Chemie, Reaktionsmechanismen

**Nukleophile Substitution (SN)**

**Edukte:** (1) Alkohole\* mit Halogenwasserstoffsäuren // (2) Halogenalkane mit Basen // allgemein: Stoffe, deren Moleküle C-Atome mit elektronegativeren Substituenten haben (z.B. auch (3) Alkoholate)



**Reaktionsbedingungen:** sauer oder alkalisch

**Produkte:** (1) Halogenalkane , (2) Alkohole, (3) Ether

**Reaktionsgleichung:** R-Nu1 + Nu2- => R-Nu2 + Nu1- (Nu= Nukleophil)

**\*** Bei **Alkoholen**: Die Hydroxylgruppe ist eine schlechte Abgangsgruppe. Durch **Protonierung** wird sie zu –OH2+ (Oxoniumion) und geht dann als H2O leichter ab. Daher muss eine Säure verwendet werden.

**Mechanismus:**

**SN1-Mechanismus (monomolekularer Mechanismus):**Zunächst erfolgt die Abspaltung des abgehenden Nukleophils (geschwindigkeitsbestimmender Schritt), wodurch ein Carbokation entsteht. Dann folgt die Addition des angreifenden Nukleophils. Beim Vorliegen von vier verschiedenen Substituenten am betroffenen C-Atom entstehen zwei Spiegelbildisomere.

**SN2-Mechanismus (bimolekularer Mechanismus):**Abspaltung und Addition erfolgen gleichzeitig. Beim SN2 Mechanismus entsteht bei einem Produkt mit vier verschiedenen Substituenten nur eines der beiden Spiegelbildisomere. Der Angriff erfolgt von der Rückseite des abgehenden Nukleophils. Die Reaktion verläuft also **stereospezifisch**.

Es ist nicht für jede Reaktion bekannt, nach welchem der beiden Mechanismen sie abläuft. Es gibt jedoch drei Faktoren, die den Verlauf beeinflussen:

**Sterische Effekte:** Raumgreifende Substituenten (z.B. mehrere Alkylgruppen) und raumgreifende Nukleophile begünstigen den SN1-Mechanismus.

**Induktive Effekte:** Das beim SN1-Mechanismus entstehende Carbokation ist umso stabiler, je weniger die positive Ladung am C-Atom lokalisiert ist.
Substituenten mit +I-Effekt schwächen die positive Ladung am C-Atom und stabilisieren so das Carbokation. Der SN1-Mechanismus wird begünstigt.
Substituenten mit -I-Effekt schwächen die positive Ladung am C-Atom, destabilisieren so das Carbokation und erhöhen die Wahrscheinlichkeit für einen Verlauf nach SN2.

**Lösungsmittel:** Polar-protische Lösungsmittel begünstigen den Verlauf nach SN1, da sie Ionen besonders gut stabilisieren.

**Beispiele für Mechanismen:**





primäres Halogenalkan mit primärem Alkoholation nach SN2



**Info:** Alkoholate gewinnt man durch Umsetzung mit Natrium oder Kalium. Dabei entstehen Wasserstoff und das entsprechende Alkoholat:

2 R-OH + 2 Na => 2 R-O- + 2 Na+ + H2

****

**Merkhilfe SN2**

**(bimolekular)**

(kleine Reste (primär, -I)

0. (Protonierung bei Alkoholen)

1. Abspaltung + Addition

**Merkhilfe SN1**

**(monomolekular)**

(große Reste (tertiär), +I)

0. (Protonierung bei Alkoholen)

1. Abspaltung (=> Carbokation)

2. Addition