

Kategorie: Animieren & Simulieren

Reaktionsmechanismen

Zurzeit sind 4 Beschreibungen von Mechanismen vorhanden:

Radikalische Substitution: Methan mit Chlor
Elektrophile Addition: Propen mit HCl

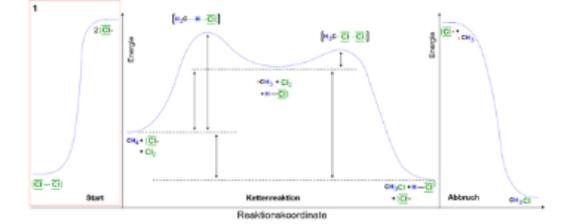
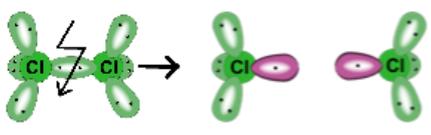
Elektrophile Addition: Ethen mit Brom
Nucleophile Addition: Veresterung

Das Grundschemata ist für alle Mechanismen gleich:

S_R Mechanismus der radikalischen Substitution: Methan mit Chlor

$$\text{Cl-Cl} \xrightarrow{\text{UV-Strahlung}} \text{Cl}\cdot + \cdot\text{Cl}$$

Startreaktion



1. Startreaktion:
Durch Zuführung von Strahlungsenergie (UV) werden Chlormoleküle in Chlorradikale (Stoffe mit einem ungepaarten Elektron) gespalten (Homolyse).

Navigationssymbole: Dokument, Bildschirm leeren, Zurück, Vorwärts, Wiederholen, Home

Unter der Überschrift ist das Hauptfenster, in dem die **Reaktionsmechanismen** so gezeichnet sind, wie die Schüler sie auch wiedergeben sollen

Darunter links sind „räumliche“ **Bilder oder Elektronendichtedarstellungen**, die den jeweiligen Schritt verdeutlichen sollen.

Daneben ist das **Energiediagramm** der Reaktion mit dem jeweiligen Schritt.

In der Fußzeile findet man folgende Symbole. Bedeutung:



Ausblenden des Textes unterhalb



Bildschirm leeren



einen Schritt zurück beim Mechanismus



einen Schritt vor beim Mechanismus



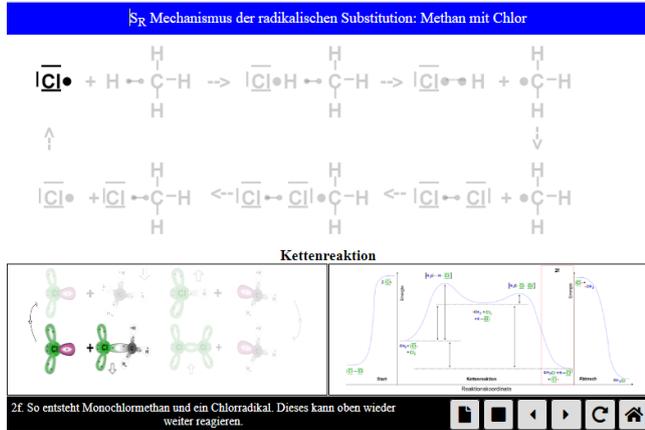
Animation wiederholen



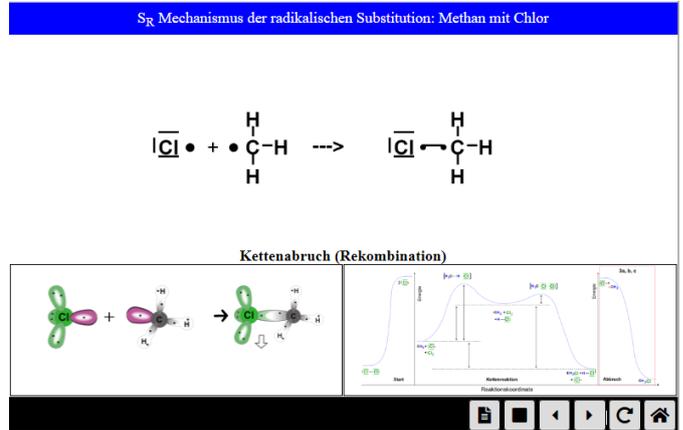
Zum Wahlmenü

Radikalische Substitution (Methan mit Chlor)

Die Startreaktion ist schon auf der vorigen Seite abgebildet:



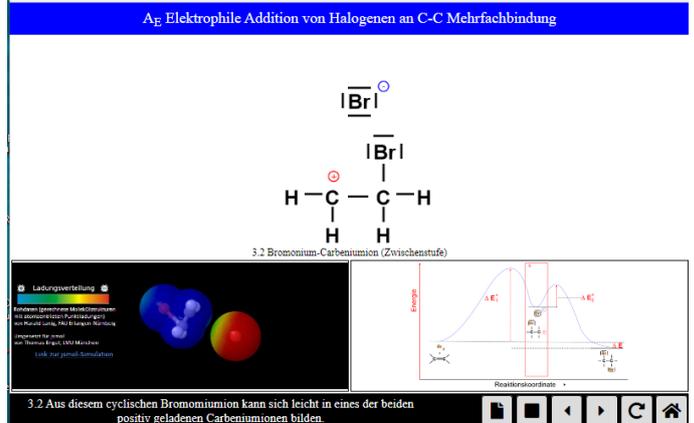
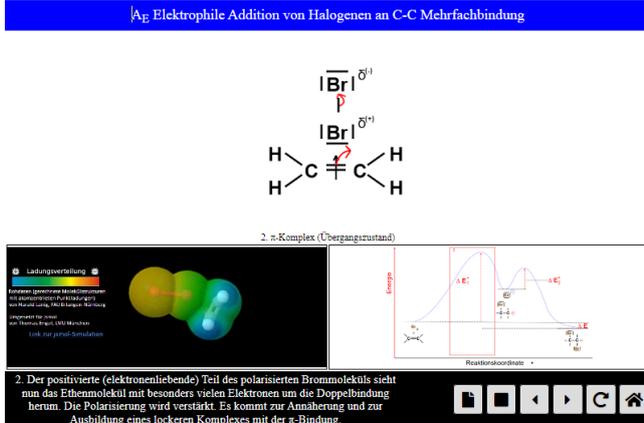
Kettenreaktion



eine der Kettenabbruchreaktionen.

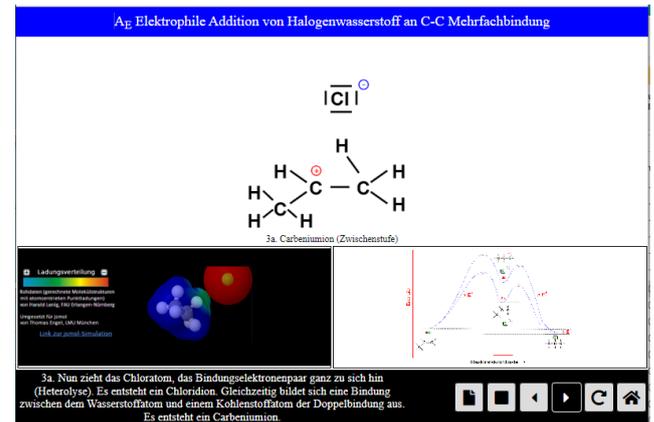
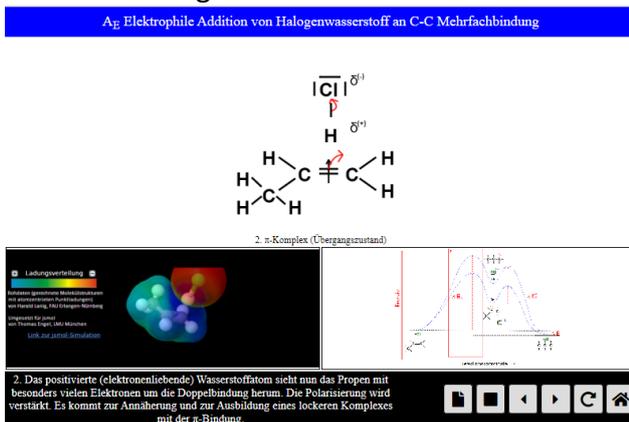
Elektrophile Addition (Ethen mit Brom)

Die Animation zeigt die Elektrophile Addition von Brom an Ethen. Dazu werden Der Energieverlauf während der Reaktion und die Ladungsverteilung in den Teilchen dargestellt.



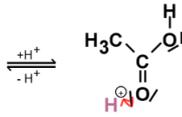
Additionsreaktion von Chlorwasserstoff und Propen.

.. verläuft analog



Veresterung: Nucleophile Additionsreaktion

A_N Nucleophile Addition an Carbonyl-C=O :Veresterung

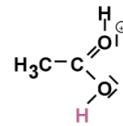


1. Protonierung der Carbonsäure (Beispiel Essigsäure) durch eine Säure



1. Die Schwefelsäure reagiert als Protonendonator und protoniert die Essigsäure an der elektronegativeren Stelle, dem Carbonyl-Sauerstoff. Es entsteht ein Carbeniumion.

A_N Nucleophile Addition an Carbonyl-C=O :Veresterung

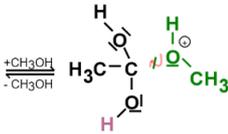


2a. Mesomere Formeln



Das entstandene Carbenium lässt sich in drei verschiedenen mesomeren Formen mit dann zum Teil auch positiven Sauerstoffatomen beschreiben.

A_N Nucleophile Addition an Carbonyl-C=O :Veresterung

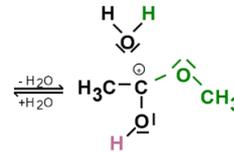


2b. Addition des Alkohols (hier: Methanol) an das Carbeniumion



An das entstandene Carbenium greift ein freies Elektronenpaar des Alkoholsauerstoffs nucleophil an und bildet eine Bindung. Durch die Addition wird das Alkoholsauerstoffatom positiv geladen.

A_N Nucleophile Addition an Carbonyl-C=O :Veresterung

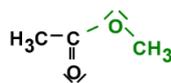


4. Abspaltung von Wasser



Nun spaltet sich Wasser vom Molekül ab, Wasser ist ein sehr stabiles Molekül. Das ist energetisch günstig. Es entsteht ein Carbeniumion.

A_N Nucleophile Addition an Carbonyl-C=O :Veresterung



6. Ein Estermolekül (Essigsäuremethylester) ist entstanden



Alle Teilschritte dieses Mechanismus sind reversible Reaktionen. Daher ist es auch möglich, einen Ester säurekatalysiert in einen Alkohol und eine Carbonsäure zu spalten (Verseifung). Benutzt man Schwefelsäure als Katalysator wird durch diese das entstehende Wasser gebunden und die Veresterungsreaktion bevorzugt.