

## Übungszettel Nr. 1: Grundbegriffe und nukleophile Substitution

### Aufgabe 1

Erklären Sie mit Hilfe der Gibbs-Helmholtz-Gleichung:

- Weshalb Cyclopentadien bei Raumtemperatur hauptsächlich als Dimer vorliegt, aber als Monomer abdestilliert.
- Weshalb Polystyrol beim Erhitzen depolymerisiert.

### Aufgabe 2

- Was besagt das Polanyi-Prinzip?
- Zeichnen Sie die Energieprofile von zweistufigen Reaktionen:
  - mit einem frühen Übergangszustand!
  - mit einem späten Übergangszustand!

Wie kann man die Geometrien (Energien) des jeweils ersten Übergangszustandes abschätzen?

### Aufgabe 3

- Erklären Sie die Begriffe *Reaktivität*, *Selektivität*, *thermodynamische Kontrolle*, *kinetische Kontrolle*.
- Erklären Sie die Begriffe *Stereoselektivität*, *Stereospezifität*, *Stereokonvergenz*.
- Erklären Sie die Begriffe *Konstitutionsisomer*, *Konfigurationsisomer*, *Konformer*.
- Erklären Sie die Begriffe *Enantiomer* und *Diastereomer*.

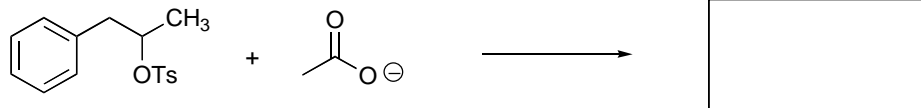
### Aufgabe 4

Nukleophile Substitutionen können nach zwei verschiedenen Mechanismen ablaufen.

- Was versteht man unter einem "Reaktionsmechanismus" (Definition)?
- Benennen Sie die beiden Mechanismen der nukleophilen Substitution (Schlagwort).
- Geben Sie für die allgemeine Reaktion eines Substrat  $R_3C-X$  mit einem Nukleophil  $Nu^-$  für beide Mechanismen jeweils das Reaktionsschema und das Reaktionsprofil an.
- Markieren Sie in den Reaktionsprofilen alle Zwischenstufen und Übergangszustände.
- Zeichnen Sie in die Reaktionsprofile für alle Elementarreaktionen die zugehörigen Aktivierungsenergien ein.
- Geben Sie an Hand der Reaktionsprofile an, welches der geschwindigkeitsbestimmende Schritt bei beiden Mechanismen ist und begründen Sie stichwortartig.

**Aufgabe 5**

Gegeben sei folgende Reaktion:



- Geben Sie das Produkt oder die Produkte an. Um welchen Reaktionstyp handelt es sich?
- Begründen Sie mit Hilfe der Reaktivität der anwesenden Nucleophile, warum die Reaktion im wesentlichen in der angegebenen Richtung abläuft und nicht umgekehrt.
- Es handelt sich bei der gezeigten Reaktion um eine **einstufige** Reaktion. Zeichnen Sie unter Berücksichtigung von (b) das Reaktionsprofil, und markieren Sie eventuelle Zwischenstufen oder Übergangszustände.
- Zeichnen Sie die Konkurrenzreaktion in das Reaktionsprofil, die bei Zugabe von  $\text{EtO}^-$  als Nukleophil stattfindet. Welche der beiden Reaktionen läuft bevorzugt ab und warum? Ist die Bevorzugung einer Reaktion eher durch Reaktivität oder durch Selektivität zu begründen?