

1 Intermolekulare Kräfte

1.1 Van-Der-Waals-Kräfte

- Schwache Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Atomen oder Molekülen
- Entstehung durch kurzzeitige Dipolmomente aufgrund ungleichmäßiger Elektronenverteilung um den Atomkern
- Unterteilt in drei Unterarten

Stärke

Van-der-Waals-Kräfte sind generell sehr schwache Kräfte

1.1.1 London-Kräfte

- Spontane Polarisierung von Teilchen (e^- "schwirren" gerade auf einer Seite)
- Induzierte Dipole in benachbarten Teilchen
- Zwischen nicht-Dipolen
- \Rightarrow Teilchen ziehen sich an / stoßen sich ab

Stärke

Sehr schwach

1.1.2 Debye-Wechselwirkung

- Bereits existierende Dipole in der Lösung
- Induzierte Dipole in benachbarten Teilchen
- Zwischen Dipol und nicht-Dipol
- \Rightarrow Teilchen ziehen sich an / stoßen sich ab

Stärke

Sehr schwach, aber generell stärker als London-Kräfte

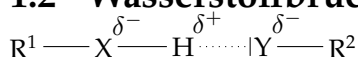
1.1.3 Keesom-Kraft

- Bereits existierende Dipole in der Lösung
- Besagte Dipole ziehen sich an / stoßen sich ab.
- Zwischen zwei Dipolen

Stärke

Sehr schwach, aber generell die stärkste der drei Van-der-Waals-Kräfte

1.2 Wasserstoffbrückenbindungen



- Zwischen Wasserstoffatom und stark elektronegativerem Atom (O, N, F, ...)
- Insbesondere an freiem Valenzelektronenpaar

Stärke

Schwächer als Ionenbindung, Kovalente Bindung, etc. aber deutlich stärker als Van-der-Waals-Kräfte

Examples 1. $HO - H \cdots \bar{O}H_2$

2 Reaktionsmechanismen

2.1 Grundlagen

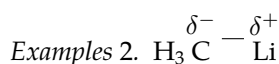
2.1.1 induktive Effekte

- Elektronenverschiebungen entlang konvalenter Bindungen
- Bindungen mit Elektronegativitätsdifferenzen (aber keine Ionenbindung) (z.B. C–F)
- Beeinflusst Abspaltbarkeit von Teilmolekülen in z.B. nukleophiler Substitution (S_N1), elektrophiler Addition, ... (schwächt Bindung)

Zum Beispiel durch folgende Gruppen

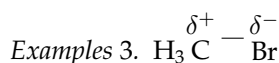
+I-Effekt (Schiebend)

- t-Butylgruppe ($-\text{C}(\text{CH}_3)_3$)
- i-Propylgruppe ($-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$)
- Alkylrest ($-\text{R}$)



–I-Effekt (Ziehend)

- Hydroxygruppe ($-\text{OH}$) / Carbonylgruppenteil ($-\text{C}=\text{O}$)
- Iodatom ($-\text{I}$) / Bromatom ($-\text{Br}$) / Chloratom ($-\text{Cl}$) / Fluoratom ($-\text{F}$)
- Nitrogruppe ($-\text{NO}_2$) / Aminogruppe ($-\text{NH}_2$) / Carboxygruppe ($-\text{COOH}$) / Cyanogruppe ($-\text{CN}$) / Sulfonylgruppe ($-\text{SO}_3\text{H}$)

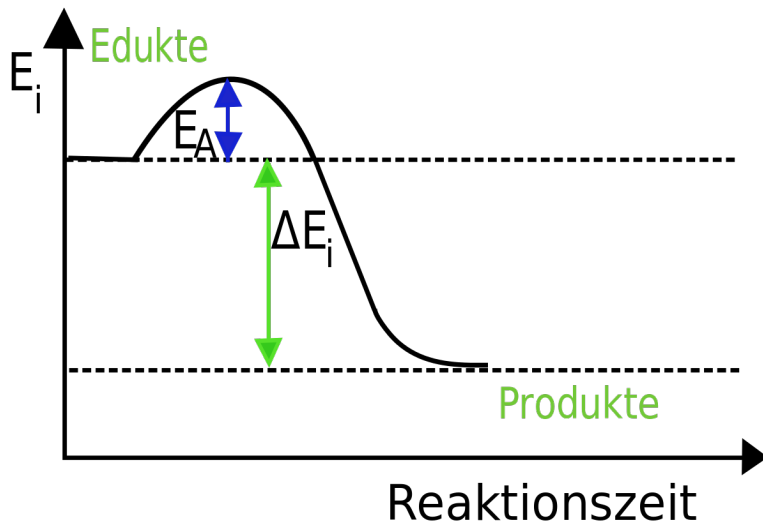


2.1.2 Reaktionsenthalpie

Was ist das?

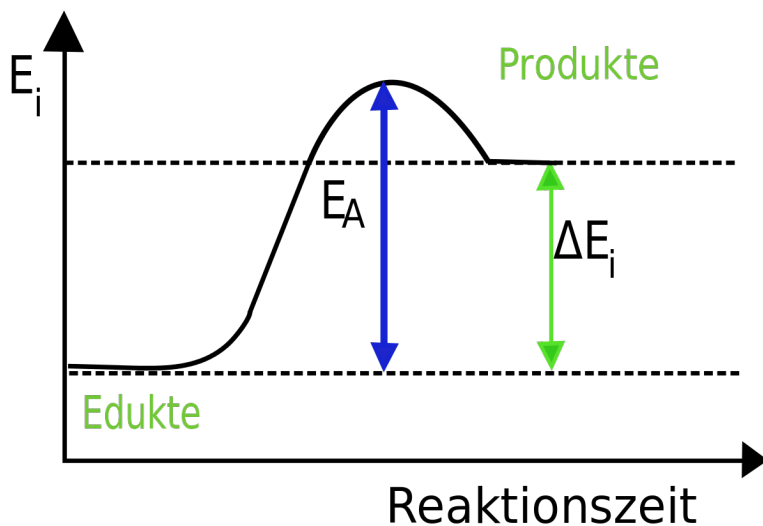
- ΔH_R gibt die Änderung der Enthalpie (\approx Energie) im Verlauf einer Reaktion an, bei konstantem Druck
- Sie entspricht der Differenz zwischen Produkt und Edukt: $\Delta H_R = H_{\text{Produkt}} - H_{\text{Edukt}}$
- Da sie nur vergleichbar ist, wenn die Bedingungen gleich sind, verwendet man Standardbedingungen (273, 15K, 1Bar)
- Die Reaktionsenthalpie unter Standardbedingungen wird als ΔH_R^0 bezeichnet.

Exotherm



- $\Delta E_i = \Delta H_R < 0 \implies$ Exotherm
- Energie wird freigesetzt

Endotherm



- $\Delta E_i = \Delta H_R > 0 \implies$ Endotherm
- Energie wird aufgenommen

Eigenschaften

- E_A bezeichnet die Aktivierungsenergie, die benötigt wird, um die Reaktion zu starten

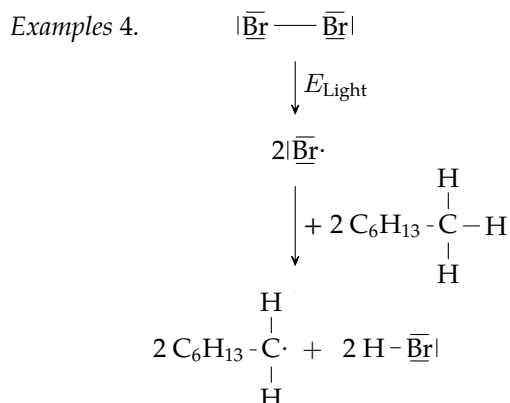
2.2 radikalische Substitution

- Wasserstoffatome werden von Alkanen abgespalten
- werden ersetzt/substituiert durch Halogenatome (Fluor (F), Chlor (Cl), Brom (Br), Iod (I))
- Benötigt zum Kettenstart externe Energie, um Radikale zu erzeugen (Sonnenlicht, Hitze, etc.)

Kettenstart / Initiation

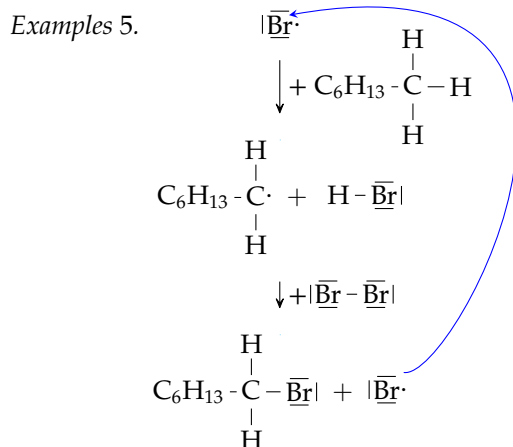
- Homolytische Aufbrechung vom Brom

- Zuführung von Energie (Licht, Wärme)
- Bindungspartner behalten Elektronen



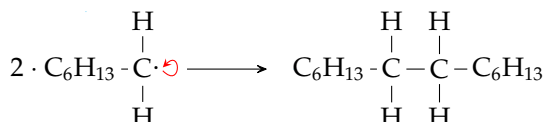
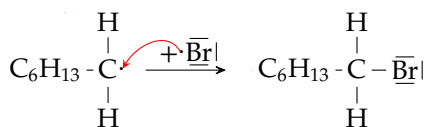
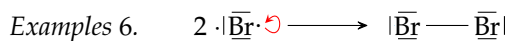
Kettenfortschritt / Folgereaktion / Prolongation

- Reaktion mit Kohlenwasserstoff
- Bildung weiterer Radikale, es entsteht $\text{H} - \underline{\text{Br}}|$ und ein Alkylradikal
- Reaktion mit unreaktierten Halogenmolekül, es entsteht ein Halogenalkan
- Wiederholen dieses Schrittes bis kein Edukt mehr vorliegt



Kettenabbruch

- Rekombination der Radikale (Bildung von Konvalenten Bindungen):
- Zwei Halogenradikale treffen aufeinander
- Ein Halogenradikal und ein Alkylradikal treffen aufeinander
- Zwei Alkylradikale treffen aufeinander
- Notiz: Da die Rekombination energetisch ungünstig ist, spielt der Kettenabbruch bis die Edukte verbraucht sind meist eine untergeordnete Rolle.



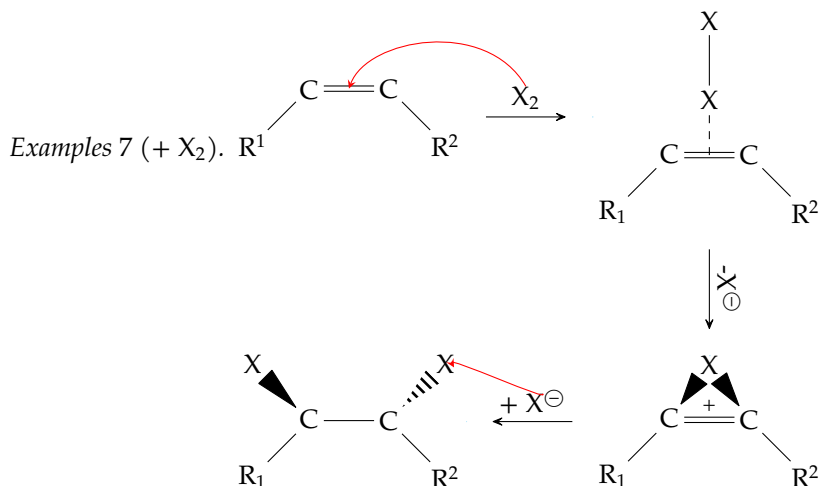
2.3 elektrophile Addition

Mechanismus

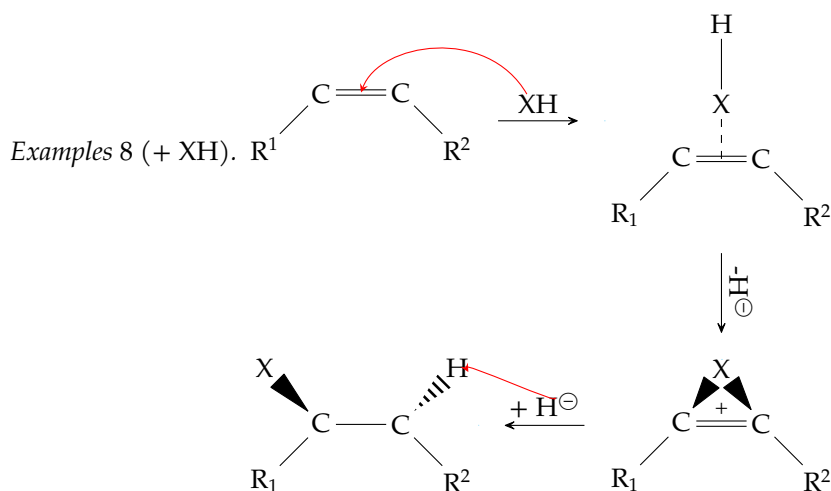
- Ungesättigte Kohlenwasserstoffe wie Alkene oder Alkine reagieren mit Halogenen
- Halogene greifen Doppelbindung im Substrat an
- Unterteilung in mehrere Schritte (siehe folgendes Beispiel)

Halogene

Die elektrophile Addition funktioniert ausschließlich mit Chlor (Cl), Brom (Br) und Iod (I), da Fluor (F) so elektro-negativ ist, dass es die C — C-Bindung und die C — H-Bindung im Alken/Alkin angreift.



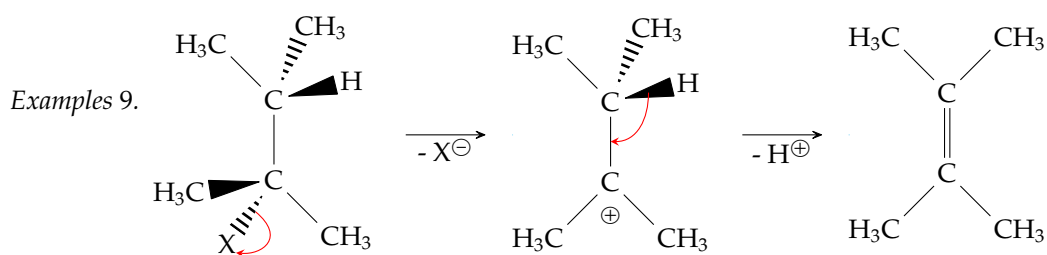
- Halogenmolekül wird polarisiert, das dem Alken/-in zugewandte Halogen-Atom wird partiell positiv und das abgewandte partiell negativ geladen
- Halogen-Kation addiert sich nun an die Doppelbindung des Alkens/-ins
- es entsteht ein negativ geladenes Halogen-Ion
- Das negativ-geladene Halogen-Ion greift nun an der anderen Seite des ehemaligen Ethen-Moleküls an
- Die "Doppelbindung" zum obigen Halogen-Kation wird gelöst und verbindet sich mit dem Halogen-Ion.



2.4 Eliminierung

- "elektrophile Addition rückwärts"
- Spaltet X-H ab
- 3 verschiedene Mechanismen: E_1 , E_1cB , E_2

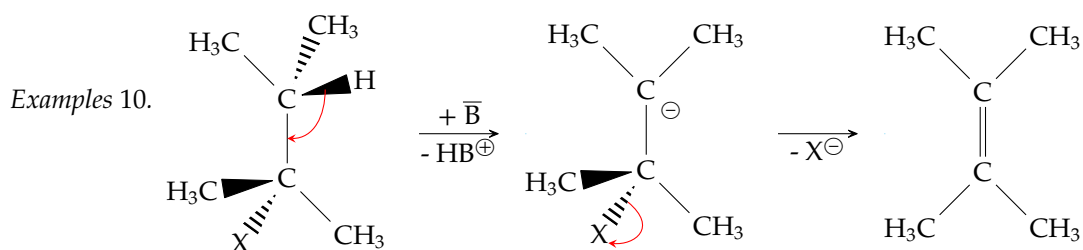
E_1



Vorgang

- Das Halogen-Atom wird im ersten Schritt abgespalten
- Das Wasserstoff-Atom wird im zweiten Schritt abgespalten

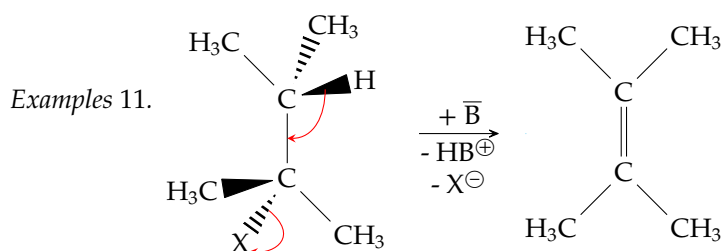
E_1cB



Vorgang

- Das Wasserstoff-Atom wird im ersten Schritt abgespalten
- Das Halogen-Atom wird im zweiten Schritt abgespalten

E_2



Vorgang

- Das Wasserstoff-Atom und das Halogen-Atom wird in **einem Schritt** abgespalten

Reaktionsgeschwindigkeit E_1 / E_1cB

Da die E_1 / E_1cB -Reaktion in zwei Schritten verläuft, beeinflusst nur eine Konzentration die Reaktionsgeschwindigkeit (der 1. Schritt muss vollendet sein, damit der 2. Schritt passieren kann)

$$v = k_1 \cdot c[\text{Substrat}]$$

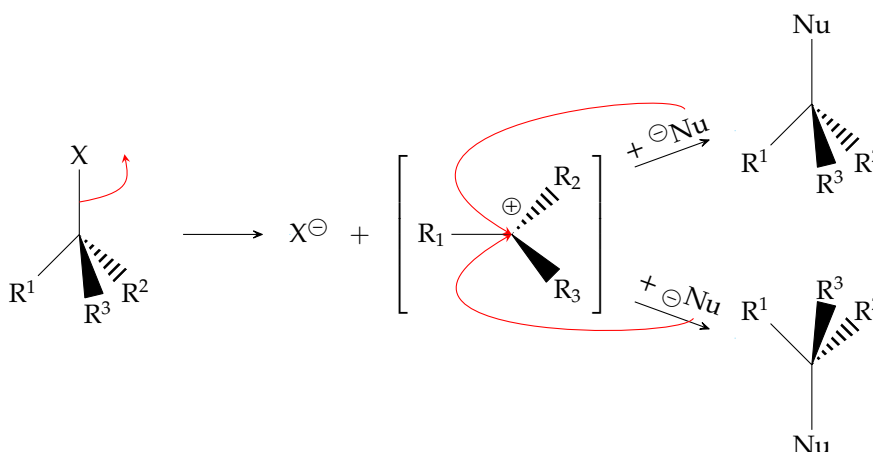
 E_1 / E_1cB

Da die E_2 -Reaktion in einem Schritt verläuft, beeinflussen **beide** Konzentrationen die Reaktionsgeschwindigkeit (Beide Edukte sind am 1. Schritt beteiligt)

$$v = k_2 \cdot c[\text{Substrat}] \cdot c[\text{Elektrophil}]$$

2.5 nukleophile Substitution S_N1

Examples 12.

**Schritte**

Die S_N1 -Reaktion verläuft 2-Schrittig

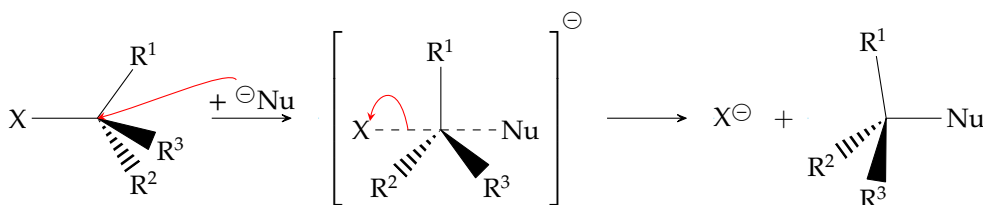
Reaktionsgeschwindigkeit

Bei einer S_N1 -Reaktion beeinflusst **nur eine** Konzentration die Reaktionsgeschwindigkeit (weil sie in 2 Schritten verläuft)

$$v = k_1 \cdot c[\text{Substrat}]$$

 S_N2

Examples 13.

**Schritte**

Die S_N2 -Reaktion verläuft 1-Schrittig

Reaktionsgeschwindigkeit

Bei einer S_N2 -Reaktion beeinflussen **beide** Konzentrationen die Reaktionsgeschwindigkeit (weil sie in einem Schritt verläuft)

$$v = k_2 \cdot c[\text{Substrat}] \cdot c[\text{Nukleophil}]$$

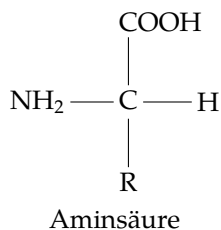
3 Stoffklassen

- Einteilung von Stoffen
- funktionelle Gruppe ist charakteristisch für Stoffklasse
- Atome in Molekülen bestimmen über chemische und physikalische Eigenschaften

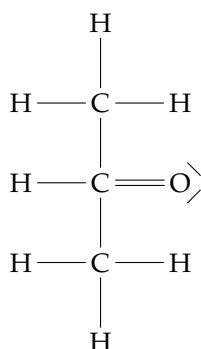
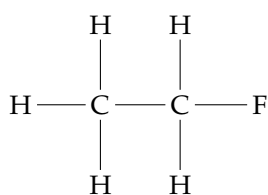
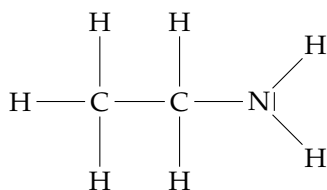
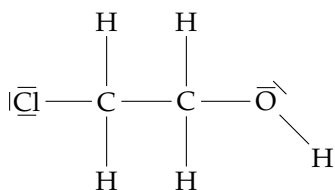
| Funktionelle Gruppe | Stoffklasse |
|---|---------------|
| Halogen $R-X$ | Halogenalkane |
| Amino-Gruppe $R-\overset{\text{H}}{\underset{\text{H}}{\text{N}}}$ | Amine |
| Hydroxy-Gruppe $R-\overset{\text{H}}{\text{O}}-\text{H}$ | Alkohole |
| Ether-Gruppe $R^1-\overset{\text{H}}{\text{O}}-R^2$ | Ether |
| Aldehyd-Gruppe $R-\overset{\text{O}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}$ | Aldehyde |
| Keto-Gruppe $\begin{matrix} R^1 \\ \diagdown \\ \text{C}=\text{O} \\ \diagup \\ R^2 \end{matrix}$ | Ketone |
| Carboxy-Gruppe $\begin{matrix} \text{O} \\ \diagup \\ \text{C} \\ \diagdown \\ \text{O} \end{matrix} \begin{matrix} \text{H} \\ \diagup \\ \text{O} \end{matrix}$ | Carbonsäure |

Mehrere Stoffklassen

Einige Moleküle können auch mehrere Stoffklassen haben, zum Beispiel:



4 Teste dich!



4.1 induktive Effekte

Aufgabe 4.1.1. Zeichne die Induktiven Effekte in die obigen Moleküle ein!

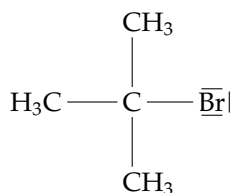
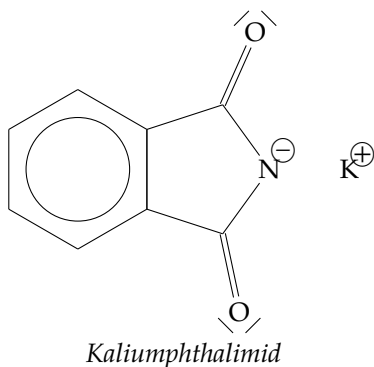
4.2 Stoffklassen

Aufgabe 4.2.1. Markiere in obigen Molekülen die funktionellen Gruppen und ordne sie begründet in eine oder mehrere Stoffklassen ein!

4.3 nukleophile Substitution

Aufgabe 4.3.1. Die Gabriel-Synthese ist ein Verfahren zur selektiven Herstellung primärer Amine. Ein Schritt beinhaltet die nukleophile Substitution.

Seien folgende Moleküle gegeben:

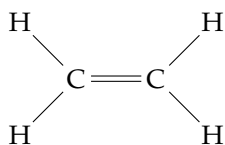


1-Brom-2-methylpropan (tert-Butylbromid)

Gebe alle Reaktionsprodukte sowie den zugehörigen Mechanismus, unter der Annahme dass primär die S_N1 stattfindet, an! Von der Konzentration welchen Moleküls ist die Reaktion primär abhängig?

4.4 elektrophile Addition

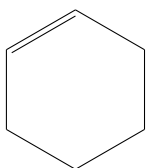
Aufgabe 4.4.1. Gebe den Reaktionsmechanismus für die elektrophile Addition von Br_2 sowie $\text{H}-\text{Br}$ an Ethen (das folgende Molekül) an:

*Ethen*

Aufgabe 4.4.2. Begründe: Würde auch die Addition an Ethin funktionieren? Die Addition an Ethan?

4.5 radikalische Substitution

Aufgabe 4.5.1. Die Wohl-Ziegler-Reaktion stellt eine radikalische Bromierung von Alkenen dar. Gebe alle möglichen Produkte der Wohl-Ziegler-Reaktion mit Cyclohexen (das folgende Molekül) an!

*Cyclohexen*

4.6 Eliminierung

Aufgabe 4.6.1. 2-Methylpropan-2-ol wird in einer sauren wässrigen Lösung gelöst. Zeichne die Moleküle und gebe den Reaktionsmechanismus der Eliminierung 1. Ordnung an.

Begründe, von welchen Molekülen die Reaktionsgeschwindigkeit abhängt.

Aufgabe 4.6.2. In einer Lösung liegen Brommethan und Hydroxid-Ionen vor. Zeichne die Moleküle und gebe den Reaktionsmechanismus der Eliminierung 2. Ordnung an.

Begründe, von welchen Molekülen die Reaktionsgeschwindigkeit abhängt.