

| | |
|---|--|
| 1 Ladung, Teilladung, Oxidationszahl, Formale Ladung | |
| 2 Elektrophile und Nucleophile | |
| 3 Elektrophile Reaktionen | |
| 3.1 Reaktion von 1-Hexen mit Brom | |
| 3.2 Reaktion von 1-Hexen mit Chlorwasserstoff | |
| 3.3 Reaktion von 1-Hexen mit Wasser (säurekatalysiert) | |
| 3.4 Mesomerie | |
| 3.5 Reaktion von Benzol mit Brom (katalysiert mit Eisen(III)-bromid) | |
| 3.6 Reaktion von Benzol mit Nitroniumionen (säurekatalysiert) | |
| 3.7 Vergleich von Elektrophiler Addition und Elektrophiler Substitution | |
| 4 Induktive und Mesomere Effekte | |
| 5 Nucleophile Reaktionen | |
| 5.1 Reaktion von Ethanol mit Ethanal (säurekatalysiert) | |
| 5.2 Reaktion von Ethanol mit Ethansäure (säurekatalysiert) | |
| 5.3 Reaktion von Hydroxidionen mit Ethansäureethylester (basenvermittelt) | |
| 5.4 Reaktion von Ammoniak mit Ethansäure (säurekatalysiert) | |
| 6 Übersicht nach Stoffklassen | |

Seite:

Vorkenntnisse:

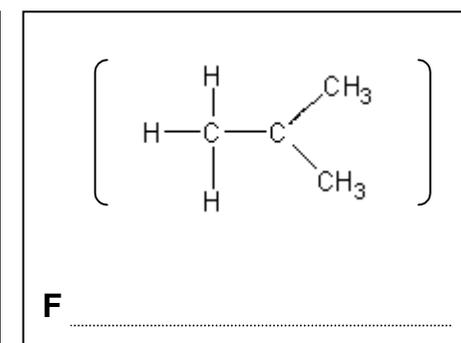
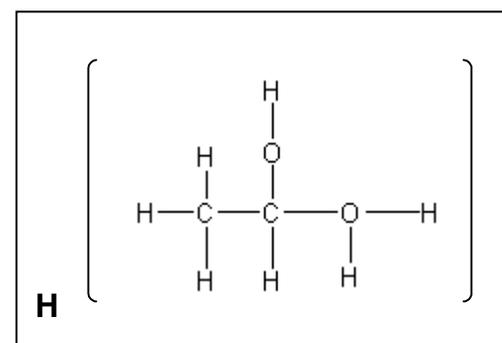
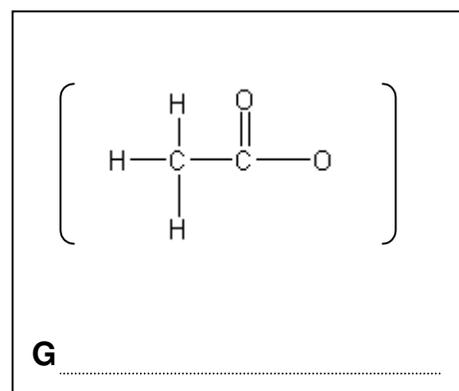
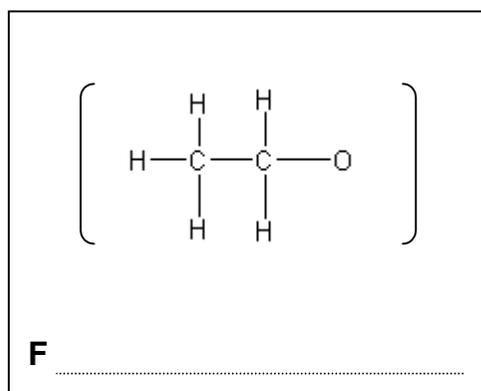
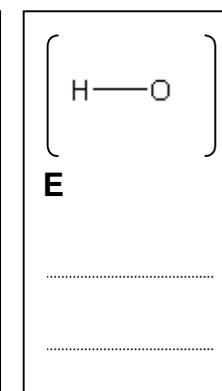
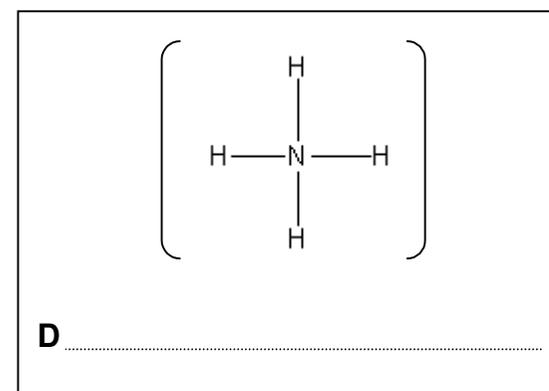
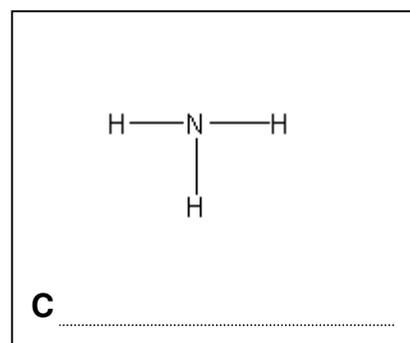
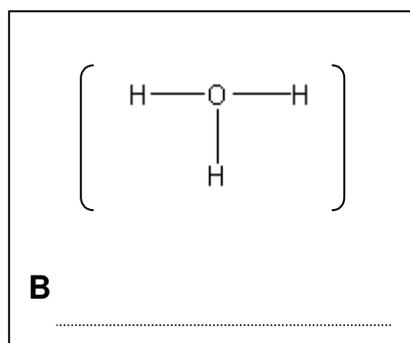
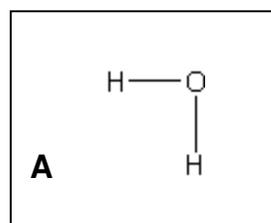
| | |
|----|--|
| 2 | • Atombindung , Nichtmetalle, Valenzelektronen, Bindende und Freie Elektronenpaare, Orbitale, Kästchenschema, |
| 3 | Hybridisierung, Elektronenpaarabstoßungsmodell, räumlicher Bau tetraedrisch, trigonal planar, linear |
| 4 | • Stoffklassenübersicht , einfache Kohlenwasserstoffe |
| 5 | (kettenförmig, ringförmig mit Einfach-, Doppel-, |
| 6 | Dreifachbindungen und mit Mesomerie), halogenierte |
| 7 | Kohlenwasserstoffe, sauerstoffhaltige Funktionelle Gruppen |
| 8 | (Alkohole, Ether, Aldehyde, Ketone, Carbonsäuren, Ester) |
| 9 | • Zwischenmolekulare Kräfte |
| 10 | • Arbeitsheft Säuren und Basen |
| 11 | |

Verknüpfung mit anderen Themenbereichen:

| | |
|----|--|
| 12 | • Kohlenhydrate , Glykosidische Bindung, anomeres C-Atom, reduzierende Zucker |
| 13 | • Proteine , Peptidbindung |
| 14 | • Kunststoffe , Polyaddition, Polykondensation |
| 15 | |
| 16 | |

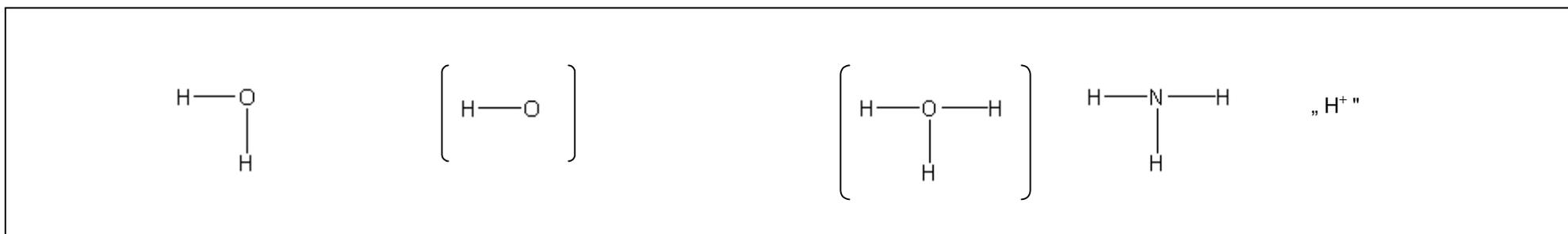
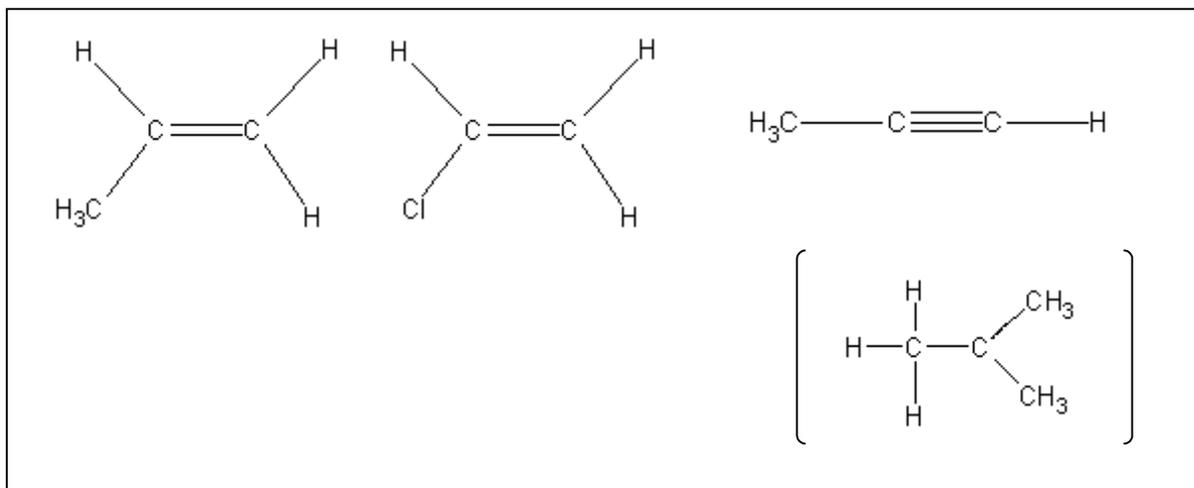
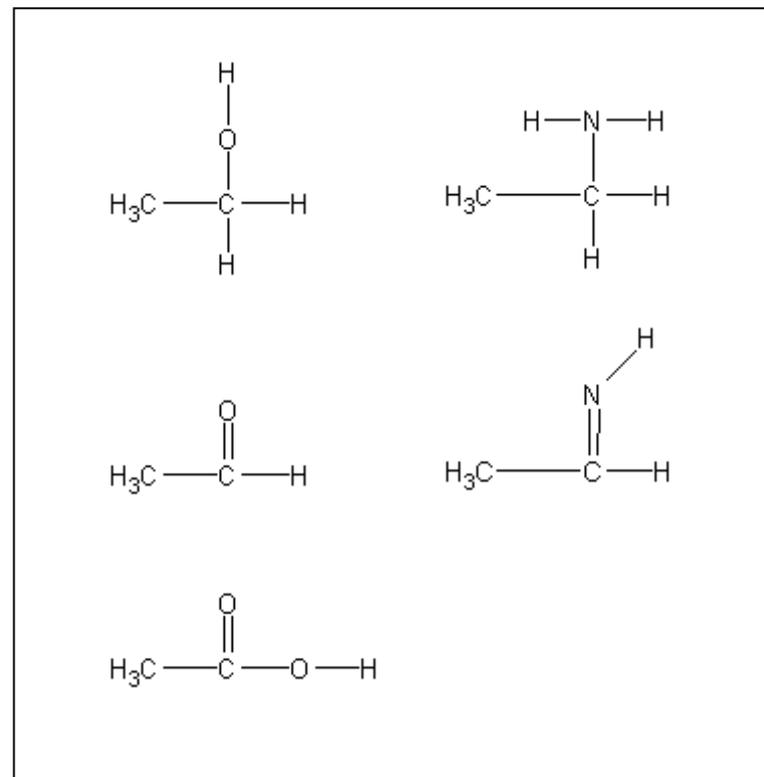
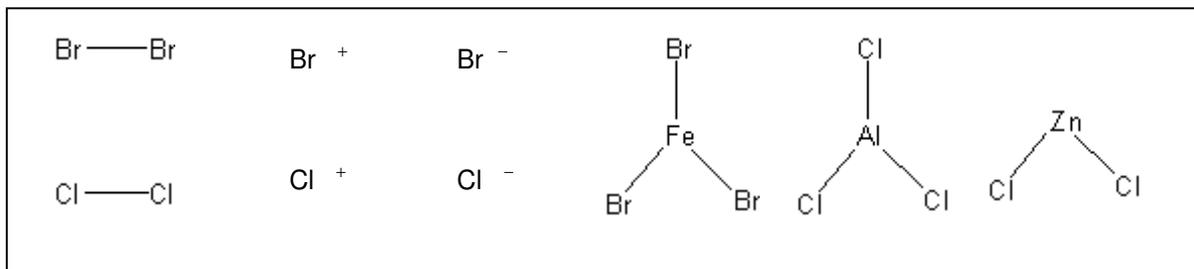
| Begriff | Ladung | Teilladung | Oxidationszahl (OZ) | Formale Ladung |
|-----------------------------------|---|---|--|---|
| Bestimmung aus der Strukturformel | - Summe aller Oxidationszahlen - Summe aller formalen Ladungen - bei Salzen aus den Indices | - nur bei polaren Atombindungen - je nach Elektronegativität | - Hauptgruppennummer minus Valenzelektronenzahl nach a) heterolytischer Bindungsspaltung bei ungleichen Elementen gemäß der EN oder b) homolytischer Bindungsspaltung bei gleichen Elementen | - Hauptgruppennummer minus Valenzelektronenzahl nach homolytischer Bindungsspaltung (auch bei polaren Atombindungen!) |
| Symbol | +1, +2, +3, ... -1, -2, -3, ... | δ^+ , δ^- | +I, +II, +III, ... -I, -II, -III, ... | \ominus $2\ominus$ \oplus $2\oplus$ |

Ergänze die fehlenden freien Elektronenpaare und gib für alle Moleküle mit Rot bzw. Blau die Ladung und die Teilladungen an. Ordne allen Atomen die Oxidationszahl (Orange) und die Formale Ladung (Grün) zu. Die Ladung und die Formale Ladung „Null“ werden nicht angegeben, im Gegensatz zur Oxidationszahl „Null“. Benenne alle Moleküle, die mit einem Beschriftungsstrich versehen sind.

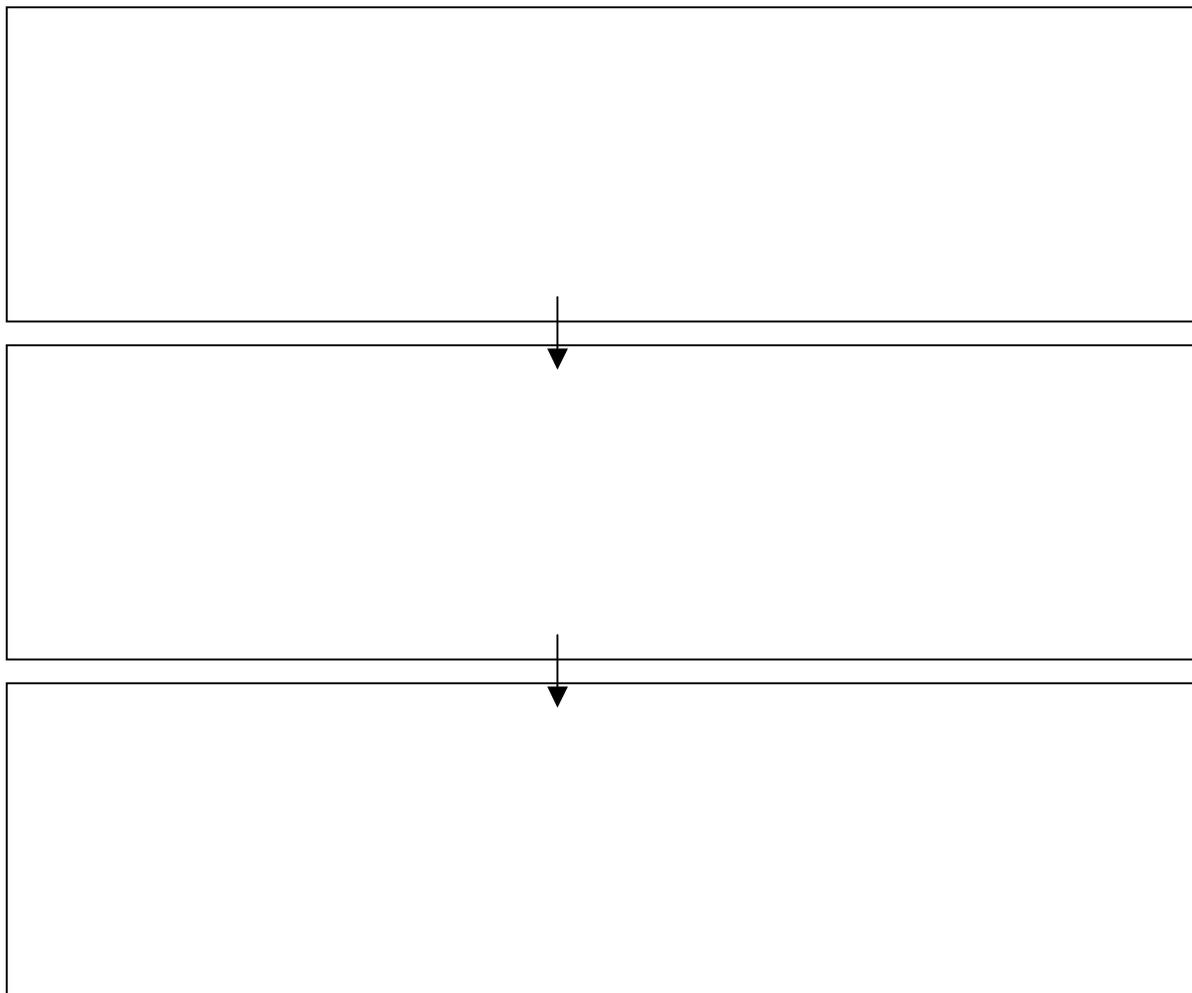


Ein Nucleophil ist ein „kernliebendes“ Teilchen mit einem Elektronenüberschuss. Man erkennt diesen an einer negativen Ladung und einer negativen Teilladung. Alle Nucleophile besitzen ein freies Elektronenpaar. Ein Elektrophil ist ein „elektronenliebendes“ Teilchen mit einem Elektronenmangel. Man erkennt diesen an einer positiven Ladung oder einer positiven Teilladung. Auch ein Elektronensextett statt des üblichen Elektronenoktetts ist ein solcher Hinweis.

Ergänze die fehlenden freien Elektronenpaare und gib für alle Moleküle die Ladung und die Formalen Ladungen an. Kennzeichne bei jedem Molekül nucleophile freie Elektronenpaare mit blau und positiv polarisierte elektrophile Atome mit Rot.



3.1 Reaktion von 1-Hexen mit Brom



π -Komplex

① nucleophiler Angriff des

am

② Bindungsspaltung
der Bindung.

Cyclisches Bromoniumion

③
des freien Elektronenpaars des

am

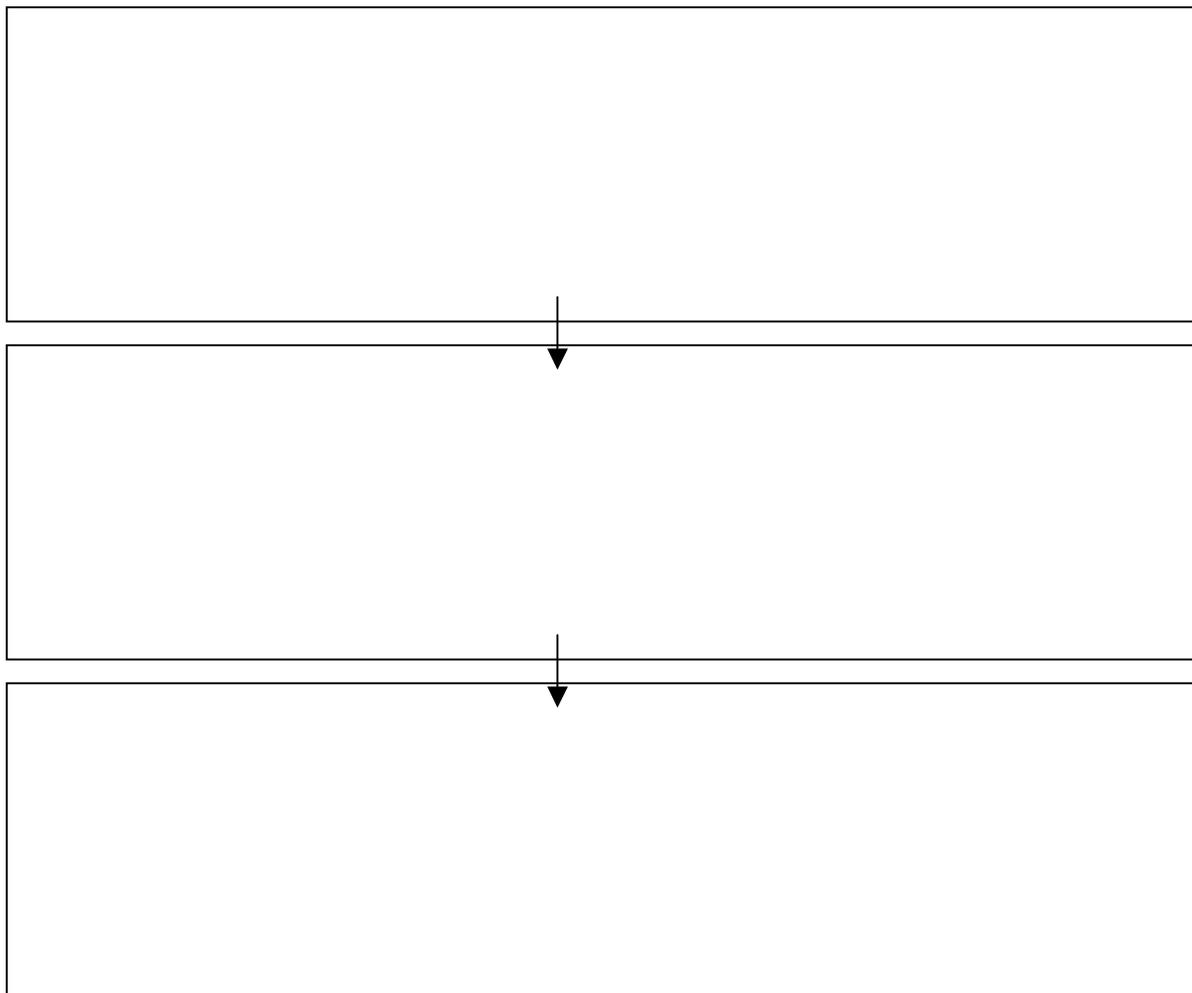
④ Bindungsspaltung
der Bindung

R = Butylrest: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$

Benenne die Ausgangs- und Endstoffe. Markiere nucleophile Elektronenpaare blau und elektrophile Atome rot. Stelle die Elektronenpaarverschiebungen und Bindungsspaltungen von ① bis ④ mit Orange dar. Erstelle die Strukturformel der Zwischenstufe. Markiere im Endstoff die Bromatome mit einem grünen Kasten.

Da das des Alkens an einem angreift, und das an die Doppelbindung addiert wird, nennt man den Mechanismus auch

3.2 Reaktion von 1-Hexen mit Chlorwasserstoff

 **π -Komplex**

① nucleophiler Angriff des

am

② Bindungsspaltung
der Bindung.**Carbeniumion**③ oder
des freien Elektronenpaares des

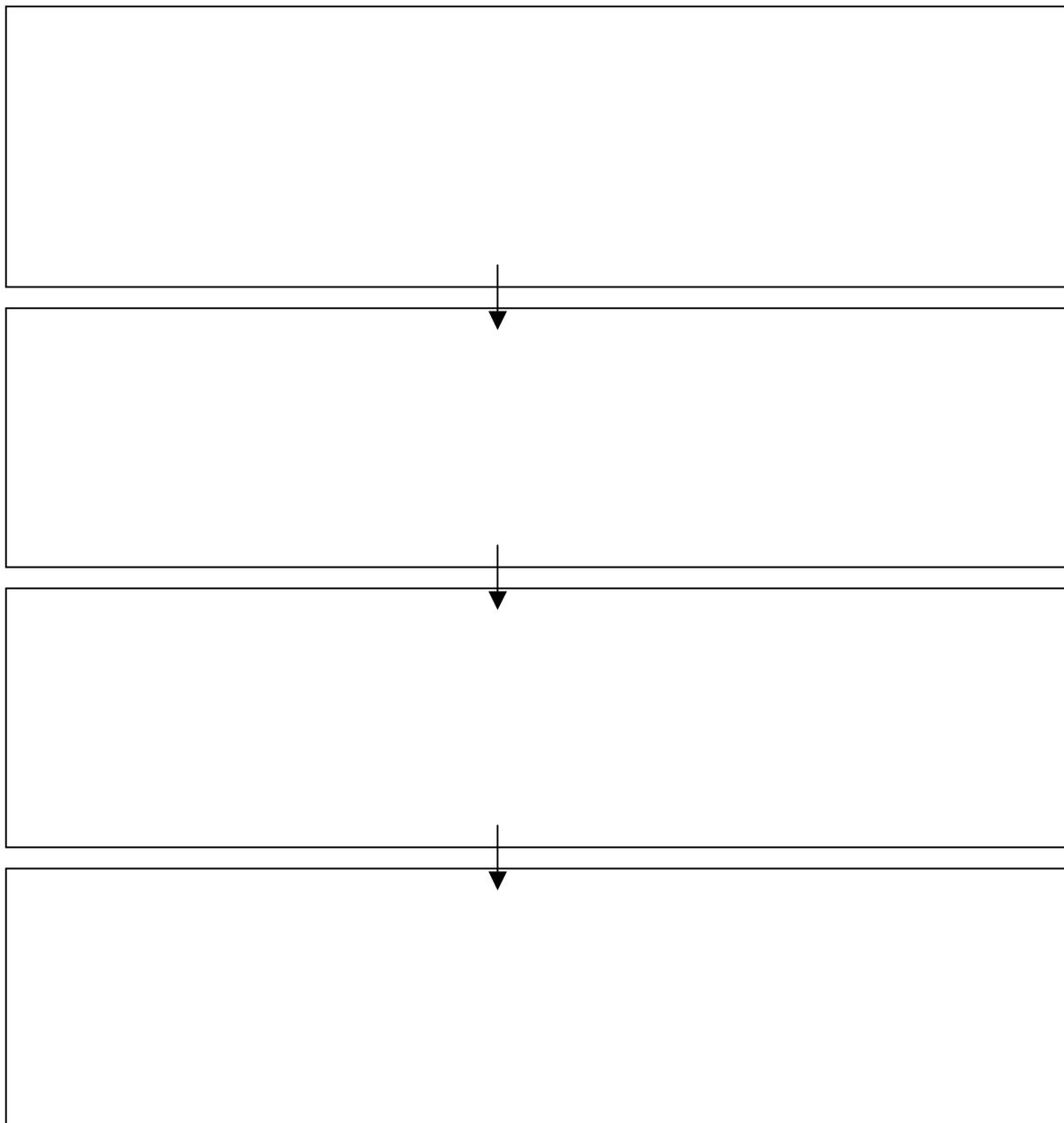
am C-Atom mit

R = Butylrest: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$

Benenne die Ausgangsstoffe. Der Endstoff ist 2-Chlorhexan*. Markiere nucleophile Elektronenpaare blau und elektrophile Atome rot. Stelle die Elektronenpaarverschiebungen und Bindungsspaltungen von ① bis ③ mit Orange dar. Erstelle die Strukturformel der Zwischenstufe.

(*1-Chlorhexan entsteht nicht, da das primäre Carbeniumion instabil ist.)

3.3 Reaktion von 1-Hexen mit Wasser (säurekatalysiert)

 **π -Komplex**

① nucleophiler Angriff des

am

(in nichtwässrigen Lösungsmitteln H^+ statt H_3O^+ möglich)**Carbeniumion**

② _____ oder _____

des freien Elektronenpaares des

am _____ C-Atom mit

③ Regeneration des _____

R = Butylrest: $CH_3CH_2CH_2CH_2-$

Benenne die Ausgangsstoffe. Der Endstoff ist 2-Hexanol*. Markiere nucleophile Elektronenpaare blau und elektrophile Atome rot. Stelle die Elektronenpaarverschiebungen und Bindungsspaltungen von ① bis ③ mit Orange dar. Erstelle die Strukturformel der Zwischenstufe. Markiere im Endstoff das Wasserstoffatom und die Hydroxygruppe aus dem Wassermolekül mit einem grünen Kasten. (*1-Hexanol entsteht nicht, da das primäre Carbeniumion instabil ist.)

3.4 Mesomerie

Der Begriff Mesomerie leitet sich ab von mesos (griech.) = mitten und meros (griech.) = Teilchen, er bedeutet also „mittleres Teilchen“. Mesomerie tritt dann auf, wenn π -Elektronenpaare oder freie Elektronenpaare über mehrere Atome verteilt, d.h. sind. Dieser Zustand ist energieärmer als der gewöhnliche, Die tatsächliche Elektronenverteilung kann für delokalisierte Elektronen nicht durch eine Strukturformel korrekt wiedergegeben werden, sondern nur durch nichttextistente Grenzstrukturen. Das tatsächliche Teilchen „schwingt“ nicht etwa zwischen diesen Grenzstrukturen hin und her, sondern es liegt dauerhaft dazwischen.

Erster Regelsatz zur Erstellung von Grenzstrukturen:

- (1) Freie Elektronenpaare oder π -Elektronenpaare werden immer um eine Position verschoben und werden dabei zu freien Elektronenpaaren oder π -Elektronenpaaren. Im Gegensatz dazu werden σ -Elektronenpaare nicht verschoben.
- (2) Die Gesamtzahl aller Valenzelektronen im Molekül bleibt dabei gleich.
- (3) Die Oktettregel ist für alle Elemente der 2. Periode streng zu beachten.
- (4) Bei Ladungstrennung (negative und positive Formale Ladungen im gleiche Molekül) bleibt die Gesamtladung erhalten.

Zweiter Regelsatz zur Bedeutung der jeweiligen Grenzstruktur:

- (5) Eine möglichst große Anzahl von Atombindungen wird angestrebt.
- (6) Möglichst wenige Formale Ladungen mit möglichst geringem Betrag werden angestrebt.
- (7) Zwei gleichnamige Formale Ladungen kommen niemals direkt benachbart vor.
- (8) Formale Ladungen sind dann günstig, wenn sie mit den Teilladungen übereinstimmen.

Dritter Regelsatz zur Abschätzung der Mesomeriestabilisierungsenergie:

- (9) Je mehr Grenzstrukturen möglich sind, und je günstiger diese sind, desto größer ist die Mesomeriestabilisierungsenergie.

Ethen



Methanal



1,3-Butadien



3.5 Reaktion von Brom mit Benzol (katalysiert mit Eisen(III)bromid)

The diagram consists of four empty rectangular boxes arranged vertically, connected by downward-pointing arrows. These boxes are intended for the student to draw the step-by-step mechanism of the bromination of benzol.

Aktivierung des Elektrophils

① nucleophiler Angriff des

am

② Bindungsspaltung der
..... Bindung. **π -Komplex**

③ nucleophiler Angriff des

am

 σ -Komplex (\rightarrow ④ Bindungsspaltung der
..... Bindung

(= Regeneration des Katalysators)

⑤ nucleophiler Angriff des

am

⑥ Bindungsspaltung der
..... Bindung

(= Rearomatisierung)

Benenne die Ausgangs- und Endstoffe. Markiere nucleophile Elektronenpaare blau und elektrophile Atome rot. Stelle die Elektronenpaarverschiebungen und Bindungsspaltungen von ① bis ⑥ mit Orange dar. Erstelle eine mögliche Strukturformel der Zwischenstufe. Markiere bei den Endstoffen die Bromatome aus dem Brommolekül mit einem grünen Kasten.

Es handelt sich hier um eine

.....

3.6 Reaktion von Brom mit Nitroniumion (säurekatalysiert)

The diagram consists of four empty rectangular boxes arranged vertically, connected by downward-pointing arrows. These boxes are intended for the student to draw the step-by-step mechanism of the reaction between bromine and a nitronium ion, catalyzed by acid.

Aktivierung des Elektrophils

- ① nucleophiler Angriff des
-
- am
- ② Bindungsspaltung der
- Bindung. (Wasserabspaltung!)

 π -Komplex

- ③ nucleophiler Angriff des
-
- am

 σ -Komplex (\rightarrow

- ④ Bindungsspaltung der
- Bindung
- (= Regeneration des Katalysators)
- (= Rearomatisierung)

Benenne die Ausgangs- und Endstoffe. Markiere nucleophile Elektronenpaare blau und elektrophile Atome rot. Stelle die Elektronenpaarverschiebungen und Bindungsspaltungen von ① bis ④ mit Orange dar. Erstelle eine mögliche Strukturformel der Zwischenstufe. Markiere bei den Endstoffen die Nitrogruppe aus dem Salpetersäuremolekül mit einem grünen Kasten.

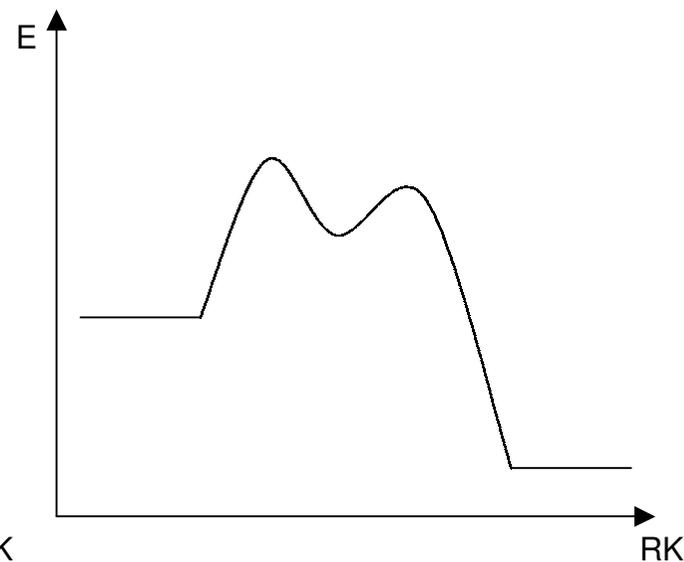
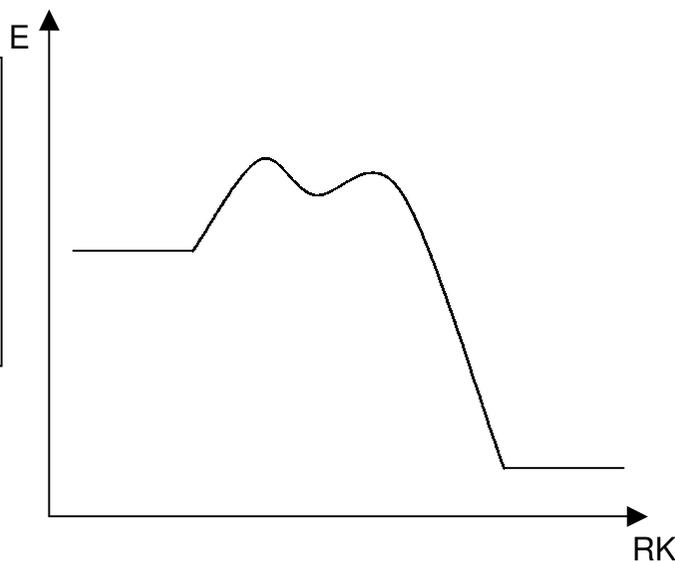
Es handelt sich hier um eine

.....

3.7 Vergleich von Elektrophiler Addition und Elektrophiler Substitution

| | Elektrophile Addition | Elektrophile Substitution |
|---|-----------------------|---------------------------|
| ...ist typisch für die Stoffklasse der A | | |
| ...benötigt eine Aktivierung des Elektrophils? - wenn ja, durch welchen Katalysator? | | |
| ...durchläuft einen π -Komplex? B | | |
| ...durchläuft besondere σ -Komplexe? C | | |
| ...durchläuft einen Eliminierungsschritt, bei dem eine Regeneration des Katalysators und eine Rearomatisierung stattfinden? | | |
| ...Endstoffe der Reaktion mit Brom? D | | |

Ordne in den Energiediagrammen dem Kurvenverlauf die Buchstaben **A** bis **D** zu. Gib an, welchen Einfluss der Katalysator auf den Kurvenverlauf hat! Begründe, ob es sich bei den Katalysatoren um elektrophile oder nucleophile Teilchen handeln muss!



Die π -Elektronen der Alkene und der Aromaten greifen bei Elektrophilen Reaktionen (Kapitel 3) als Nucleophil an. Das Carbonyl-C-Atom der Aldehyde, Ketone und Carbonsäuren wird bei Nucleophilen Reaktionen (Kapitel 5) als Elektrophil angegriffen.

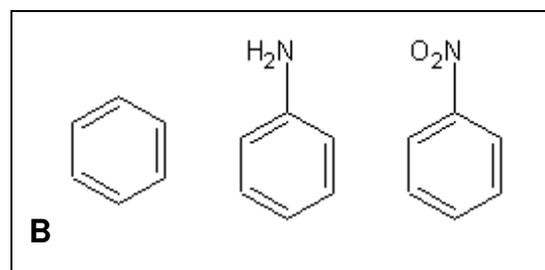
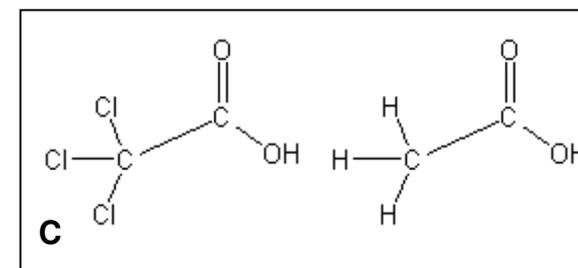
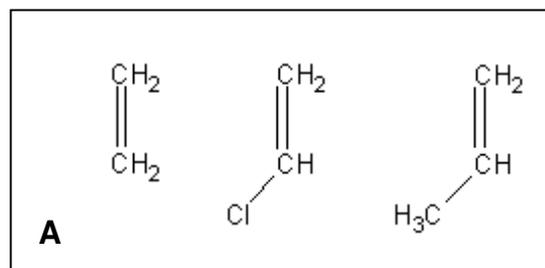
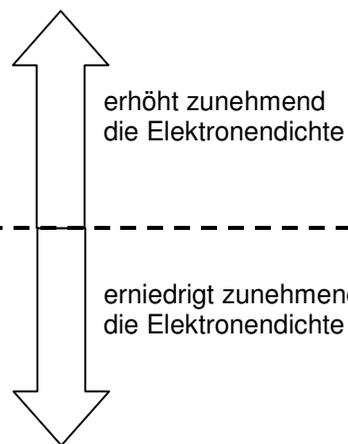
Durch verschiedene Substituenten in der Nachbarschaft dieser funktionellen Gruppen kann die Elektronendichte verändert werden.

| Funktionelle Gruppe der Stoffklasse wirkt als | Nucleophil | Elektrophil |
|--|---------------|-----------------------------|
| Beispiel | Alken, Aromat | Aldehyd, Keton, Carbonsäure |
| Angreifendes Teilchen wirkt als | Elektrophil | Nucleophil |
| Beispiel | Bromkation | Hydroxidion |
| Ein direkt benachbarter Substituent der die Elektronendichte erhöht , wirkt | | |
| Ein direkt benachbarter Substituent der die Elektronendichte erniedrigt , wirkt | | |

Induktive Effekte (Buchstabe I) wirken entlang von σ -Bindungen und wirken sich nur auf direkt benachbarte Atome aus.

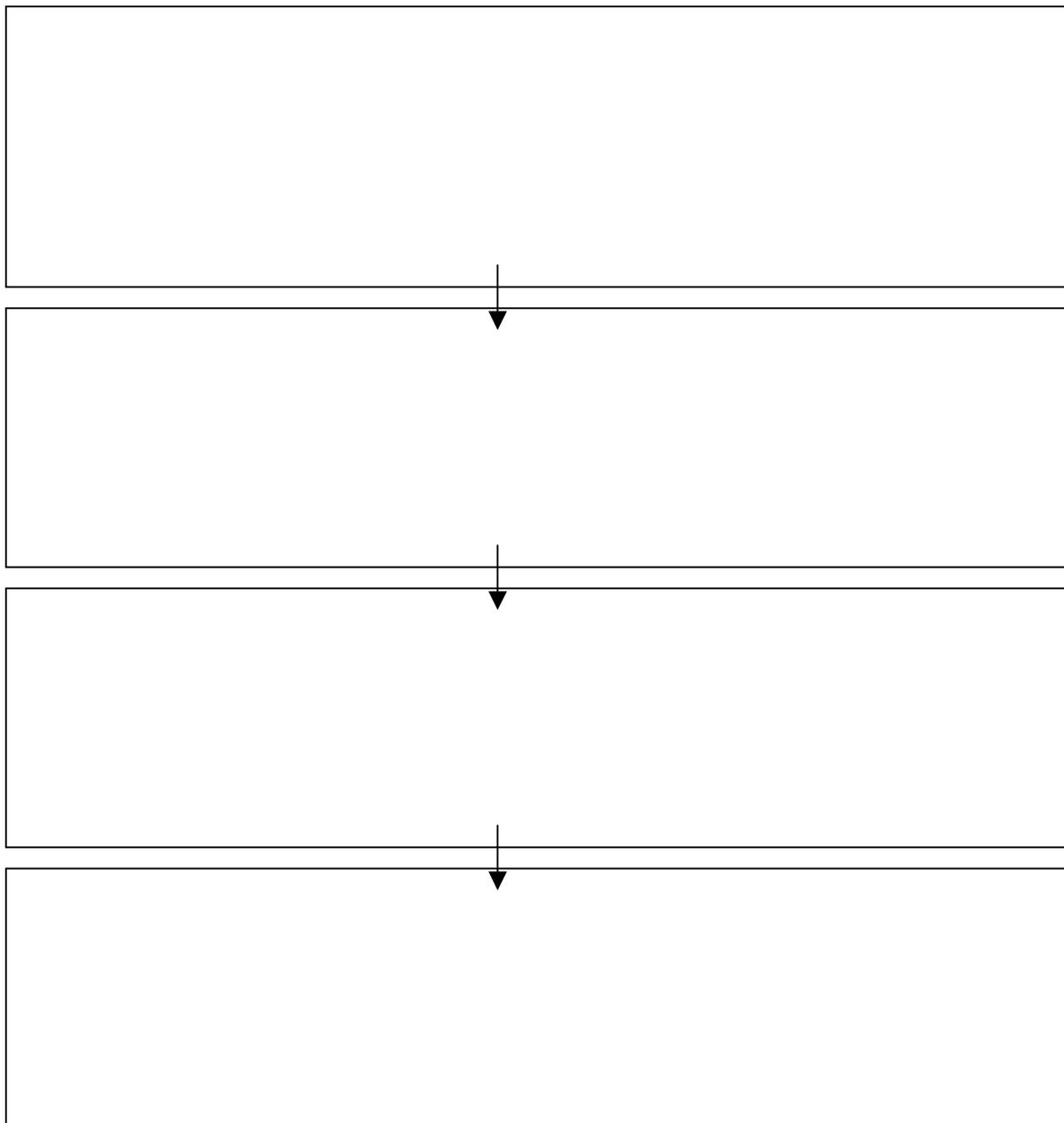
Mesomere Effekte (Buchstabe M) wirken durch Mesomerie von π -Elektronen (oder freien Elektronenpaaren) und wirken sich auch über größere Entfernungen im Molekül aus. Das Vorzeichen gibt an, ob die Elektronendichte erhöht wird (+) oder erniedrigt (-)

| Substituent | Effekte |
|---------------------------------|----------|
| $-\text{O}^-$ | +M, +I |
| $-\text{NH}_2$ | +M, -I |
| $-\text{OH}, -\text{OCH}_3$ | +M, -I |
| $-\text{Ph}$ | +M, -I |
| $-\text{Alkyl}, -\text{CO}_2^-$ | +I |
| $-\text{H}$ | |
| $-\text{CH}_2\text{Cl}$ | -I |
| $-\text{CHCl}_2$ | -I |
| $-\text{CCl}_3$ | -I |
| $-\text{Cl}, -\text{Br}$ | -I, (+M) |
| $-\text{NO}_2$ | -I, -M |



Ordne die Moleküle in den Kästen **A**, **B** und **C** nach abnehmender Reaktivität und Begründe!

5.1 Reaktion von Ethanol mit Ethanal (säurekatalysiert)



Aktivierung des Elektrophils

① nucleophiler Angriff des

 am

② Bindungsspaltung der
 Bindung.

Carbokation

③ nucleophiler Angriff des

 am
 mit

Tetraedrische Zwischenstufe

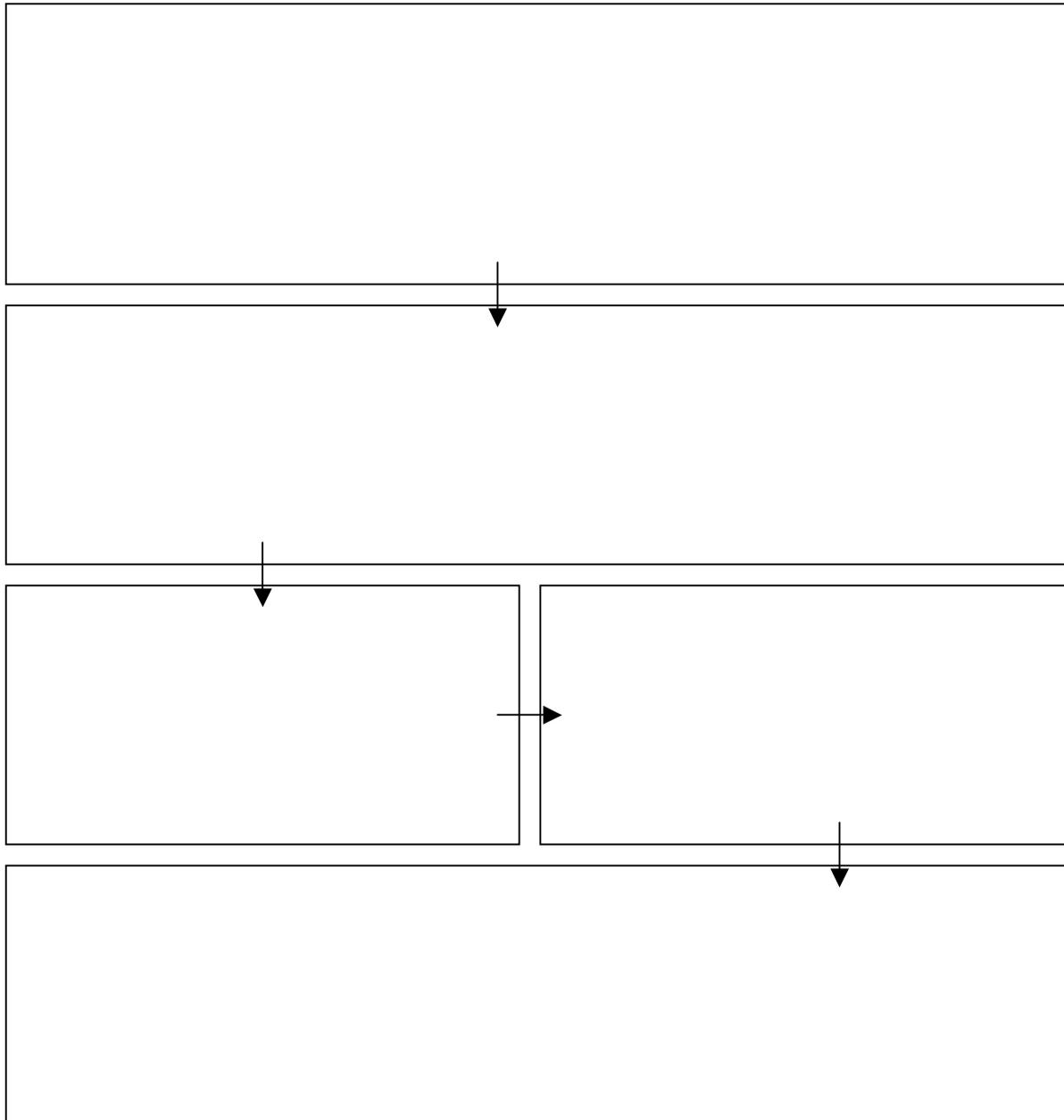
④ Bindungsspaltung der
 Bindung
 (= Regeneration des Katalysators)

Benenne die Ausgangs- und Endstoffe. Markiere nucleophile Elektronenpaare blau und elektrophile Atome rot. Stelle die Elektronenpaarverschiebungen und Bindungsspaltungen von ① bis ④ mit Orange dar. Erstelle eine mögliche Strukturformel der Zwischenstufe. Markiere bei den Endstoffen das Ethanolmolekül mit einem grünen Kasten.

Es handelt sich hier um eine

.....

5.2 Reaktion von Ethanol mit Ethansäure (säurekatalysiert)



Aktivierung des Elektrophils

- ① nucleophiler Angriff des
-
- am
- ② Bindungsspaltung der
- Bindung.

Carbokation

- ③ nucleophiler Angriff des
-
- am
- mit

Tetraedrische Zwischenstufe

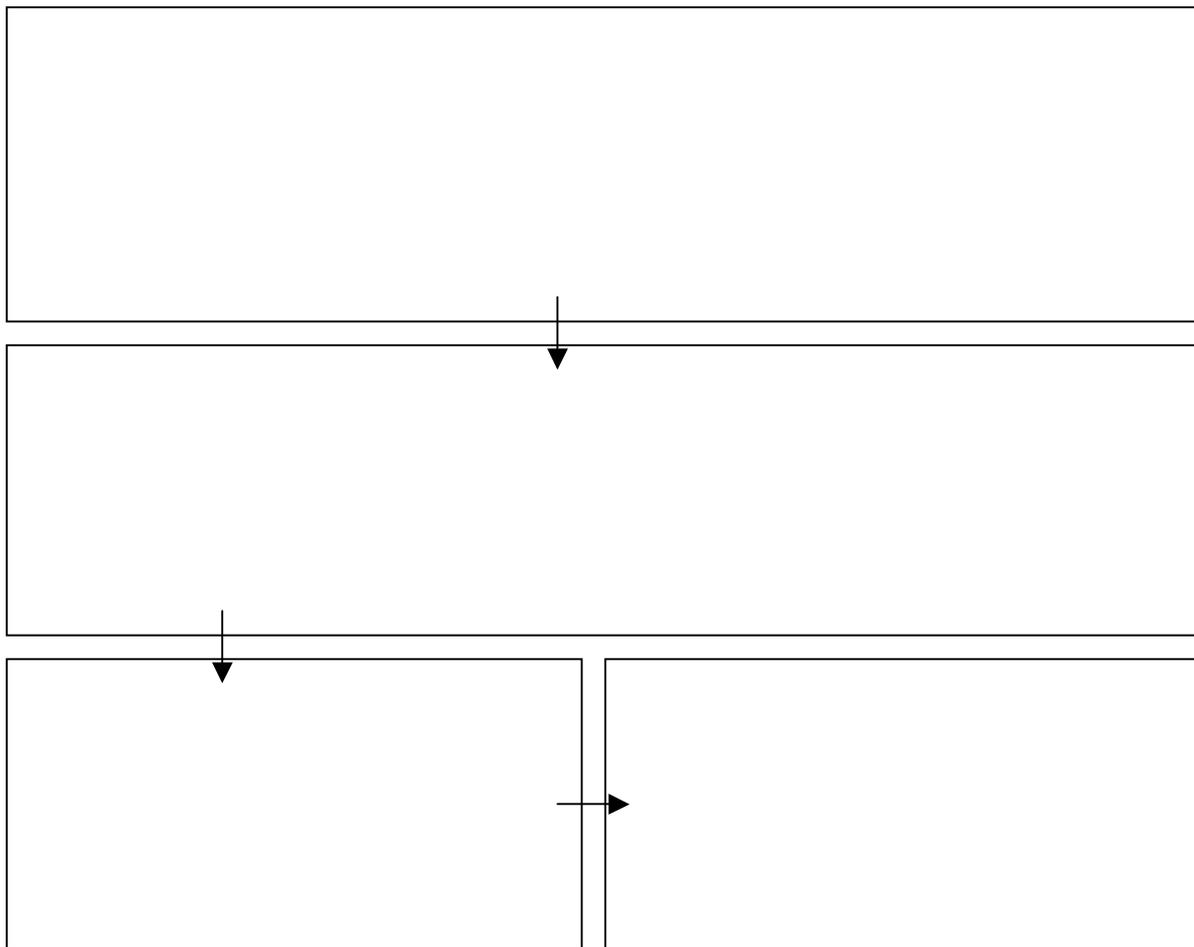
- ④/⑤ Protonenwanderung
- ⑥ Bindungsspaltung der
- Bindung
- (= Regeneration des Katalysators)
- ⑦ Bindungsspaltung der
- Bindung
- (= Abspaltung von Wasser)

Benenne die Ausgangs- und Endstoffe. Markiere nucleophile Elektronenpaare blau und elektrophile Atome rot. Stelle die Elektronenpaarverschiebungen und Bindungsspaltungen von ① bis ⑦ mit Orange dar. Erstelle eine mögliche Strukturformel der Zwischenstufe. Markiere bei den Endstoffen das Ethanolmolekül mit einem grünen Kasten.

Es handelt sich hier um eine

.....

5.3 Reaktion von Hydroxidion mit Ethansäureethylester (basenvermittelt)



① nucleophiler Angriff des

 am

② Bindungsspaltung der
 Bindung.

Tetraedrische Zwischenstufe

③ Bindungsspaltung der
 Bindung
 (= Abspaltung des Ethanolations)

④ nucleophiler Angriff des

 am

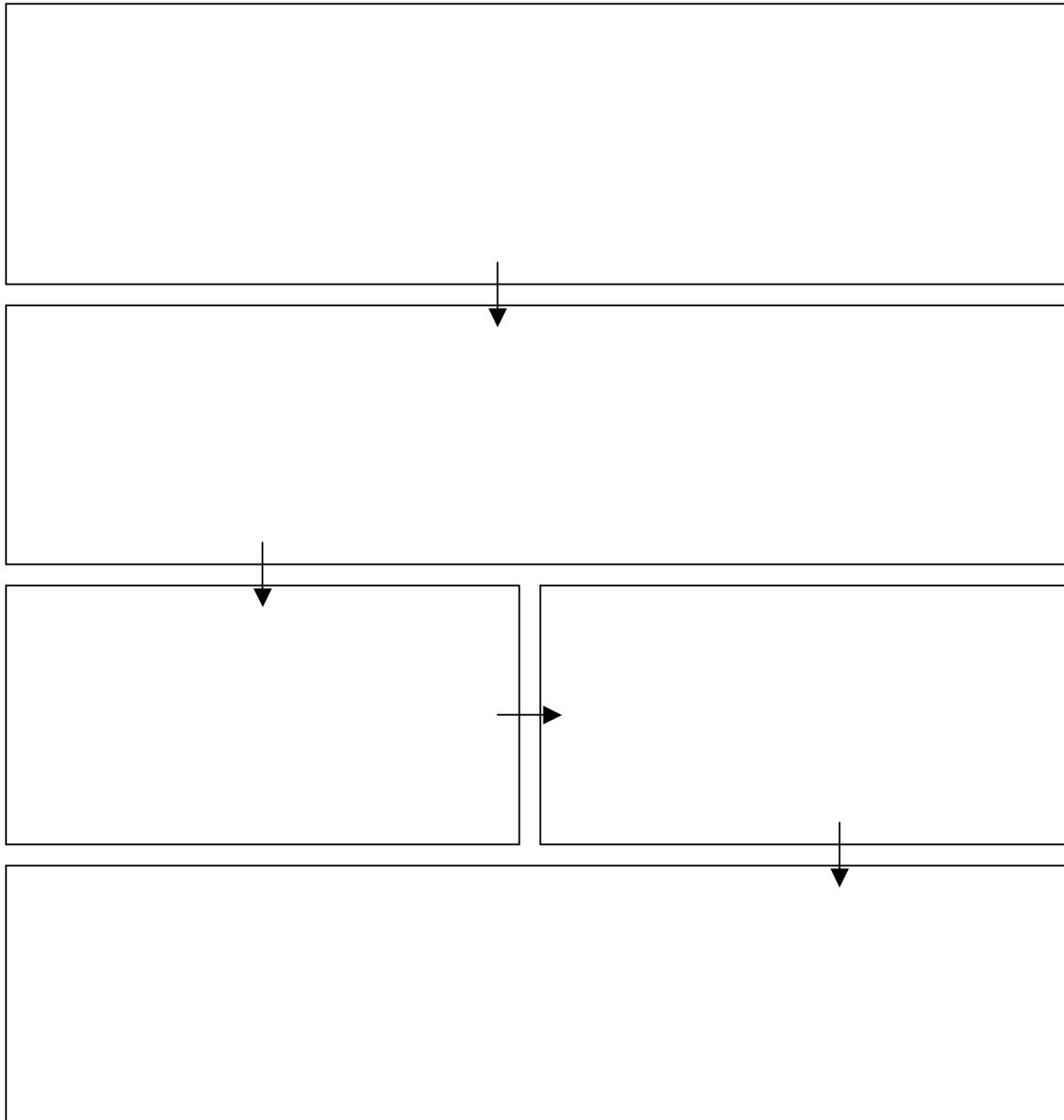
⑤ Bindungsspaltung der
 Bindung.

Benenne die Ausgangs- und Endstoffe. Markiere nucleophile Elektronenpaare blau und elektrophile Atome rot. Stelle die Elektronenpaarverschiebungen und Bindungsspaltungen von ① bis ⑤ mit Orange dar. Erstelle eine mögliche Strukturformel der Zwischenstufe. Markiere bei den Endstoffen das Hydroxidion mit einem grünen Kasten.

Es handelt sich hier um eine

Bei den Schritten ④ und ⑤ handelt es sich um eine
 Die Base wird bei der Reaktion verbraucht,
 daher spricht man hier nicht von „basenkatalysiert“, sondern von
 Dies entspricht der
 von Fetten.

5.4 Reaktion von Ammoniak mit Ethansäure (säurekatalysiert)



Aktivierung des Elektrophils

① nucleophiler Angriff des

 am

 ② Bindungsspaltung der
 Bindung.

Carbokation

③ nucleophiler Angriff des

 am
 mit

Tetraedrische Zwischenstufe

④/⑤ Protonenwanderung

 ⑥ Bindungsspaltung der
 Bindung
 (= Regeneration des Katalysators)
 ⑦ Bindungsspaltung der
 Bindung
 (= Abspaltung von Wasser)

Benenne die Ausgangs- und Endstoffe. Markiere nucleophile Elektronenpaare blau und elektrophile Atome rot. Stelle die Elektronenpaarverschiebungen und Bindungsspaltungen von ① bis ⑦ mit Orange dar. Erstelle eine mögliche Strukturformel der Zwischenstufe. Markiere bei den Endstoffen das Ammoniakmolekül mit einem grünen Kasten.

Es handelt sich hier um eine

.....

