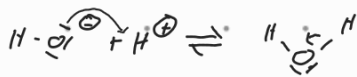
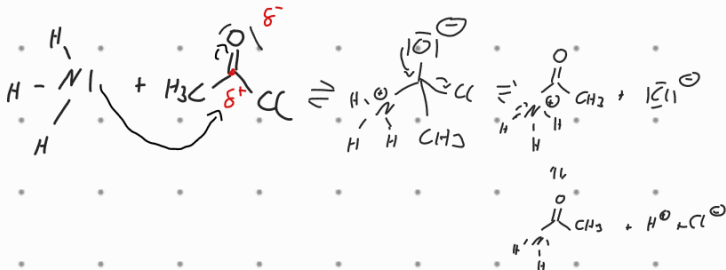


Seminar: Reaktionsmechanismen

ein Pfeil markiert Bewegung von Elektronen (paaren) und nicht von Teilchen

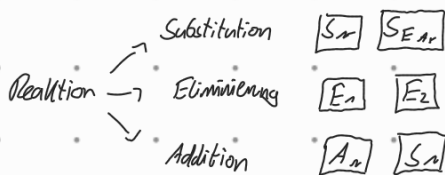


Lewis Base	Lewis Säure
Nukleophil	Elektrophil
Elektronenüberschuss	Elektronenmangel



King Draw
↳ Komplex zeichnen

Reaktionsmechanismen:

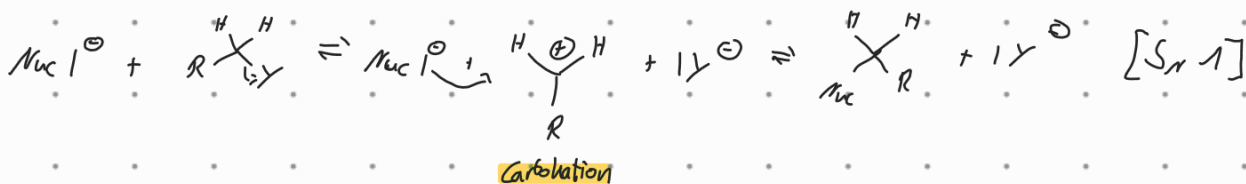


Nucleophile Substitution



- Konzentriert, einstufig
- Rückseitenangriff ~ Walden'sche Umkehrung / Inversion
- sp^3 -hybridisierter Kohlenstoff

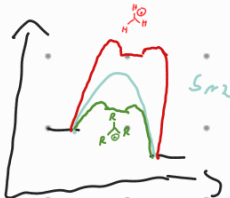
kinetik
 $v = k \cdot [Nuc] \cdot [Elekt.]$ \rightarrow E_2
 ↳ Reaktion 2. Ordnung



- kinetik: $v = k' \cdot [Elekt.] \rightarrow$ Reaktion 1. Ordnung
- es entsteht Racemat

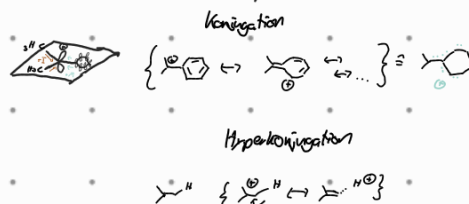
- 2. stufig
- Carbokation (planar)

Vergleich:



Wann S_N1/S_N2 ?

- 1) S_N2 steht gegenüber S_N1
- 2) S_N1 ist stabiler Carbokation
umso eher S_N1

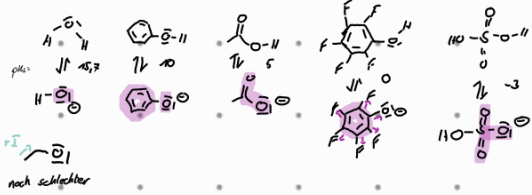


T_{Xp}	S_{N1}	S_{N2}	Beispiel
Methyl	---	+++	$As-C-I$
primär	--	++	$\text{---}I$
sekundär	+	+	$\text{---}I$
tertiär	++	-	$\text{---}I$
Alkyl/Benzyl	++ (+)	++ (+)	$\text{Allyl} \text{---} I$ / $\text{Benzyl} \text{---} I$
α -Carbonyl	---	++	$\text{---}I$

Abgangsgruppenqualität:

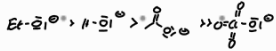
X^-	pK_{aH}	rel. Rate
F^-	+3	langsam
Cl^-	-7	mittel schnell
Br^-	-9	schnell
I^-	-10	sehr schnell

=> je basischer desto schlechter die Abgangsgruppe



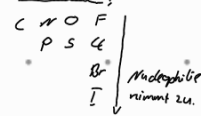
Nucleophilie:

je basischer, umso besser das Nucleophil bei gleichem nucleophilen Atom

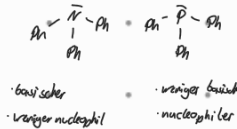


Nuc	pK_{aH}	rel. Rate
$Ph-S^-$	~6.4	$5 \cdot 10^7$
$H-S^-$	~15.7	12000
$Ph-O^-$	~10	2000
$Ac-O^-$	~5	80
H_2O	~15.7	1
CO_3^{2-}	~10	0

Nucleophilie nimmt ab



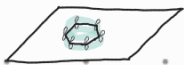
Nucleophilie nimmt zu



I^- ist gute Abgangsgruppe (Halogen)
 I^- ist bestes Nucleophil (Halogen)

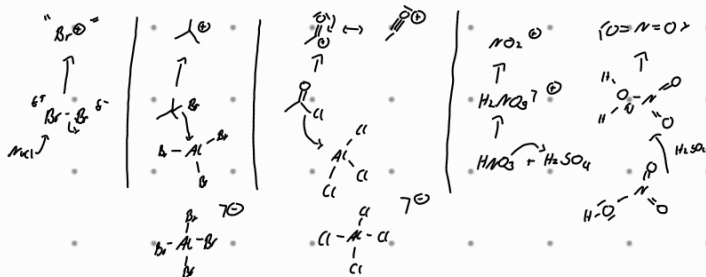
Elektrophile aromatische Substitution:

Nucleophil?



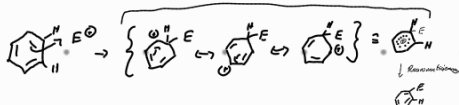
π -Wolke des Aromaten ist Elektronenquelle/Nucleophil

Elektrophile?

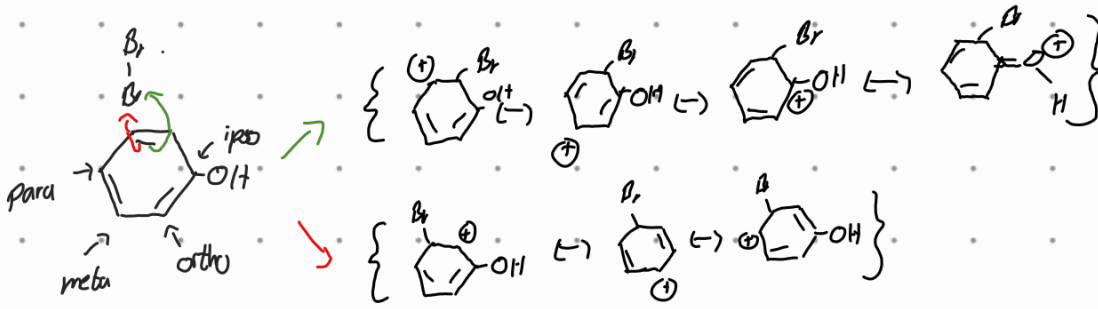


allgemeiner Mechanismus:

π -Komplex



Seminar: Nuc. und elektr. aromatische Substitution + Eliminierung

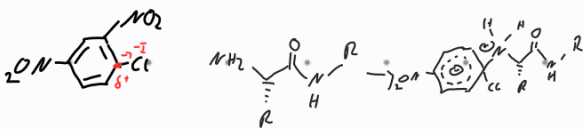


für „Hausgebrauch“

↳ schon wo -M Effekt Elektronendichte verändert

Effekt	Beispiel	Reaktivität S_{EA}	Dirigieren E^+
+ I	Alkyl	+	ortho/para
+ M	$-\text{OMe}$ $-\text{NH}_2$ ↳ $-\text{OR}$ $-\text{NR}_2$	+++	ortho/para
- M	$-\text{NO}_2$ $-\text{C}\equiv\text{N}$ ↳ $-\text{C}(=\text{O})\text{R}$	--- (-)	meta
- I	$-\text{F}$ $-\text{CF}_3$	-	meta

Nucleophile aromatische Substitution:



Beispiel:

