text{S}_{\text{N}}1$ -reaktiossa. Osoita metanolin rakenteesta nukleofiilinen kohta.
Methanol can be a nucleophile in $\text{S}_{\text{N}}1$ -reaction. Identify the nucleophilic part in the structure of methanol.
- c) Tarkastellaan alla olevia yhdisteitä 3, 4 ja 5. Laita yhdisteet järjestykseen sen mukaan miten stabiili karbokationi niistä voi muodostua $\text{S}_{\text{N}}1$ -reaktiossa. Stabiileimman karbokationin muodostava yhdiste ensin. Piirrä lisäksi yksityiskohtainen reaktiomekanismi stabiileimman karbokationin muodostavan yhdisteen reaktiolle metanolin kanssa. Ota mekanismissa huomioon lähtöaineen ja tuotteen mahdollinen stereokemia (R vai S).

Structures of compounds 3, 4 and 5 are presented below. Organize the compounds according to how stable carbocation they can form in $\text{S}_{\text{N}}1$ -reaction. The compound that forms the most stable carbocation first. Present a detailed reaction mechanism for the reaction of the compound, which forms the most stable carbocation, with methanol. Consider the stereochemistry (R or S) of the starting material and the product in the mechanism.

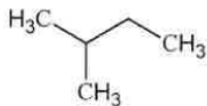


- d) Miksi metanoli on hyvä liuotin $\text{S}_{\text{N}}1$ -reaktiossa.
Why is methanol a good solvent for $\text{S}_{\text{N}}1$ -reaction?

3. Alla on esitetty 2-metyylibutaanin rakennekaava.

(4 p)

The structure of 2-methylbutane is presented below.



Piirrä Newman-projektioiden avulla 2-metyylibutaanin konformaatioenergiakuvaaja C2-C3-sidoksen suhteen. Sidos pyöriähtää 360° (60° välein).

Draw the conformational energy diagram for 2-methylbutane about the C2-C3 bond by using Newman projections. Assume in your diagram that the bond rotates 360° (at intervals of 60°).