

---

# Org. Reaktionsmechanismen

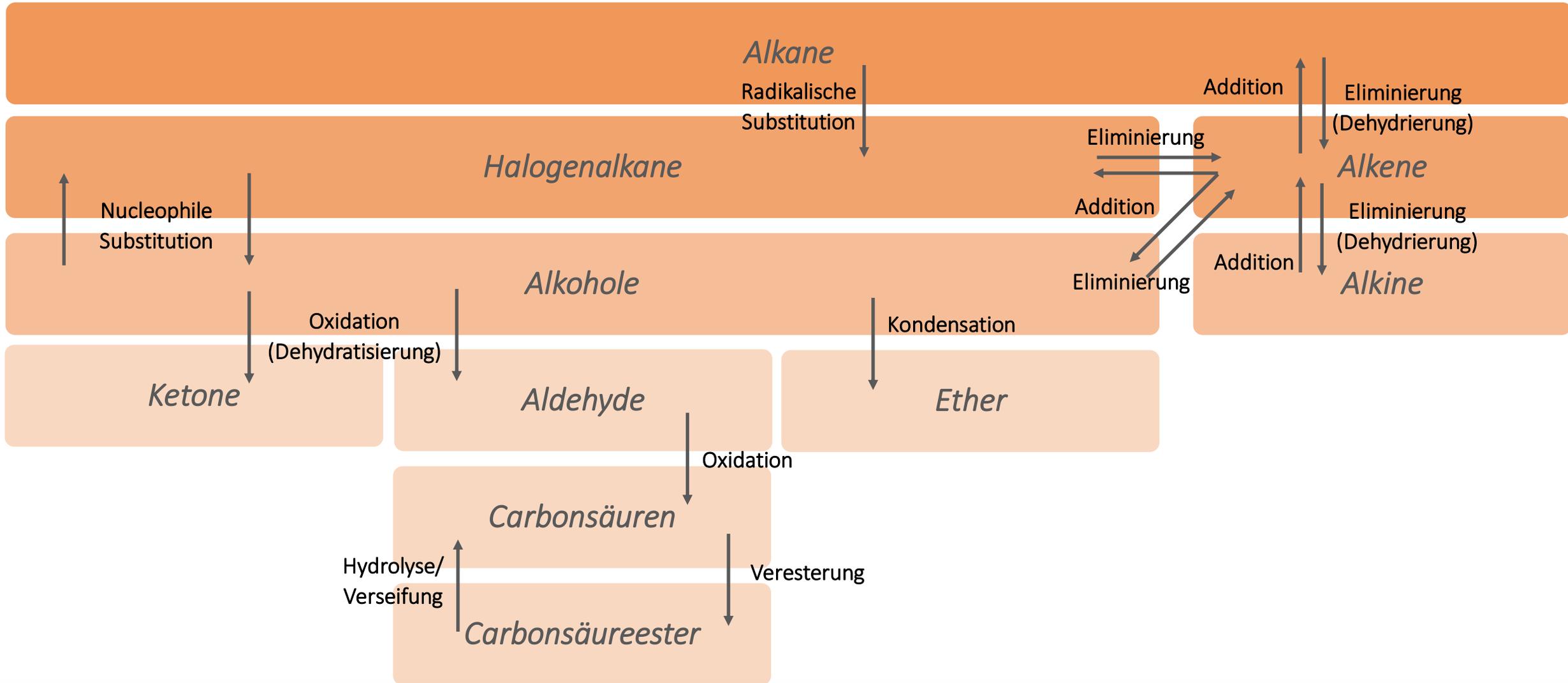
Jonathan Pagelsdorf

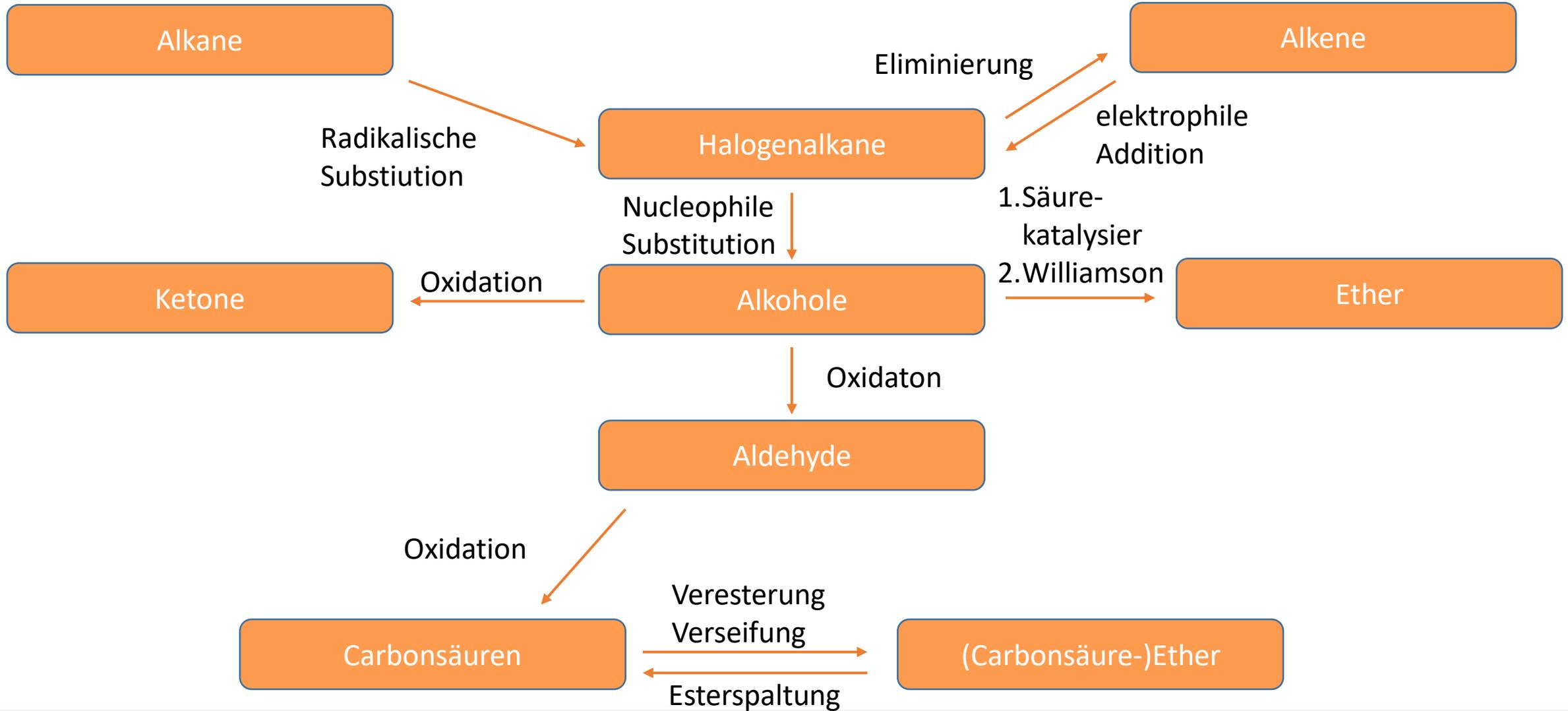


# Inhaltsübersicht

1. Überblick über organische Stoffgruppen und deren Reaktionen
2. Radikalische Substitution
3. Eliminierung
4. Elektrophile Addition
5. Nucleophile Substitution ( $S_N$ )
6. Vom Alkohol zum Ether
7. Vom Alkohol zum Aldehyd/Keton
8. Vom Aldehyd zur Carbonsäure
9. Von der Carbonsäure zum Ester
10. Aromaten ( $S_EAr$ )

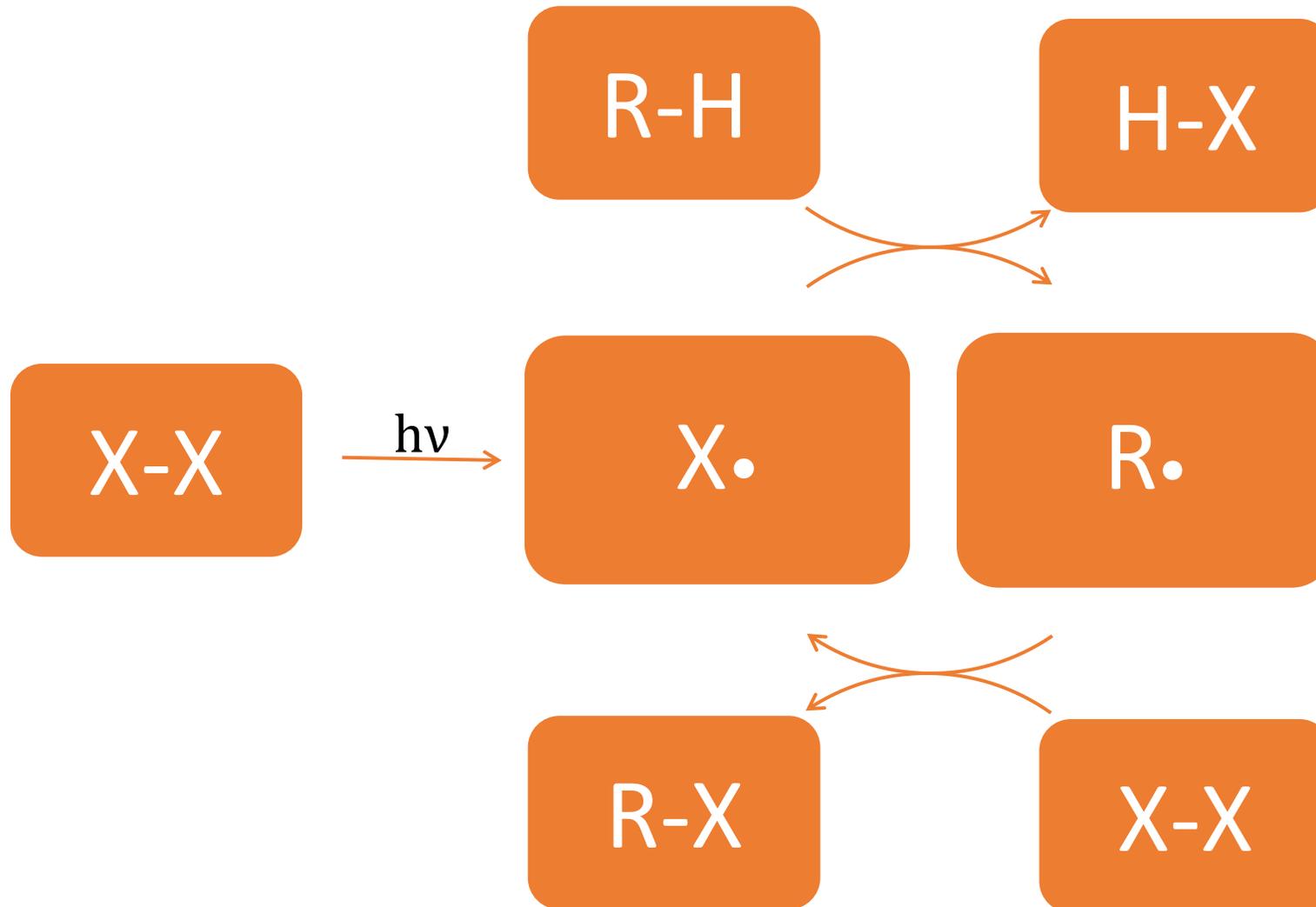
# 1. Überblick über org. Stoffgruppen und deren Reaktionen







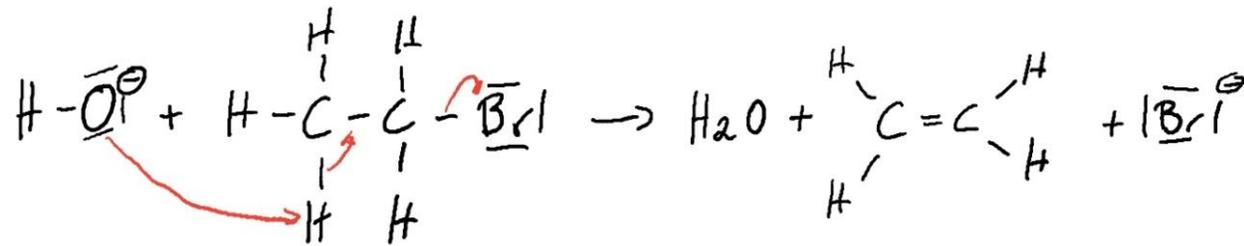
## 2. Radikalische Substitution



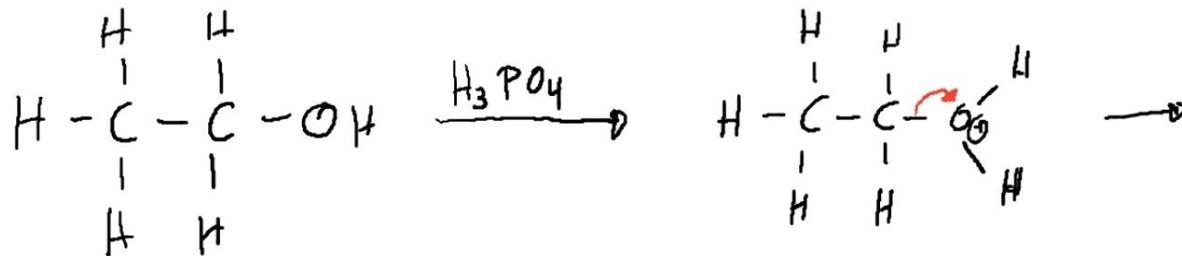


### 3. Eliminierung (E)

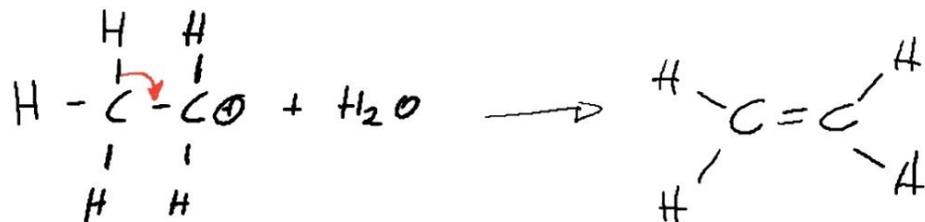
- Bei der E werden zwei Atome oder Atomgruppen von benachbarten C-Atomen eines Moleküls abgespalten. → C=C Mehrfachbindung



Eliminierung mit Hydroxid-Ion  
als Nu



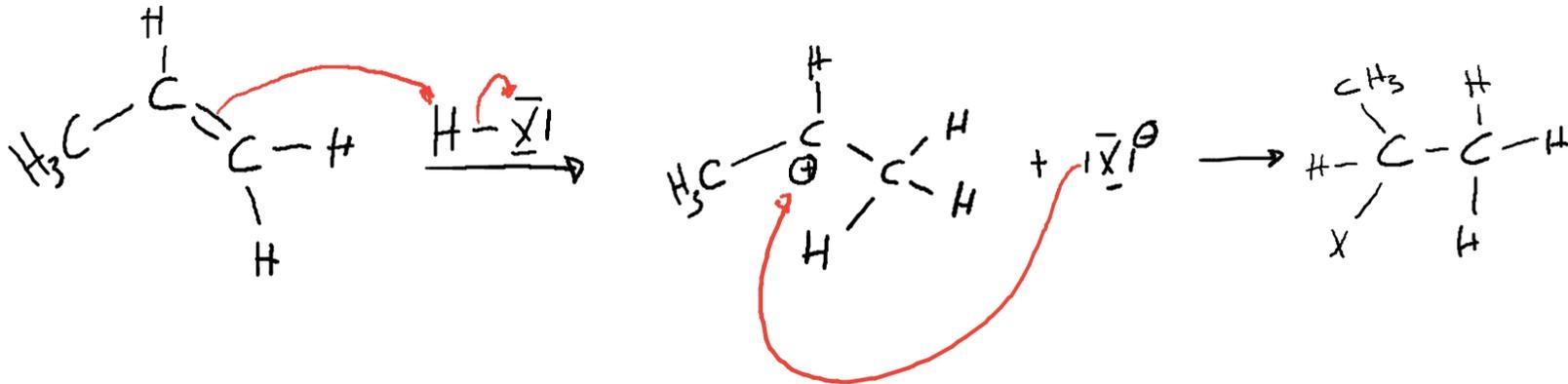
Dehydratisierung von Alkohol





## 4. Elektrophile Addition ( $A_E$ )

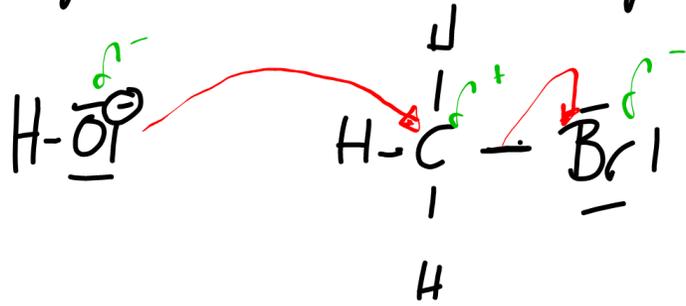
- Bei der Additionsreaktion lagert sich immer erst das positive Teilchen (Elektrophil) an das Kohlenstoffatom an.  $\rightarrow$  elektrophile Addition
- Das Elektrophil lagert sich immer an das C-Atom mit den meisten Wasserstoffen an (oder an der geringer substituierte C-Atom)



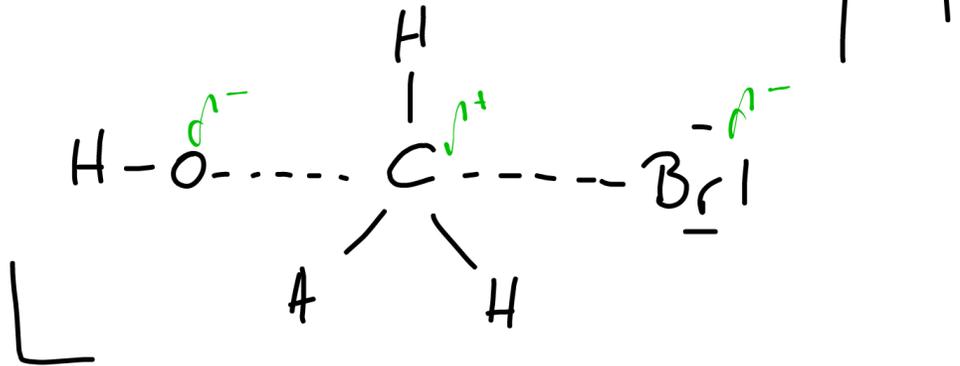
- Addition von:  $H_2O$ : Alkohole  
 $H_2$ : Alkane  
 $HX$ : Halogenalkane

## 5. Nucleophile Substitution ( $S_N$ )

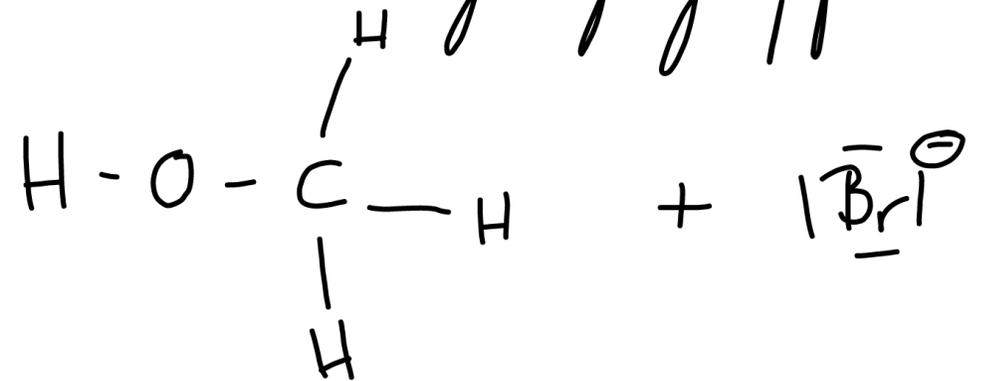
Angriff des nucleophilen Teilchens:



Übergangszustand:



Austritt der Abgangsgruppe:





## 5. Nucleophile Substitution ( $S_N$ )

Einfluss des angegriffenen Teilchens:

- Je größer der Alkylrest (R-) am angegriffenen C-Atom, desto langsamer verläuft die Rxn.

Einfluss des eintretenden Teilchens (Nucleophil):

- Je leichter das Nu ein Elektronenpaar für die Bindungsbildung bereitstellen kann, bzw. je höher die Elektronendichte, desto besser verläuft die Rxn.  ${}^{-}\text{OH} > \text{NH}_3 > \text{H}_2\text{O}$
- Je besser das Nu *polarisierbar* ist, desto leichter steht das Elektronenpaar zur Bindung zur Verfügung.  $\text{I}^- > \text{Br}^- > \text{Cl}^- > \text{F}^-$

Einfluss des austretenden Teilchens (Abgangsgruppe):

- Je kleiner die Bindungsenergie zwischen dem angegriffenem C-Atom und Nucleofug, desto schneller verläuft die Rxn.  $\text{C}-\text{I} > \text{C}-\text{F}$

Einfluss des Lösungsmittels:

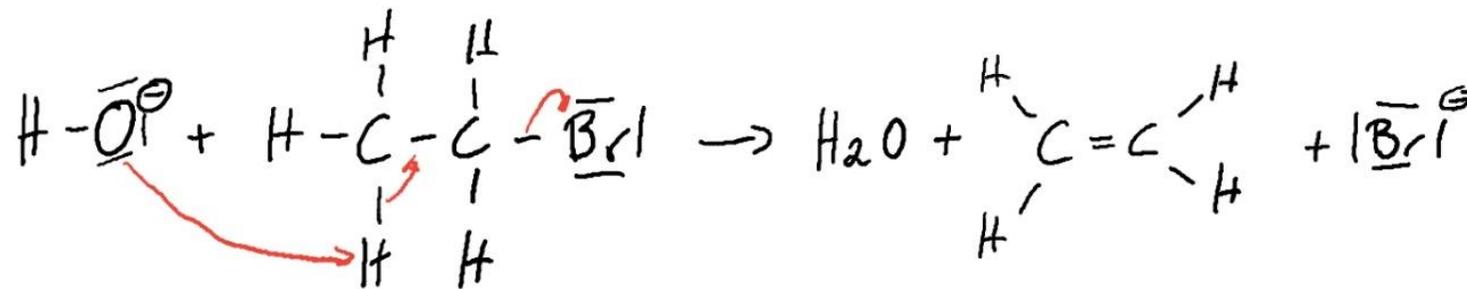
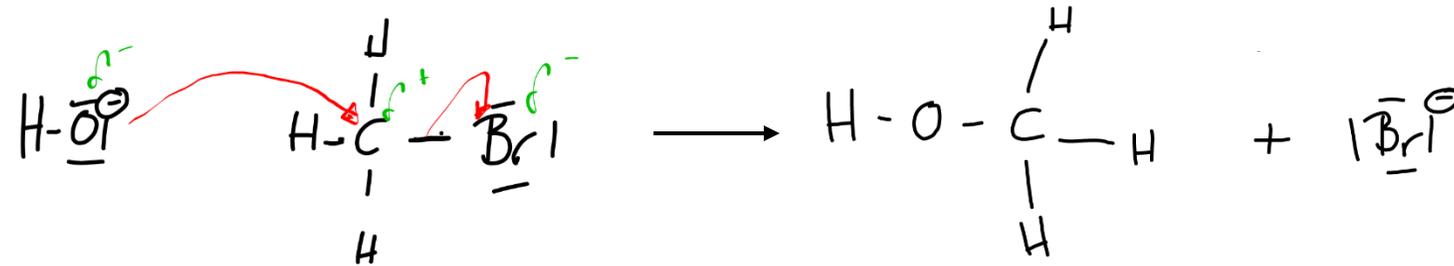
- Polare Lösungsmittel stabilisieren die gebildeten Ionen  $\rightarrow$  begünstigen die  $S_N$

**$\rightarrow$  Die konkrete Reaktion wird von allen Faktoren bestimmt.**



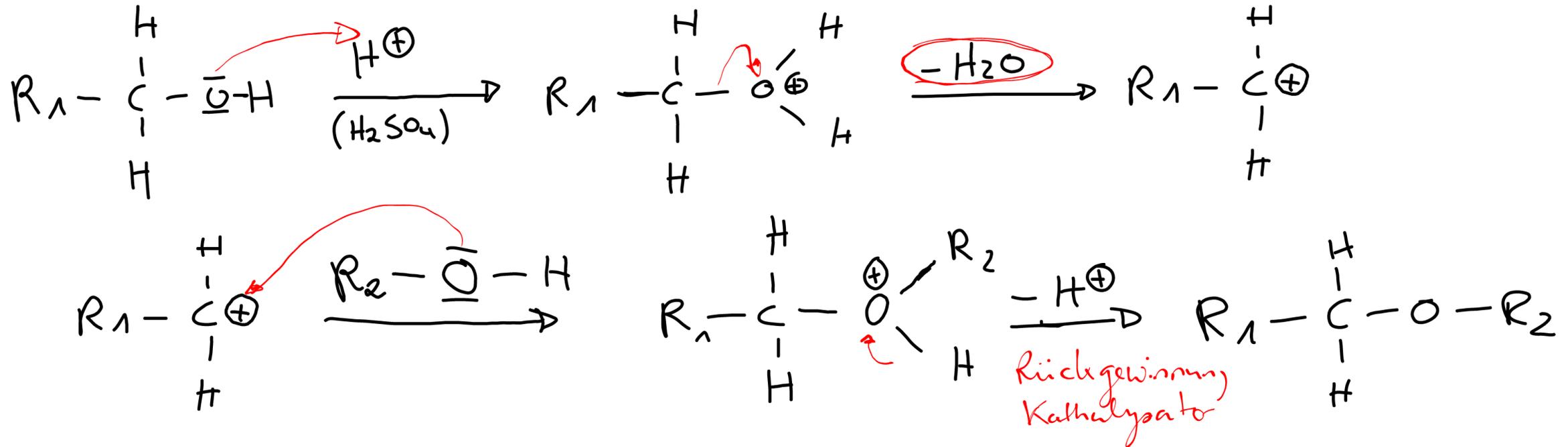
## 5. Nucleophile Substitution ( $S_N$ )

Nucleophile Substitution ( $S_N$ ) vs. Eleminierung (E)





## 6. Vom Alkohol zum Ether



- Bei niedrigen Temperaturen ( $<140^\circ C$ ), sonst überwiegt die Eliminierung
- Säure katalysierte Rxn.
- Elektrophiles Carbeniumion wird nucleophil vom  $R_2-OH$  angegriffen.
- Bei der Rxn von 2 gleichen Alkoholen entstehen symmetrische Ether.



## 6. Vom Alkohol zum Ether

### Eigenschaften:

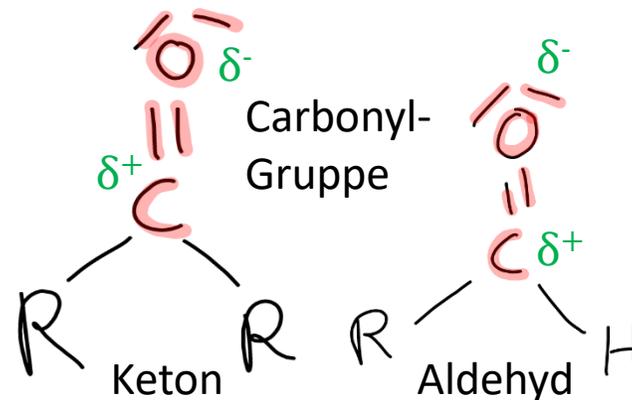
- Zwischen 2 Ethern keine Wasserstoff-Brückenbindungen, aber van-der-Waals-Wechselwirkungen. → vergleichbare Sdp. zu Alkanen der selben Kohlenstoffatomanzahl
- Bei Mischung mit H<sub>2</sub>O entstehen 2 Phasen. Trotz Anschein der Unlöslichkeit beider Substanzen mischen sie sich durch Wasserstoff-Brückenbindungen.



## 7. Vom Alkohol zum Aldehyd/Keton

### Eigenschaften:

- Durch die ebene Struktur und der Polarität sind Carbonylverbindungen besonders reaktiv.
- Starke Polarität führt zu Dipol-Dipol-WW, jedoch keine WBB untereinander.
- Kurzkettige Carbonylverbindungen sind wasserlöslich, da sie mit  $\text{H}_2\text{O}$  WBB ausbilden können.





## 7. Vom Alkohol zum Aldehyd/Keton

Synthese:

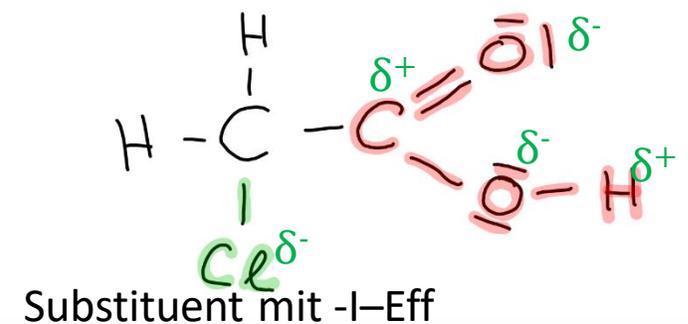
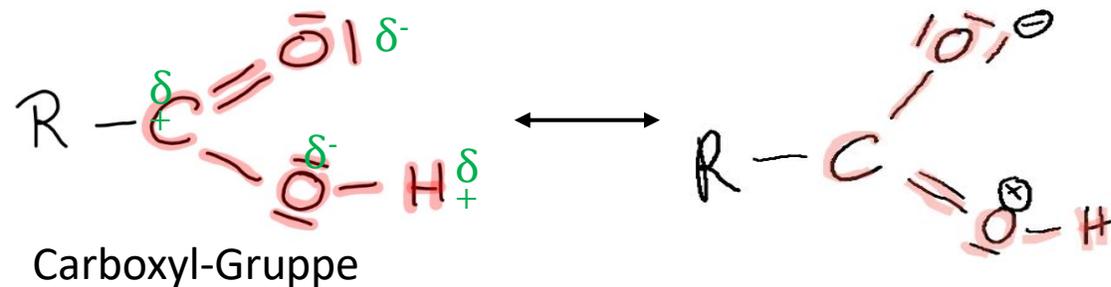




## 8. Vom Aldehyd zur Carbonsäure

Eigenschaften:

- Carbonsäuren sind BRÖNSTED-Säuren:  
 $\text{R-COOH} + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{R-COO}^- + \text{H}_3\text{O}^+$
- C=O Gruppe übt ein -M-Effekt/ -I-Effekt aus, daher sind Carbonsäuren deutlich bessere Säuren als Alkohole
- R übt einen +I-Effekt aus  $\rightarrow$  die Säurestärke nimmt in der homologen Reihe der Alkansäuren ab.
- Jedoch sind sie immer noch eher schwache Säuren ( $\text{pK}_s > 3,65$ )



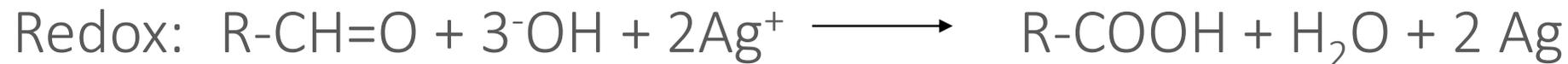
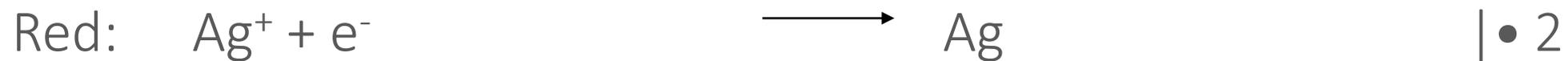


## 8. Vom Aldehyd zur Carbonsäure

Synthese:



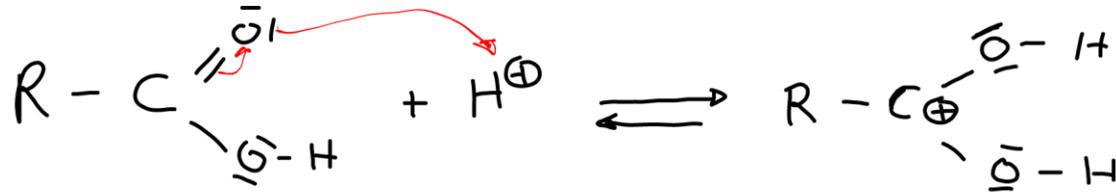
Tollens-Probe:



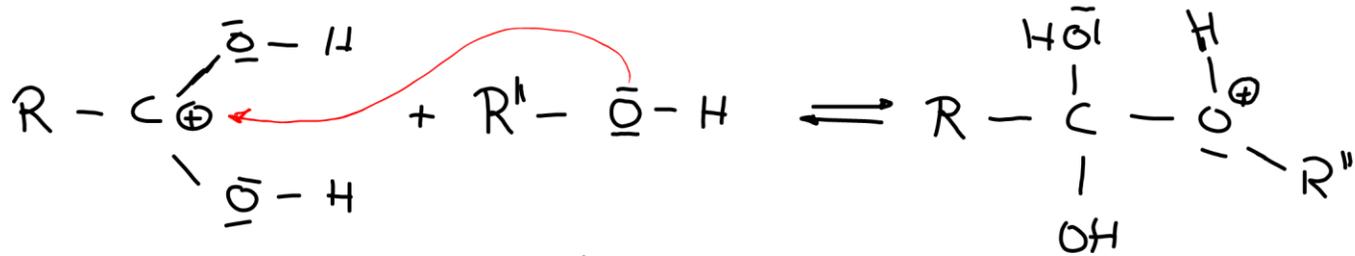


# 9. Von der Carbonsäure zum Ester

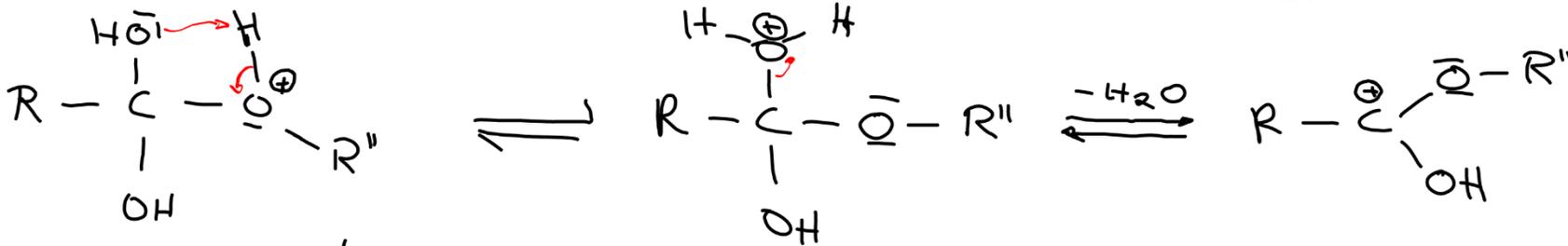
Veresterung: säurekatalysiert



Aktivierung



Addition



Eliminierung

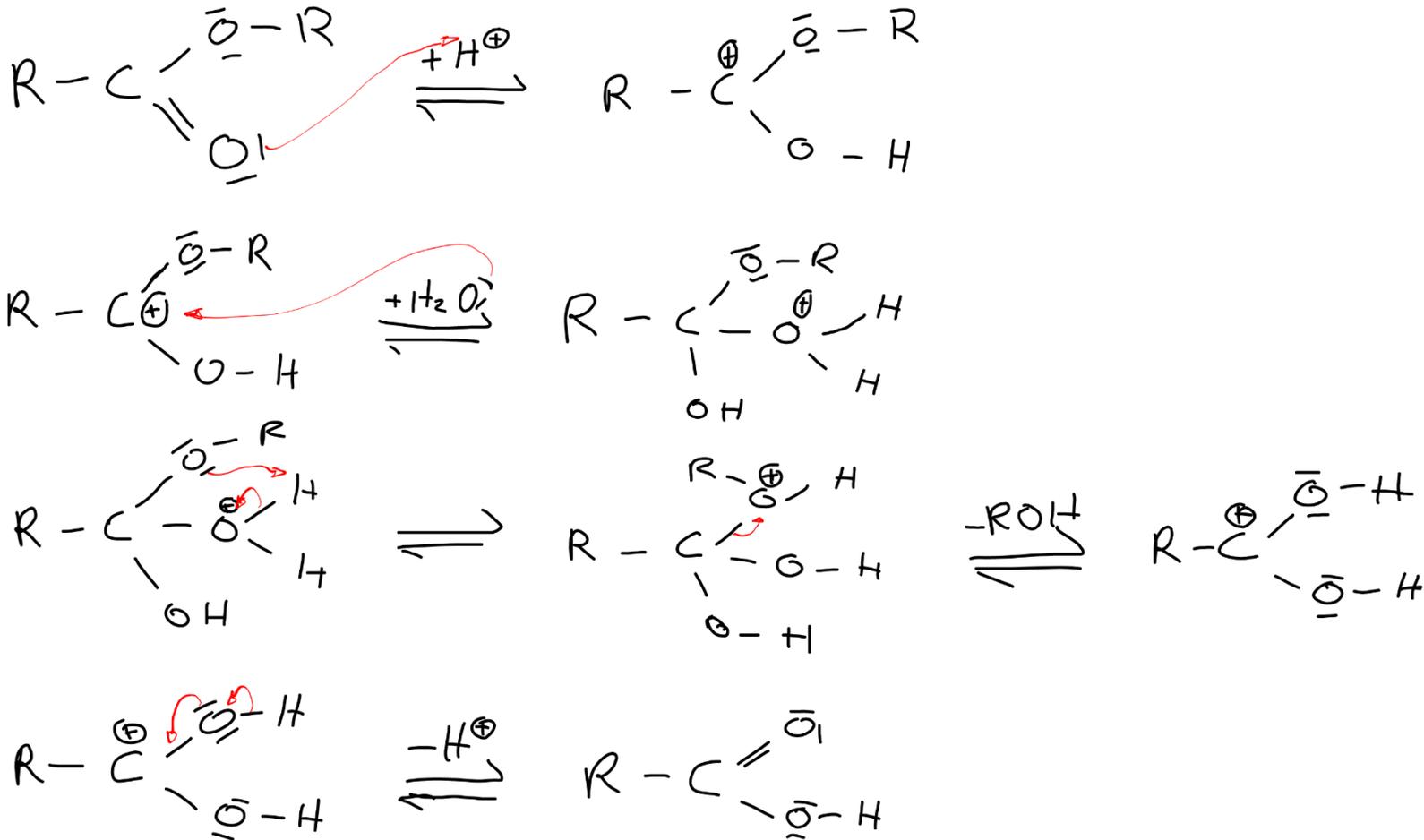


Stabilisierung



## 9. Von der Carbonsäure zum Ester

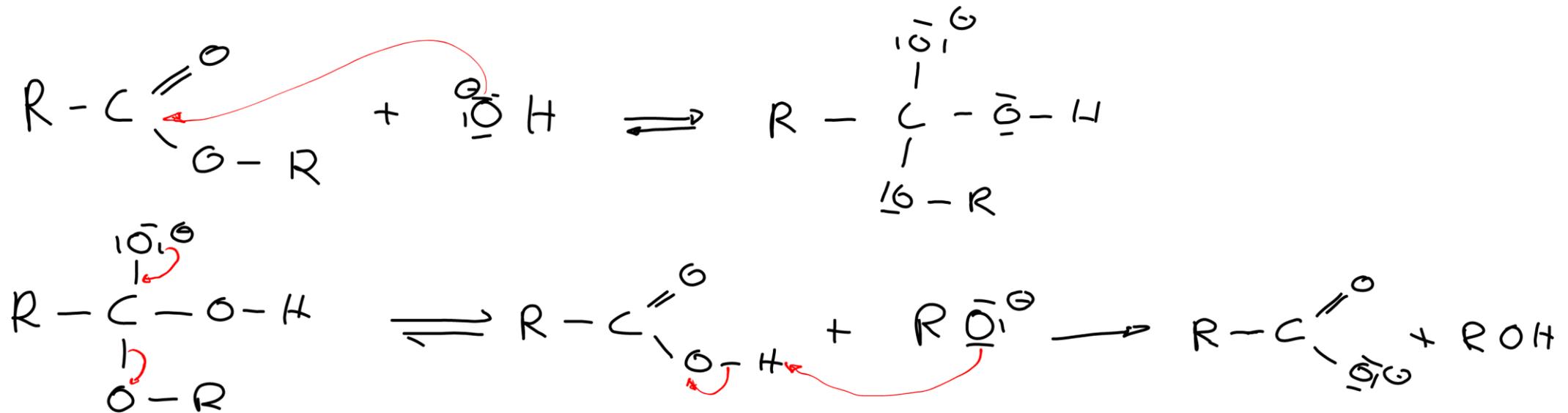
Esterspaltung:





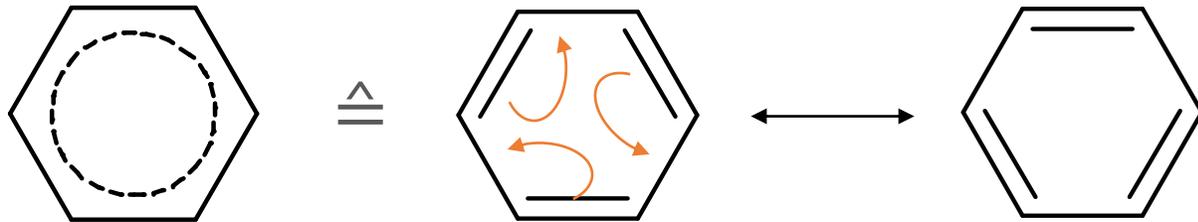
## 9. Von der Carbonsäure zum Ester

Verseifung:



## 10. Aromaten ( $S_{EAr}$ )

- Delokalisierte  $\pi$ -Elektronen



- Aromatischer Zustand:
  - Passt die Hückel-Regel? ( $4n + 2$   $\pi$ -Elektronen)
  - Ringförmig?
  - Konjugiertes  $\pi$ -System?
  - Planares Molekül?



# 10. Aromaten ( $S_{EAr}$ )

## Abiturprüfung 2019

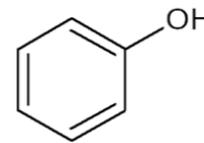
### Chemie, Leistungskurs

#### Aufgabenstellung:

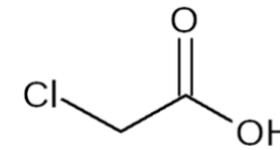
##### Von der Chlorgewinnung zum Herbizid

- Erläutern Sie die Synthese von Monochlorphenol in Einzelschritten und unter Angabe von Strukturformeln. Diskutieren Sie den Ort der Zweitsubstitution. (16 Punkte)
- Geben Sie die Reaktionsgleichung für die Synthese von 2,4-Dichlorphenoxyessigsäure ausgehend von 2,4-Dichlorphenol, Natronlauge und Monochloressigsäure unter Verwendung von Strukturformeln an. Entwickeln Sie einen möglichen Reaktionsablauf für die Synthese in Einzelschritten und unter Angabe von Strukturformeln. Diskutieren Sie den Einsatz von 2,4-D als Herbizid. (18 Punkte)

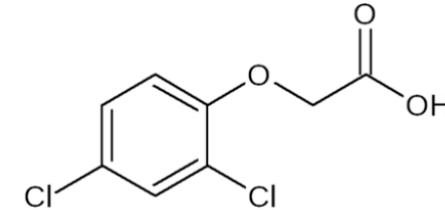
#### Strukturformeln:



Phenol



Monochloressigsäure



2,4-Dichlorphenoxyessigsäure (2,4-D)

#### Sicherheitsrelevante Informationen:

##### Aufnahmewege für 2,4-D

Atemwege: 2,4-D kann u. a. in Form von Stäuben inhaliert werden. Untersuchungen deuten auf eine effektive Resorption über den Atemtrakt hin.

Haut: Bei der Anwendung von 2,4-D-Herbiziden in der Land- und Forstwirtschaft wird die Aufnahmemöglichkeit über die Haut als der weitaus wichtigste Expositionsweg eingeschätzt.

#### Fachspezifische Vorgaben:

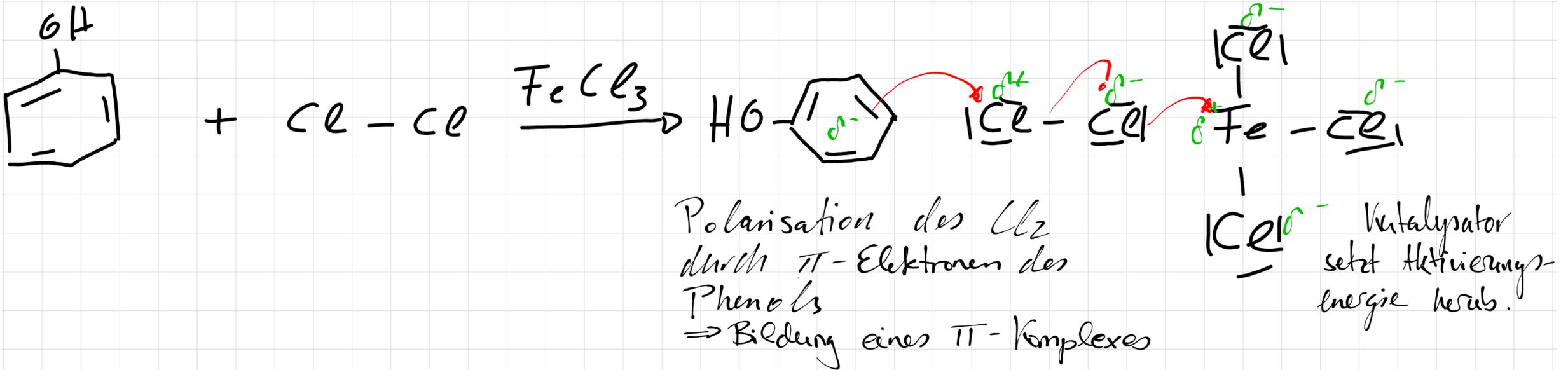
Das beim Diaphragma-Verfahren gewonnene Chlorgas wird für die Chlorierung von Phenol – unter Verwendung des Katalysators Eisen(III)-chlorid ( $FeCl_3$ ) – genutzt.

Bei zweifacher Chlorierung des Phenols entsteht hauptsächlich 2,4-Dichlorphenol. Aus diesem kann durch Reaktion mit Monochloressigsäure in Gegenwart von Natriumhydroxid das Herbizid 2,4-D synthetisiert werden.

Bei der Herstellung von 2,4-D können krebserregende Stoffe als Nebenprodukte entstehen.

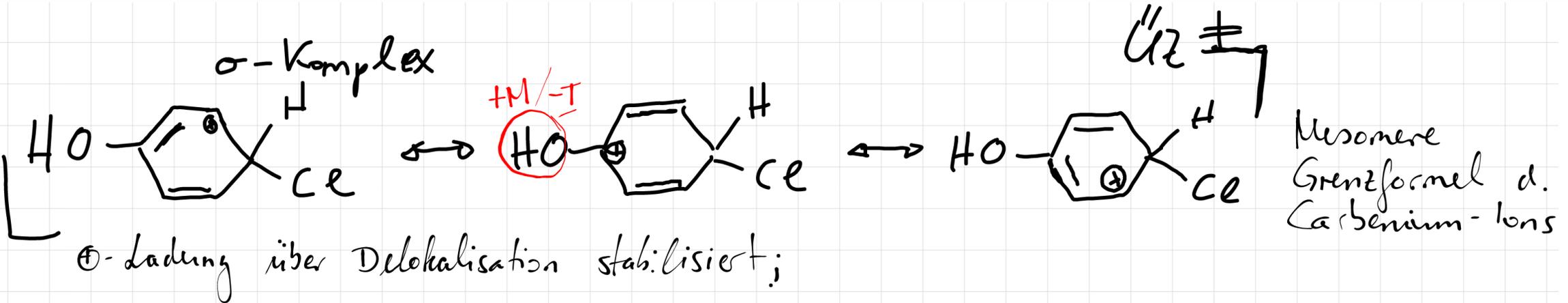
# 10. Aromaten (S<sub>E</sub>Ar)

## Aufgabe 3:





# 10. Aromaten ( $S_EAr$ )



$+M$ -Effekt  $>$   $-I$ -Effekt

$+M$ -Effekt stabilisiert die  $\oplus$  Ladung zusätzlich

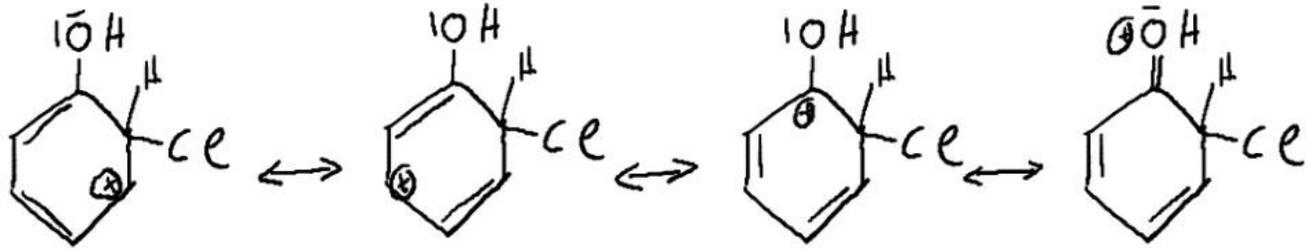
( $\oplus$  Ladungen an elektronenziehenden Substituenten verboten!)

$\rightarrow$  begünstigt  $S_EAr$  in ortho & para-Stellung

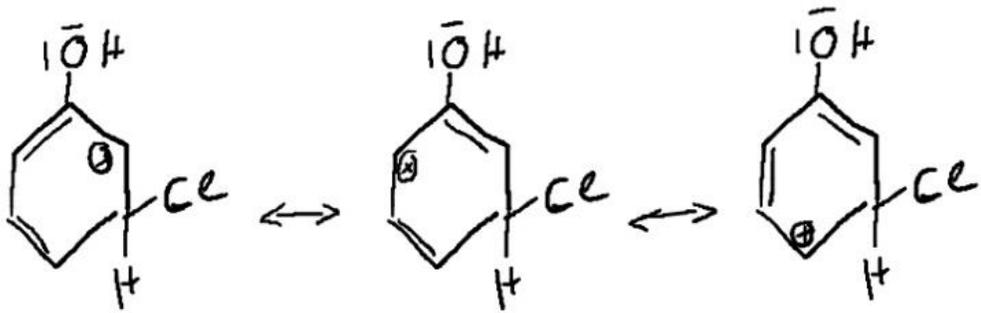
$\Rightarrow$  durch sterische Effekte  $HP$  - para.



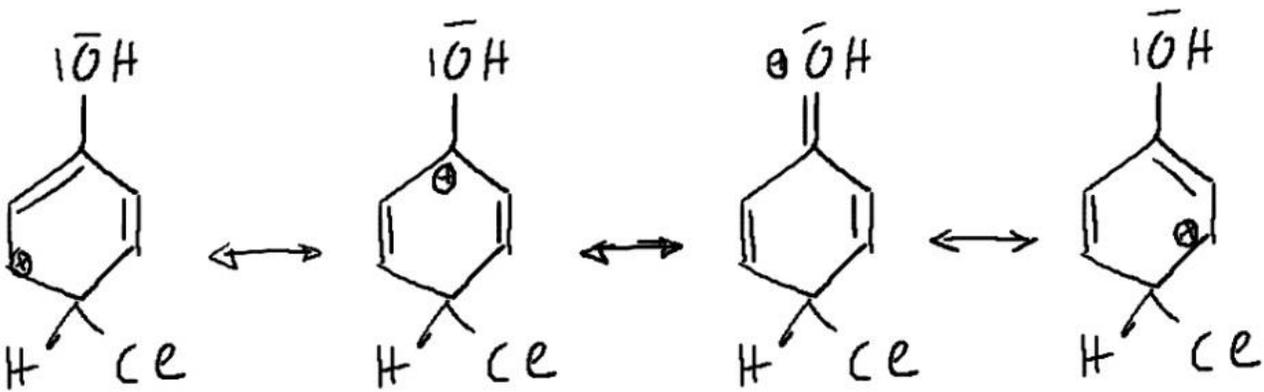
# 10. Aromaten ( $S_{EAr}$ )



ortho

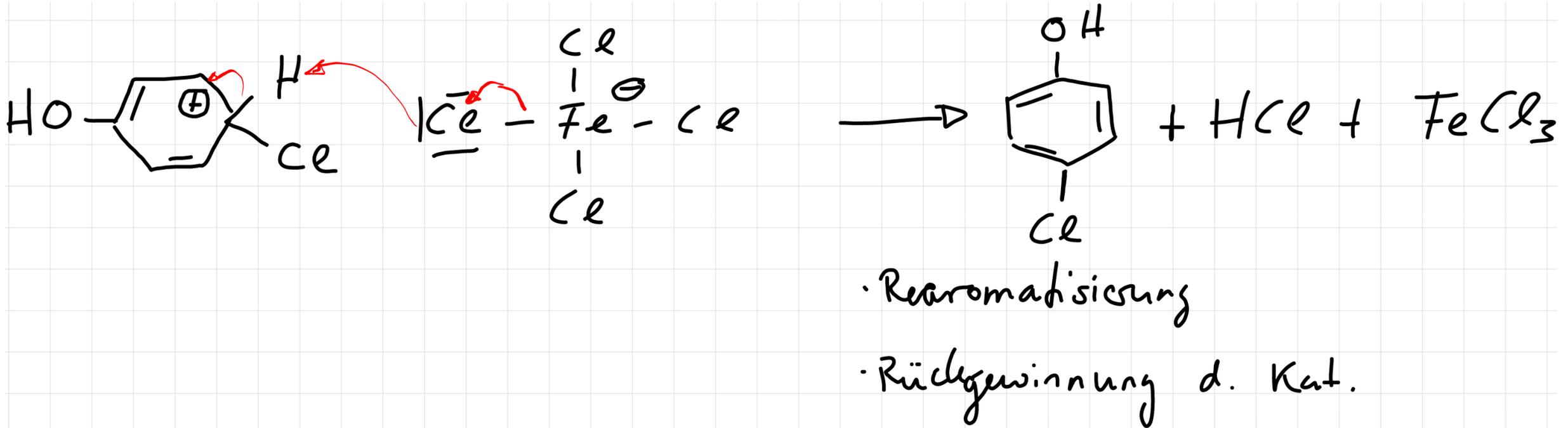


meta



para

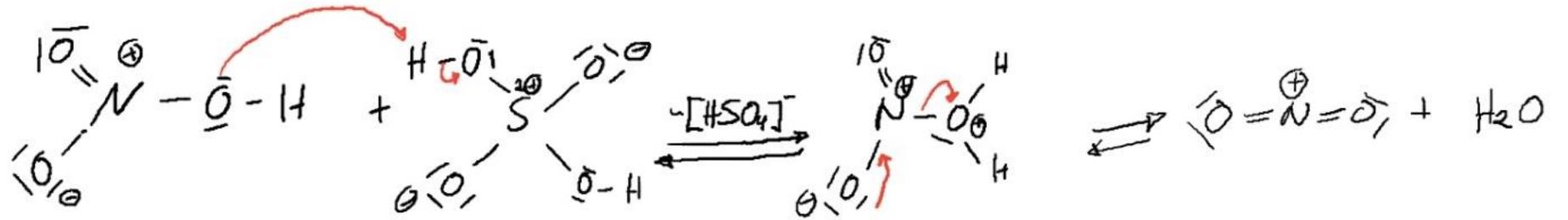
# 10. Aromaten (S<sub>E</sub>Ar)





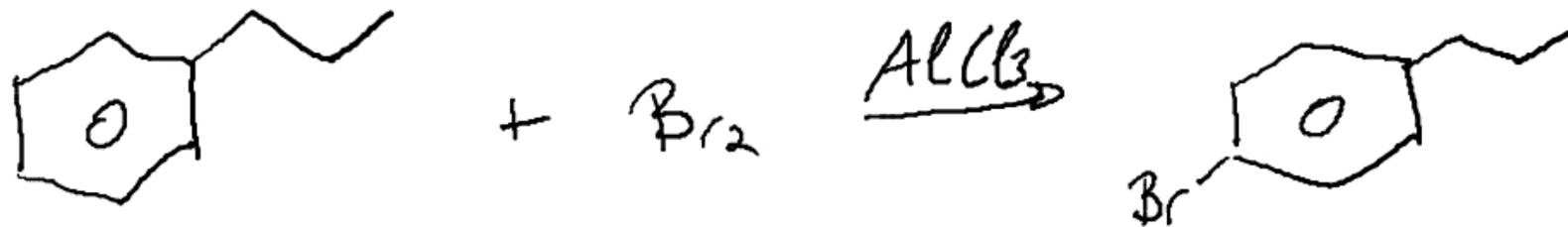
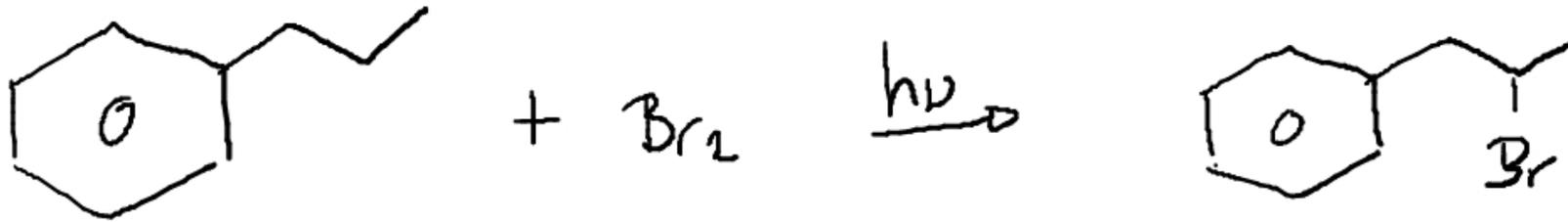
## 10. Aromaten ( $S_EAr$ )

Nitrierung:



## 10. Aromaten ( $S_{EAr}$ )

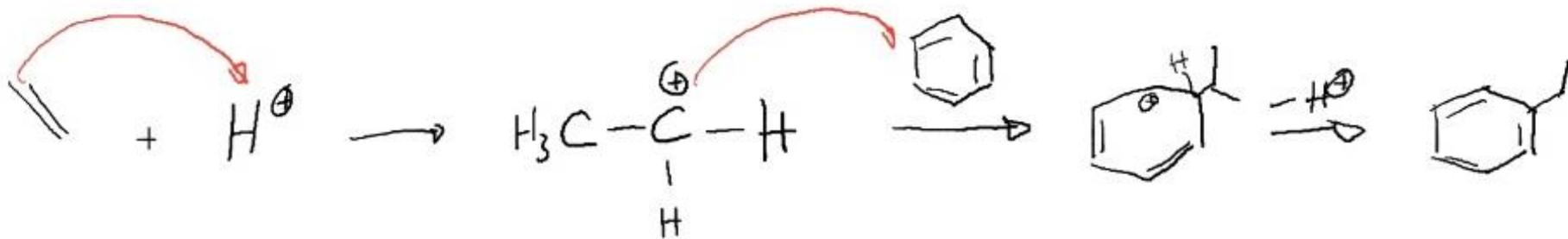
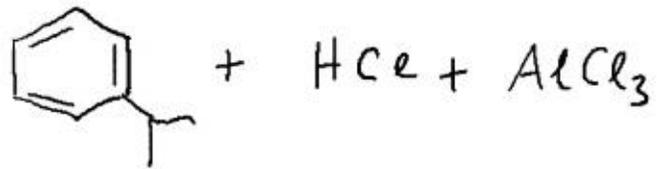
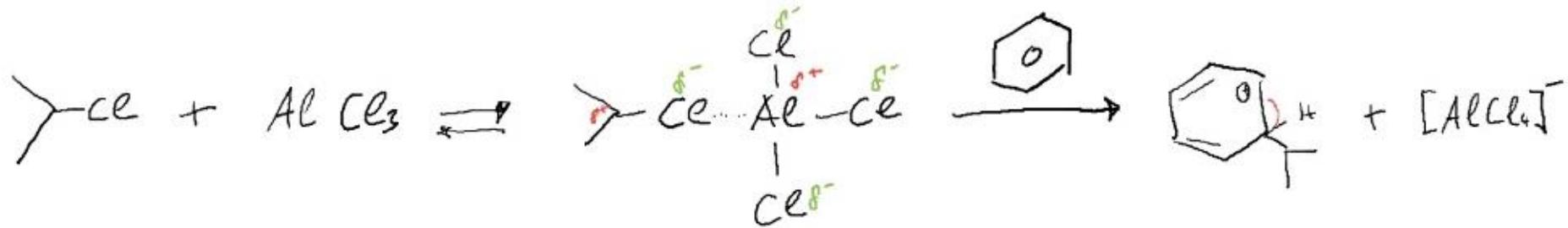
Bei 2. Substituierungen: SSS-Regel: Sonne, Siedehitze  $\rightarrow$  Seitenkette  
KKK-Regel: Kälte, Katalysator  $\rightarrow$  Kern





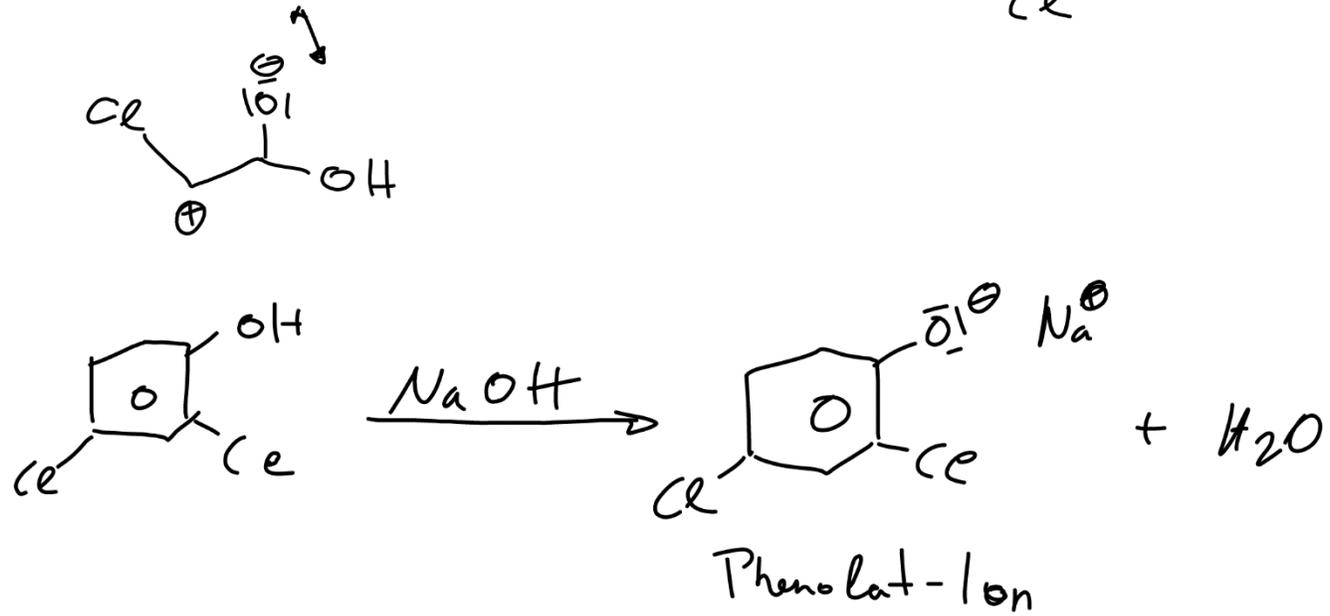
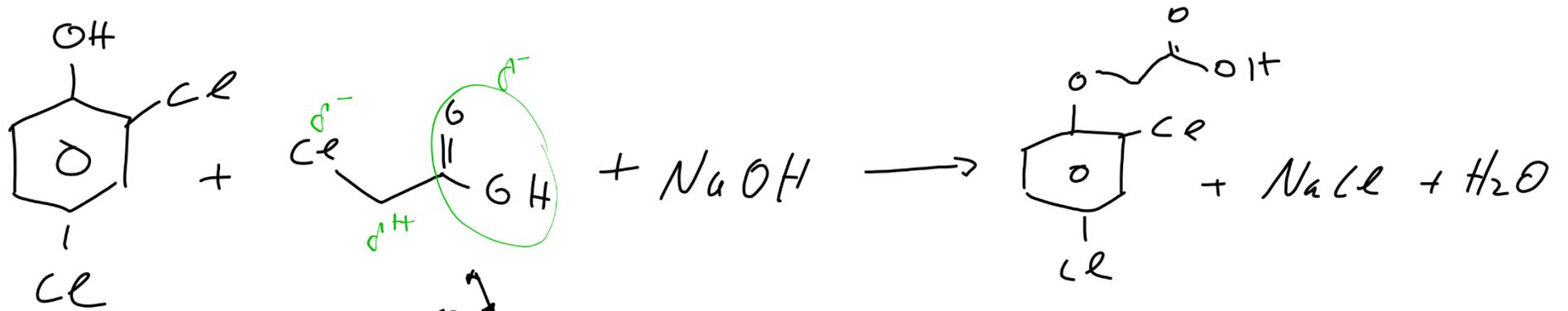
# 10. Aromaten (S<sub>E</sub>Ar)

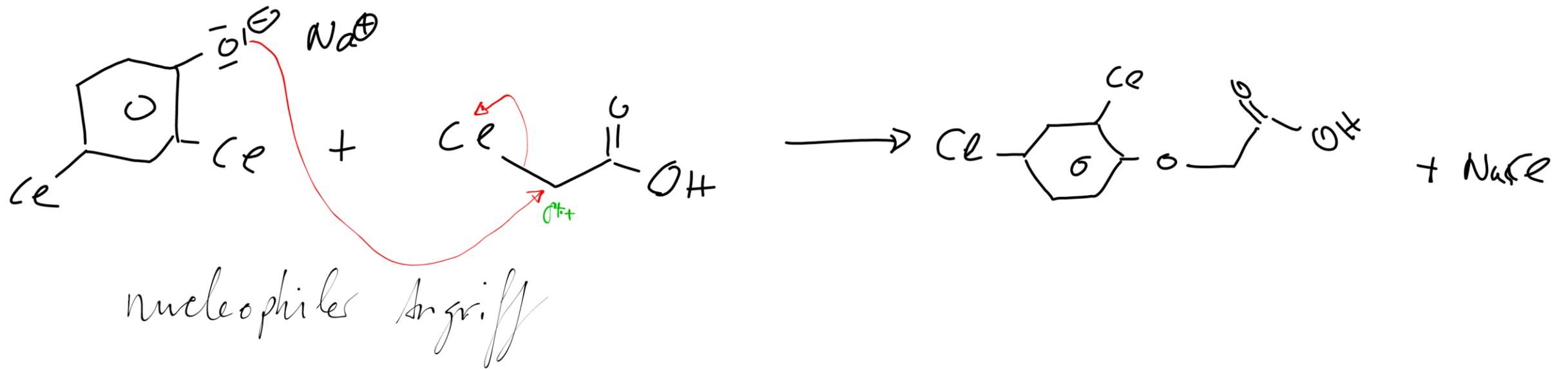
## Friedel-Crafts-Alkylierung





## Aufgabe 4:







- Pflanzen können gentechnisch so verändert werden, dass sie gegenüber dem Herbizid resistent sind. Dadurch wirkt 2,4-D spezifisch gegen Unkräuter.
- Von 2,4-D gehen akute oder chronische Gesundheitsgefahren aus.
- Aufnahmewege sind sowohl die Haut als auch die Atemwege.
- Unkrautvernichtungsmittel mit 2,4-D können krebserregende Stoffe enthalten.
- 2,4-D ist gewässergefährdend.
- 2,4-D ist sehr schwer löslich in Wasser. Das Waschen der Lebensmittel vor dem Verzehr reicht vielleicht nicht aus, um 2,4-D zu entfernen



Fragen ?

---

Viel Erfolg  
&  
Danke fürs Zuhören