

# 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

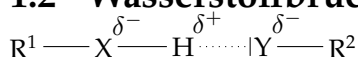
### 1.1.3 Keesom-Kraft

- 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

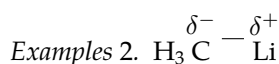
#### 2.1.1 induktive Effekte

- 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

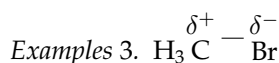
##### +I-Effekt (Schiebend)

- 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 ( $-\text{SO}_3\text{H}$ )

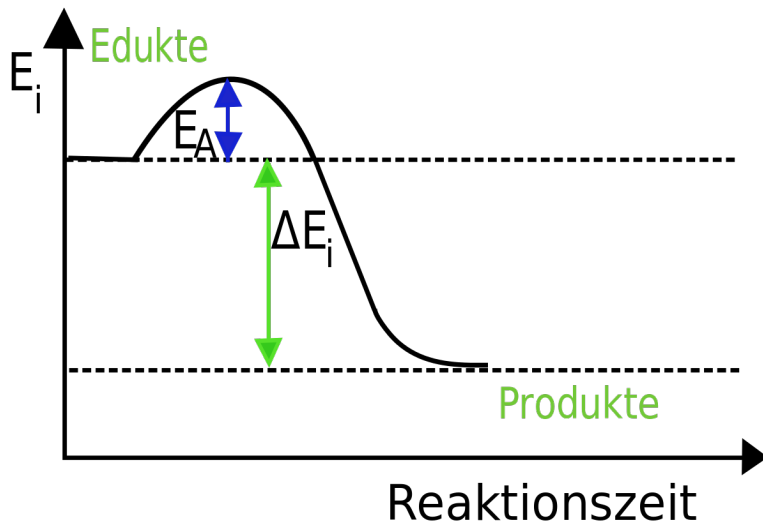


#### 2.1.2 Reaktionsenthalpie

Was ist das?

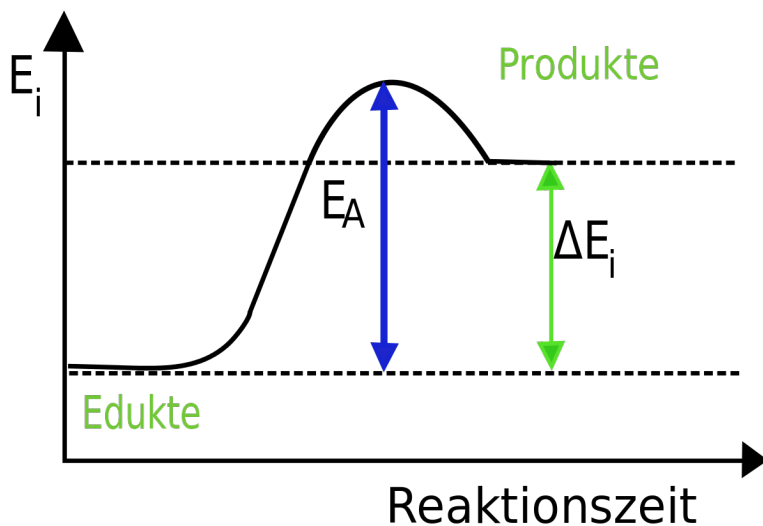
- $\Delta H_R$  gibt die Änderung der Enthalpie ( $\approx$ Energie) im Verlauf einer Reaktion an, bei konstantem Druck
- Sie entspricht der Differenz zwischen Produkt und Edukt:  $\Delta H_R = H_{\text{Produkt}} - H_{\text{Edukt}}$
- Da sie nur vergleichbar ist, wenn die Bedingungen gleich sind, verwendet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

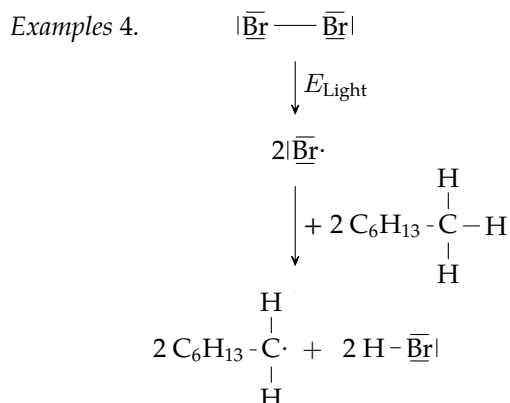
## 2.2 radikalische Substitution

- 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

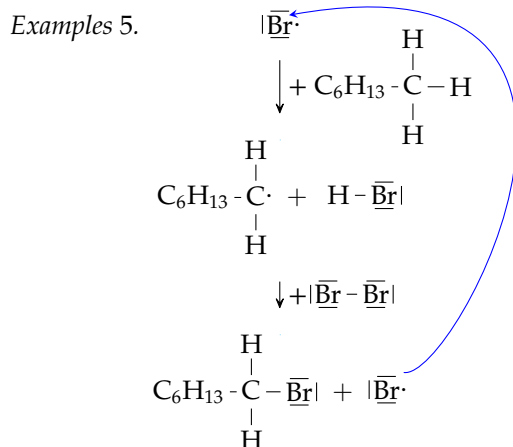
- Hydrolytische Aufbrechung vom Brom

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



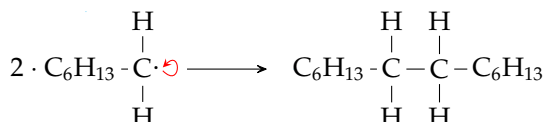
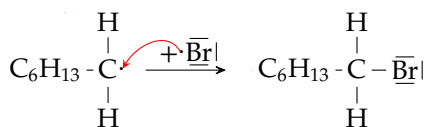
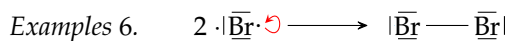
### Kettenfortschritt / Folgereaktion / Prolongation

- 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.



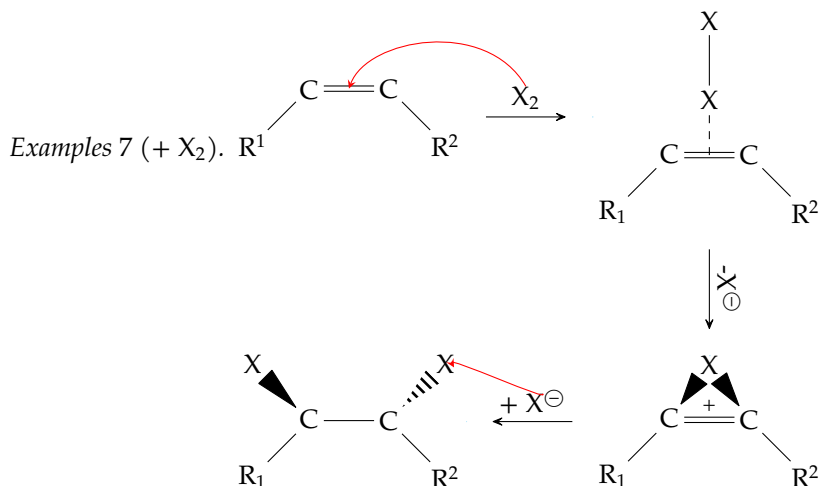
## 2.3 elektrophile Addition

### Mechanismus

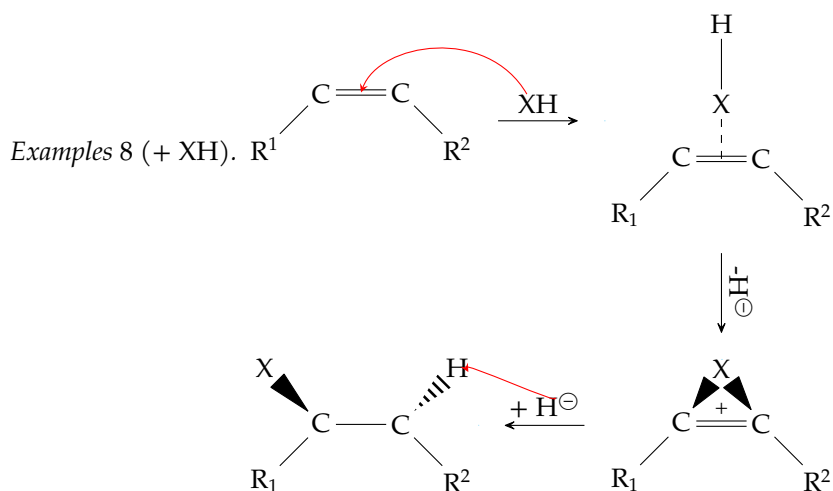
- Ungesättigte Kohlenwasserstoffe wie Alkene oder Alkine reagieren mit Halogenen
- Halogene greifen Doppelbindung im Substrat an
- Unterteilung in mehrere Schritte (siehe folgendes Beispiel)

### 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.



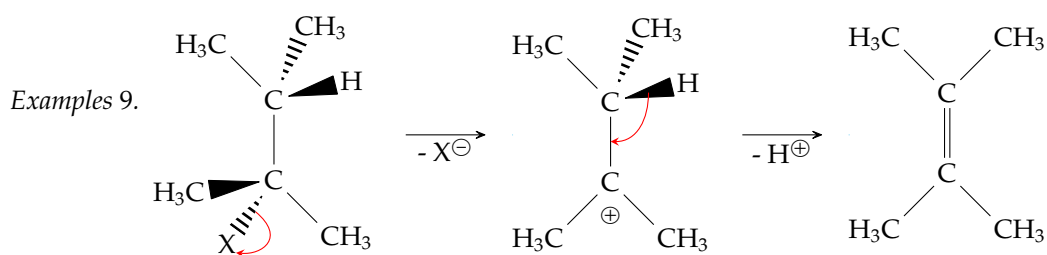
- Halogenmolekül wird polarisiert, das dem Alken/-in zugewandte Halogen-Atom wird partiell positiv und das abgewandte partiell negativ geladen
- Halogen-Kation addiert sich nun an die Doppelbindung des Alkens/-ins
- es entsteht ein negativ geladenes Halogen-Ion
- Das negativ-geladene Halogen-Ion greift 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:  $E_1$ ,  $E_1cB$ ,  $E_2$

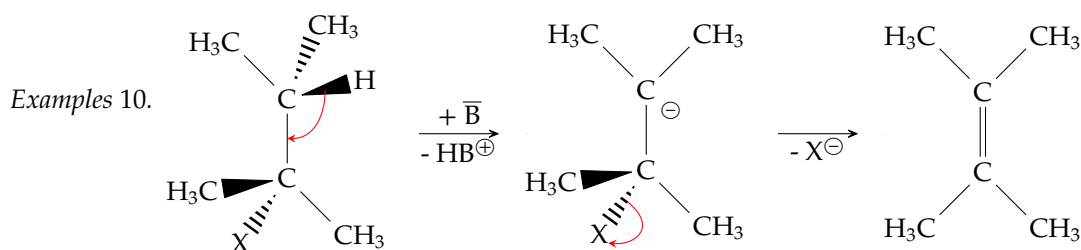
$E_1$



### Vorgang

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

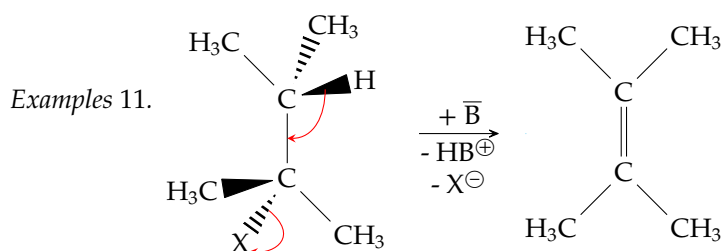
$E_1cB$



### 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)

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

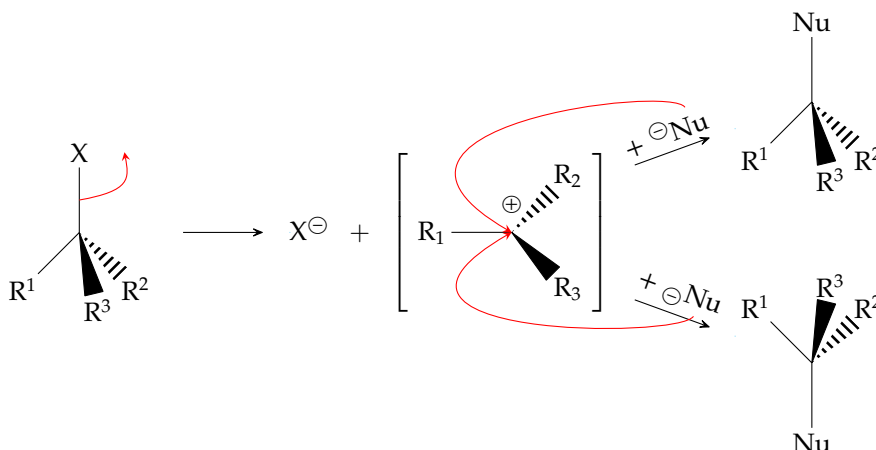
 $E_1 / E_1cB$ 

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

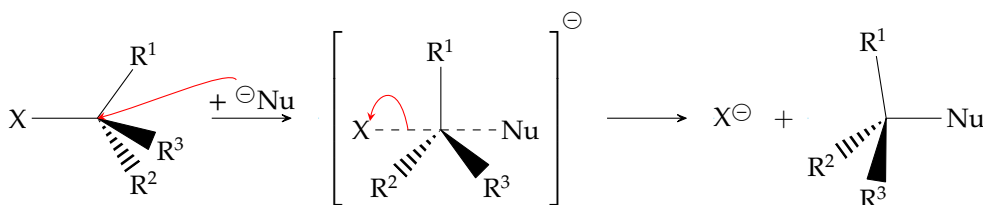
**Reaktionsgeschwindigkeit**

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)

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

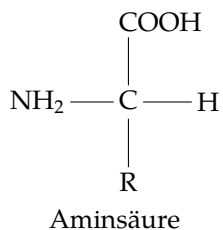
### 3 Stoffklassen

- 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 $\begin{array}{c} R^1 \\ \diagdown \\ \text{C}=\text{O} \\ \diagup \\ R^2 \end{array}$	Ketone
Carboxy-Gruppe $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \\ \text{C} \\ \diagdown \\ \text{O} \end{array} \begin{array}{c} \text{H} \\ \diagup \\ \text{O} \end{array}$	Carbonsäure

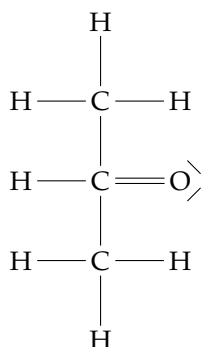
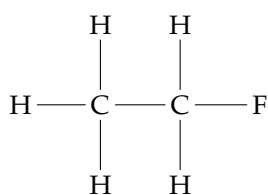
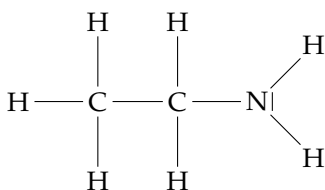
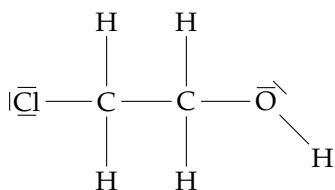
#### Mehrere Stoffklassen

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!

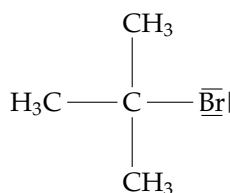
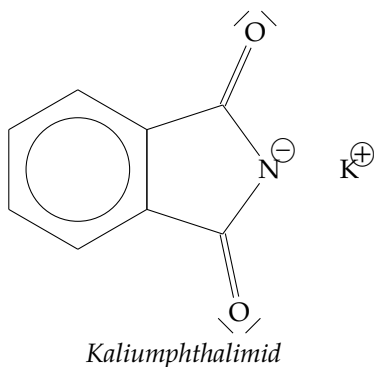
### 4.2 Stoffklassen

**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 behilft sich dabei der nukleophilen Substitution.

Seien folgende Moleküle gegeben:

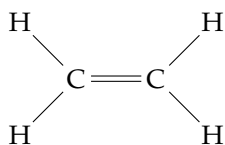


2-Brom-2,2-Methanylethan

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

### 4.4 elektrophile Addition

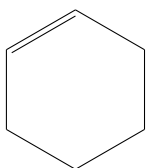
**Aufgabe 4.4.1.** Gebe den Reaktionsmechanismus für die elektrophile Addition von  $\text{Br}_2$  sowie  $\text{H}-\text{Br}$  an Ethen (das folgende Molekül) an:

*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.