

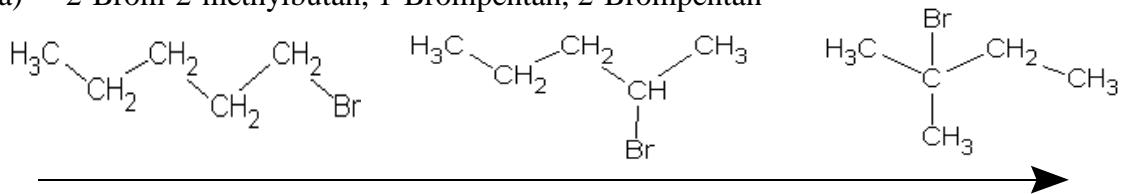
Übungen zur Nucleophilen Substitution

- I. Formuliere die Strukturformeln der folgenden Verbindungen in jeder Gruppe und ordne die Verbindungen nach ihrer Reaktivität bei SN₂-Reaktionen:
- 2-Brom-2-methylbutan, 1-Brompentan, 2-Brompentan
 - 1-Brom-3-methylbutan, 2-Brom-2-methylbutan, 2-Brom-3-methylbutan
 - 1-Brombutan, 1-Brom-2,2-dimethylpropan, 1-Brom-2-methylbutan, 1-Brom-3-methylbutan.
- II. Stelle eine Reaktivitätsreihe für die Verbindungen jeder Gruppe bei SN₁-Reaktionen auf:
- 2-Brom-2-methylbutan, 1-Brompentan, 2-Brompentan
 - 1-Brom-3-methylbutan, 2-Brom-2-methylbutan, 2-Brom-3-methylbutan
 - 1-Brombutan, 1-Brom-2,2-dimethylpropan, 1-Brom-2-methylbutan, 1-Brom-3-methylbutan.
- III. Nimm als Beispiel ein beliebiges Alkylhalogenid und NaOH in wässriger Lösung. Vergleiche beide Mechanismen, indem Du eine Tabelle mit einer Spalte für die SN₁- und einer anderen für die SN₂-Reaktion anfertigst, hinsichtlich folgender Kategorien:
- der Stereochemie
 - der Reaktionsordnung
 - der relativen Geschwindigkeit von CH₃X, C₂H₅X, iso-C₃H₇X und tert.-C₄H₉X.
 - der relativen Geschwindigkeit von R-Cl, R-Br und R-I.
 - des Einflusses einer Verdoppelung der Konzentration von R-X auf die Reaktionsgeschwindigkeit
 - des Einflusses einer Verdoppelung der Konzentration von OH⁻ auf die Reaktionsgeschwindigkeit
 - des Einflusses der Erhöhung des Wassergehaltes der Lösung auf die Reaktionsgeschwindigkeit

Lösungen

I. Formuliere die **Strukturformeln** der folgenden Verbindungen in jeder Gruppe und ordne die Verbindungen nach ihrer **Reaktivität bei SN2-Reaktionen**:

a) 2-Brom-2-methylbutan, 1-Brompentan, 2-Brompentan



Die Reaktivität nimmt für **SN2-Reaktionen ab**: zunehmende **sterische Hinderung** erschwert SN2.

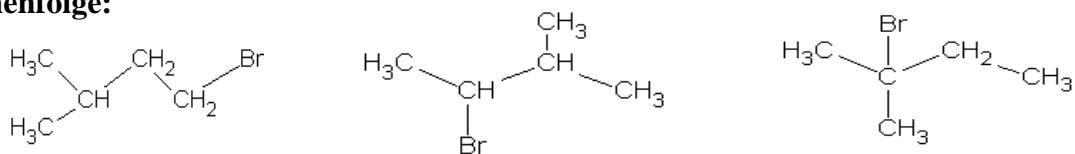
Die Reaktivität nimmt für **SN1-Reaktion zu**: zunehmende Stabilisierung durch den **+I-Effekt** der Methylgruppen. Sterische Hinderung und +I-Effekt ergänzen sich und begünstigen SN1. Unterschiede in der RG bei **SN2-Reaktionen** sind hauptsächlich auf **sterische Faktoren** und nicht auf elektronische Faktoren zurückzuführen.

Je größer die Anzahl der Substituenten an dem Kohlenstoff ist, der das Halogen trägt, desto kleiner wird die Reaktivität gegenüber einer SN2-Reaktion.

Unterschiede in der RG bei **SN1-Reaktionen** sind hauptsächlich auf elektronische Faktoren und nicht auf **sterische Faktoren** zurückzuführen.

b) 1-Brom-3-methylbutan, 2-Brom-2-methylbutan, 2-Brom-3-methylbutan

SN2-Reihenfolge:



Reaktivität für SN2 nimmt ab

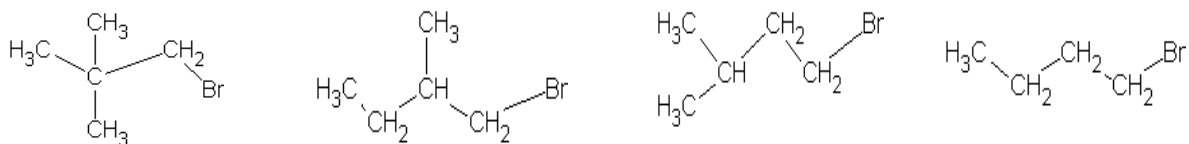
für SN1 zu

zunehmende sterische Hinderung erschwert SN2

zunehmender +I-Effekt begünstigt SN1

c) 1-Brombutan, 1-Brom-2,2-dimethylpropan, 1-Brom-2-methylbutan, 1-Brom-3-methylbutan.

Reihenfolge für Reaktionsgeschwindigkeit nach **SN2** zunehmend:



abnehmende sterische Hinderung durch die Methyl-Gruppen begünstigt SN2

abnehmender +I-Effekt erschwert SN1: der +I-Effekt ist aber nicht stark vorhanden: das Reaktionszentrum ist immer ein primäres C-Atom.

- III. Nimm als Beispiel ein beliebiges Alkylhalogenid und NaOH in wässriger Lösung. Vergleiche beide Mechanismen, indem Du eine Tabelle mit einer Spalte für die SN1- und einer anderen für die SN2-Reaktion anfertigst, hinsichtlich folgender Kategorien:
- der Stereochemie
 - der Reaktionsordnung
 - der relativen Geschwindigkeit von CH_3X , $\text{C}_2\text{H}_5\text{X}$, $\text{iso-C}_3\text{H}_7\text{X}$ und $\text{tert.-C}_4\text{H}_9\text{X}$.
 - der relativen Geschwindigkeit von R-Cl, R-Br und R-I.
 - des Einflusses einer Verdoppelung der Konzentration von R-X auf die Reaktionsgeschwindigkeit
 - des Einflusses einer Verdoppelung der Konzentration von OH^- auf die Reaktionsgeschwindigkeit
 - des Einflusses der Erhöhung des Wassergehaltes der Lösung auf die Reaktionsgeschwindigkeit

Kriterien	SN1	SN2
Stereochemie	Inversion und Retention: Racemisierung	vollständige Inversion: Waldensche Umkehr
Reaktionsordnung	Reaktion 1. Ordnung	Reaktion 2. Ordnung
relative Geschwindigkeit von : Alkylstruktur	$\text{CH}_3\text{X} < \text{C}_2\text{H}_5\text{X} < \text{iso-C}_3\text{H}_7\text{X} < \text{tert.-C}_4\text{H}_9\text{X}$.	$\text{CH}_3\text{X} > \text{C}_2\text{H}_5\text{X} > \text{iso-C}_3\text{H}_7\text{X} > \text{tert.-C}_4\text{H}_9\text{X}$.
relative Geschwindigkeit: Abgangsgruppe	R-Cl < R-Br < R-I Reaktivität ----> zunehmend	R-Cl < R-Br < R-I. Reaktivität ----> zunehmend
RG <--> Verdoppelung von c(RY)	Verdoppelung von c(R-X) verdoppelt die RG	Verdoppelung von c(R-X) verdoppelt die RG
RG <--> Verdoppelung von c(OH ⁻)	Verdoppelung von c(OH ⁻) spielt keine Rolle	Verdoppelung von c(OH ⁻) verdoppelt die RG
RG <--> Erhöhung des Wassergehaltes	Erhöhung des Wassergehaltes steigert die RG	Erhöhung des Wassergehaltes beeinflusst nicht wesentlich die RG