

Übungsaufgaben zu Kohlenwasserstoffen, halogenierten KW und Valenzbindungsmodell

Vorbemerkung: Die Fragen decken nicht das gesamte Themengebiet ab! Einige der Fragen sind ehemalige Klassenarbeitsfragen.

1. Bindungstheorie: Valenzbindungsmodell, Hybridisierung

wichtige Fachbegriffe: Elektronenkonfiguration (in Kurzschreibweise), Pauli-Prinzip, HUND'sche Regeln, Atomorbitale, s-Orbitale, p-Orbitale, d-Orbitale, (f-Orbitale), Quantenzahlen, sp^3 -Hybridisierung, sp^2 -Hybridisierung, sp -Hybridisierung, Überlappung von Orbitalen, Hybridorbitale und ihre räumliche Anordnung, π - und σ -Bindungen

Schulbuch: „Chemie heute“, S. 42 – 44 (nur so weit wie im U behandelt, Abbildungen besonders relevant)

- 1.1. Notieren Sie die Elektronenkonfiguration folgender Atome in Kurzschreibweise: Si, Mn, O.
- 1.2. Erklären Sie mit dem Kästchenschema für Stickstoff die HUNDSche Regel. Welche Anzahl an Bindungen geht Stickstoff ein?
- 1.3. Was versteht man unter dem PAULI-Prinzip?
- 1.4. Erklären Sie die räumliche Form von Ethan und die darin enthaltenen Bindungen mit dem Valenzbindungsmodell
- 1.5. Beschreiben Sie ausführlich alle Bindungen im Chlorethen mithilfe des Valenzbindungsmodells.
- 1.6. Geben Sie die Elemente Stickstoff (N), Silizium (Si) und Zink (Zn).
 - a) Geben Sie die Elektronenkonfigurationen und die Kästchenschemata der 3 Elemente an.
 - b) Begründen Sie, bei welchen der drei Elemente eine höhere Ionisierungsenergie zu erwarten ist, als bei den jeweils benachbarten Elementen (d.h. lokales Maximum)

2. Alkane und ihre Reaktionen, Halogenkohlenwasserstoffe, Reaktionen von Kohlenwasserstoffen (allgemein)

wichtige Fachbegriffe: Konstitutionsisomere, Konformation, radikalische Substitution, van-der-Waals-Kräfte, Nomenklatur der Alkane und Halogenalkane, Strukturformel, Halbstrukturformel, Skelettformel, homologe Reihe der Alkane

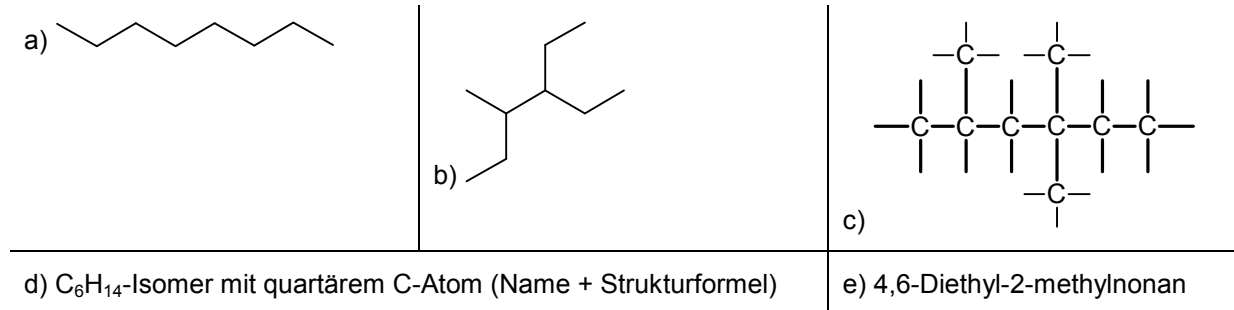
Schulbuch: „Chemie heute“: S. 64, S. 278 – 283 (nur so weit wie im U behandelt, Abbildungen besonders relevant),

- 2.1. Zeichnen und benennen Sie 5 Konstitutionsisomere mit der Formel C_7H_{16} . Von mehrfach verzweigten Verbindungen können Sie der Übersicht halber Halbstrukturformeln oder Skelettformeln angeben.
- 2.2. Fluor (F_2) hat einen Siedepunkt von -188 °C , Brom (Br_2) hingegen einen Siedepunkt $+59\text{ °C}$. Erklären Sie diesen Unterschied ausführlich.
- 2.3. Ordnen Sie folgende Moleküle nach steigenden Siedepunkten: 2-Methylpentan, n-Hexan, 2,3-Dimethylbutan. Begründen Sie die Zuordnung.
- 2.4. 20 Gramm Methan sollen vollständig in Tetrachlorkohlenstoff überführt werden (*Perchlorierung*). Geben Sie die Reaktionsgleichung an und berechnen Sie die benötigte Masse Cl_2 und die entstehende Masse CCl_4 (unter der Annahme dass 100%iger Stoffumsatz erfolgt und keine Konkurrenzreaktionen auftreten).
- 2.5. Bei der Chlorierung von Ethan entsteht Chlorethan. Formulieren Sie einen Mechanismus für diesen Prozess. Nennen Sie 3 mögliche Nebenprodukte.
- 2.6. Obwohl Dichlormethan im Gegensatz zum völlig unpolaren Methan zumindest eine geringe *Polarität* besitzt, so ist es doch *hydrophob* und mischt sich nicht mit H_2O . Erklären Sie diese Eigenschaften.
- 2.7. Brom löst sich sehr gut in Hexan, jedoch nur mäßig in Wasser. Erklären Sie!
- 2.8. Formulieren Sie die Reaktionsgleichungen (in Summenformeln) für die vollständige Verbrennung von

- a) Methan b) Propan c) Cyclohexan d) Ethin

2.9. Formulieren Sie die Strukturformeln und die Namen von mindestens 10 Konstitutionsisomeren, die zu den Chlorfluorheptanen ($C_7H_{14}ClF$) gehören. Hinweis: Die Substituenten werden im Namen streng alphabetisch sortiert (unabhängig davon ob es sich Alkylsubstituenten (z.B. Methyl-Rest) oder Halogen-Substituenten handelt (z.B. Chlor))

2.10 Geben Sie den systematischen Namen bzw. die Strukturformel an.



2.11 Aus Methan soll mit einem geeigneten Reagenz 1000 g Dichlormethan hergestellt werden:

- Geben Sie die Reaktionsgleichung an und berechnen Sie die Massen an Ausgangsstoffe für die Synthese von 1 kg Dichlormethan (Annahme: 100%iger Stoffumsatz, keine Nebenreaktionen).
- Erläutern Sie ausführlich den Mechanismus mit Reaktionsgleichungen zur Bildung des Dichlormethans und dazugehörigem Text. Hinweis: Konkurrenzreaktionen und Abbruchreaktionen können an nur einem Beispiel aufgezeigt werden.

2.12 4. 1-Brombutan ist nicht geeignet, um aus n-Butan und Brom über eine radikalische Substitution hergestellt zu werden. Begründen Sie stichwortartig und geben Sie Name und Strukturformel des tatsächlich entstehenden Hauptprodukts an.

2.13 Alkane

- Skizzieren Sie den Verlauf der Siedepunkte der n-Alkane mit steigender Kettenlänge bis ca. C_{20} -Alkan (Eicosan). x-Achse: C-Kettenlänge y-Achse: Temperatur. Geben Sie auf der y-Achse 2 Richtwerte (ungefähre Angaben/Größenordnung) zur Temperatur an. Begründen Sie ausführlich den Verlauf der Kurve.
- Füllt man bei $0\text{ }^\circ\text{C}$ 100 mL eines gasförmigen Alkans in eine Glaskugel, so nimmt deren Masse um 0,197 g zu. Um welches Alkan handelt es sich? Hinweis: Bei den gegebenen Bedingungen nimmt 1 mol eines beliebigen Gases 22,4 L ein.
- Beschreiben Sie alle Bindungen im n-Butan: Welche Orbitale überlappen jeweils? Gerne auch als vollständig beschriftete Zeichnung.

3. Ungesättigte Kohlenwasserstoffe und ihre Reaktionen

wichtige Fachbegriffe: positive und negative induktive Effekte, elektrophile Addition, Regel von Markovnikov, Eliminierung, cis-trans-Isomerie (Z- und E-Isomerie), π -Komplex, σ -Komplex, homolytische und heterolytische Bindungsspaltung, Hydrierung, Dehydrierung, Halogenierung (z.B. Chlorierung), Dehalogenierung, Hydrohalogenierung (z.B. Hydrobromierung), Dehydrohalogenierung, Hydratisierung, Dehydratisierung

Schulbuch: „elemente2“: S. 198 – 199,

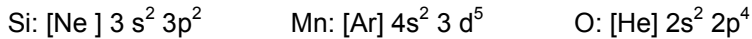
3.1. Formulieren Sie die Strukturformeln und die systematischen Namen von 2 Konstitutionsisomeren und 2 Konfigurationsisomeren zu 2,3-Dichlorbut-2-en.

- 3.2.** Erklären Sie kurz bzw. stichwortartig folgende Fachbegriffe: Radikale, homolytische Bindungsspaltung, heterolytische Bindungsspaltung, Konfiguration, Konformation, Konstitution, Derivate, allgemeine Summenformel, homologe Reihe, VAN-DER-WAALS-Kraft (genau erklären können!)
- 3.3.** Durch Reaktion von *trans*-1,2-Dichlor-1-propen mit H₂ (Hydrierung) kann 1,2-Dichlorpropan gewonnen werden.
- a) Notieren Sie die Reaktionsgleichung in Strukturformeln .
- b) Welche Masse des Produkts entsteht, wenn 29,96 g *trans*-1,2-Dichlor-1-propen vollständig umgesetzt wird?
Hinweis: *trans*-1,2-Dichlor-1-propen $M(C_3H_4Cl_2) = 110,9699 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$; $M(C_3H_6Cl_2) = 112,9857 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$
- 3.4.** Die Dehydrierung einer Substanz führt zur Bildung von Propen.
- a) Formulieren Sie die Reaktionsgleichung in Strukturformeln und nennen Sie den Namen des Reaktionsmechanismus.
- b) Beschreiben Sie alle Bindungen die im Produkt enthalten sind (mit sorgfältig beschrifteter Skizze und Text).
- c) Wie viel Gramm Propen müssten verbrannt werden, um 10 g CO₂ zu bilden?

www.laborberufe.de (die kommentierten Lösungen zu diesen Aufgaben)

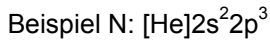
Lösungen und Lösungshinweise – ohne Gewähr

1.1

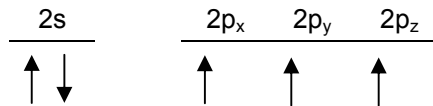


1.2.

Die HUNDSche Regel besagt, dass die Orbitale mit gleicher Nebenquantenzahl (z.B. 4p-Orbitale, 3d-Orbitale) zuerst einzeln besetzt werden. Erst wenn alle Orbitale dieser Quantenzahl einfach besetzt sind, wird begonnen die Orbitale doppelt zu besetzt.



Kästchenschema der Außenschale:



Die 2 p-Orbitale sind einfach besetzt.

Ohne Beachtung dieser HUNDSchen Regel wäre z.B. folgende Besetzung denkbar: $p_x^2 p_y^1 p_z^0$

Stickstoff besitzt 3 einfach besetzt Orbitale, entsprechend erwartet man 3 Bindungen, die durch Überlappung mit entsprechendem Orbitalen der Bindungspartner entstehen. So ist dann auch die Edelgaszustand erreicht. Beispiel: NH_3 , N_2 (N-N-Dreifachbindung!).

1.3.

Das PAULI-Prinzip besagt, dass die Elektronen eines Atoms sich in mindestens einer der 4 Quantenzahlen unterscheiden. Besitzen zwei Elektronen dieselbe Hauptquantenzahl (befinden sich also in der gleichen Schale, z.B. $n=2 \Rightarrow 2.$ Schale), dieselbe Nebenquantenzahl (befinden sich also in derselben Orbitalart, z.B. $l=2 \Rightarrow p$ -Orbital), dieselbe magnetische Quantenzahl (befinden sich also im selben Orbital, z.B. $m=1 \Rightarrow$ z.B. p_x -Orbital), so müssen sie sich zumindest in der 4. Quantenzahl, der Spinquantenzahl, unterscheiden. Da nur 2 mögliche Werte für die Spinquantenzahl erlaubt sind ($-\frac{1}{2}$, $+\frac{1}{2}$), kann so ein Orbital nur von maximal 2 Elektronen besetzt werden. Für diesen Fall müssen sich die Elektronen aber dann Spin unterscheiden.

1.4.

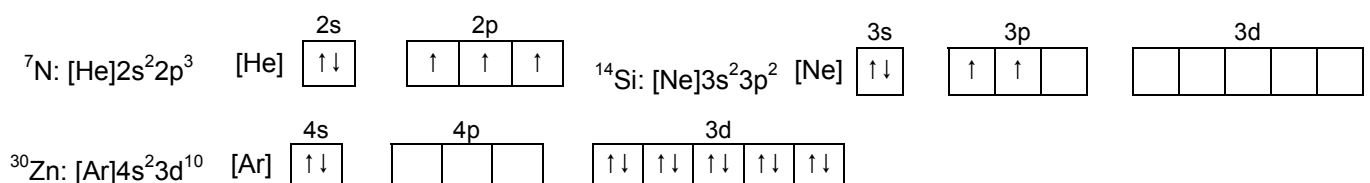
Beide C-Atome sind sp^3 -Hybridisiert. Durch Überlappung von 2 sp^3 -HO entsteht eine σ -Bindung (sigma-Bindung). Die restlichen 3 sp^3 -HOs überlappen jeweils mit dem 1s-AOs des H-Atome.

1.5.

Das C=C-Grundgerüst im Chlorethen entspricht dem vom Ethen, d.h. neben einer σ -Bindung die durch Überlappung von 2 sp^2 -Hybridorbitalen zustande kommt, existiert zwischen den C-Atomen auch eine π -Bindung. Sie kommt durch Überlappung von zwei p-AO zustande. Die 3 H-Atome überlappen mit ihren s-AO's jeweils mit einem sp^2 -HO.

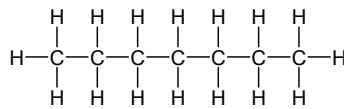
Das Cl-Atom besitzt ein einfach besetztes p-AO. (Elektronenkonfiguration Cl: $[\text{Ne}]3s^2 3p^5$). Dieses p-AO kann mit dem noch verbleibenden, einfach besetzten sp^2 -HO des Kohlenstoffatoms überlappen.

1.6

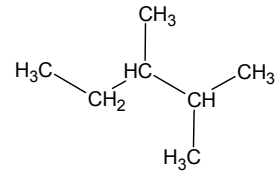


b) Eine stabile e^- -Konfiguration führt zu hohen IE. Dies ist bei voll und halb besetzten p- oder d-Schalen der Fall. Somit besitzen N (halb besetzte p-Schale) und Zn (voll besetzte d-Schale) eine höhere IE als ihre rechten bzw. linken PSE-Nachbarn.

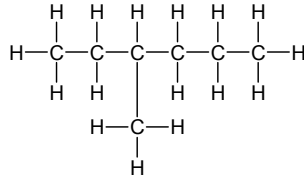
2.1.



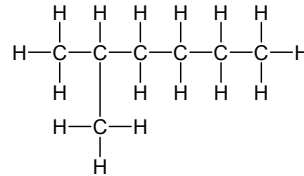
n-heptane



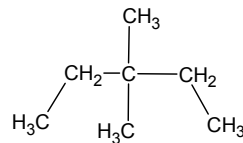
2,3-dimethylpentane



3-methylhexane



2-methylhexane



3,3-dimethylpentane

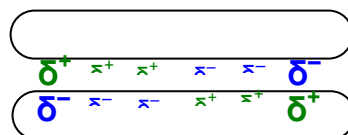
Es existieren auch viele weitere Konstitutionsisomere.

2.2

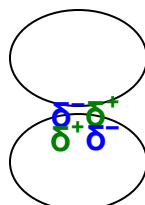
siehe z.B. auch Schulbuch S. 64. Brom ist ein größeres Molekül, dessen Atome ausladendere Elektronenhüllen besitzen. So sind bei Brom 4 Elektronenschalen besetzt, bei Fluor hingegen nur 2 Elektronenschalen. Diese weit außen liegenden Elektronen unterliegen weniger der anziehenden Kräfte des Atomkerns. Die Elektronenhülle im Brom ist deshalb leichter polarisierbar, d.h. es kann leichter zu spontanen (temporären) und induzierten Bildung von Dipolen kommen. Insgesamt existiert bei Brom deshalb ein stärkerer Zusammenhalt der Moleküle untereinander, denn die van-der-Waals-Kräfte sind größer als beim Fluor.

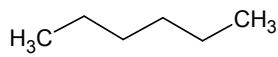
2.3.

VAN-DER-WAALS-Kräfte sind (im deutschen Sprachgebrauch) bindende Wechselwirkungen zwischen einem „zufälligen“ Dipol (oder „spontaner Dipol“) und einem im Nachbarmolekül induzierten Dipol. Je größer die Kontaktfläche, mit denen Nachbarmoleküle aufeinander treffen, desto stärker kann die VAN-DER-WAALS-Bindung werden. Grund: Große Kontaktflächen zwischen Dipolen erhöht die elektrostatische Anziehung.

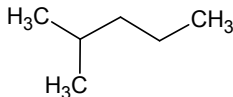


Eine elektrostatische Anziehung ist bei eher kugeligem, bzw. kompakteren Molekülbau nicht über weitere Teile des Moleküls möglich, denn die Berührungsflächen sind kleiner als bei länglichem Bau. Entsprechend fällt hier der Zusammenhalt der Moleküle untereinander gering aus, die Siedepunkte sind entsprechend niedrig:

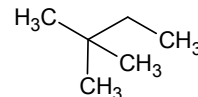




n-hexane



2-methylpentane



2,2-dimethylbutane

Alle drei Moleküle besitzen die gleiche Summenformel aber unterschiedliche Konstitution (Unterschiedliche Verknüpfung der Atome), damit sind sie zueinander konstitutionsisomer. Mit stärker verzweigtem, und damit kompakteren Bau, nimmt der Siedepunkt ab:

Siedepunkte: n-Hexan: 69°C, 2-Methylpentan: 60 °C, Dimethylbutan: 50 °C

2.4.

Reaktionsgleichung: $\text{CH}_4 + 4 \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CCl}_4 + 4 \text{HCl}$

a) Berechnung der Stoffmenge CH_4 .

$$n(\text{CH}_4) = \frac{m(\text{CH}_4)}{M(\text{CH}_4)} \Rightarrow n(\text{CH}_4) = \frac{20,0 \text{ g}}{16,043 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \approx 1,2466 \text{ mol}$$

b) Berechnung der Stoffmenge und der Masse an Cl_2

$n(\text{Cl}_2) = 4 \cdot n(\text{CH}_4)$ (Folgt aus dem Koeffizientenverhältnis der Reaktionsgleichung)

$\Rightarrow n(\text{Cl}_2) = 4 \cdot 1,2466 \text{ mol} \approx 4,9866 \text{ mol}$.

$$m(\text{Cl}_2) = M(\text{Cl}_2) \cdot n(\text{Cl}_2) \Rightarrow m(\text{Cl}_2) = 70,9054 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot 1,2466 \text{ mol} \approx 88,3907 \text{ g}$$

c) Berechnung der Stoffmenge und der Masse an CCl_4

$n(\text{CH}_4) = n(\text{CCl}_4)$ (Folgt aus dem Koeffizientenverhältnis der Reaktionsgleichung)

$\Rightarrow n(\text{CCl}_4) = 1,2466 \text{ mol}$

$$m(\text{CCl}_4) = M(\text{CCl}_4) \cdot n(\text{CCl}_4) \Rightarrow m(\text{CCl}_4) = 153,822 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot 1,2466 \text{ mol} \approx 191,75 \text{ g}$$

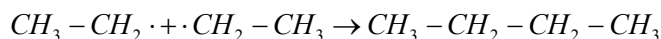
2.5.

Kettenstart: UV-Strahlung bedingt die homolytische Spaltung von Chlor. $\text{Cl}_2 \xrightarrow{\text{UV-Strahlung}} 2 \text{Cl}\cdot$

Reaktionskette: $\text{CH}_3 - \text{CH}_3 + \text{Cl}\cdot \rightarrow \text{HCl} + \cdot\text{CH}_2 - \text{CH}_3$

$\cdot\text{CH}_2 - \text{CH}_3 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{ClCH}_2 - \text{CH}_3 + \cdot\text{Cl}$

Abbruchreaktionen: Reaktion zwischen 2 beliebigen Radikalen:

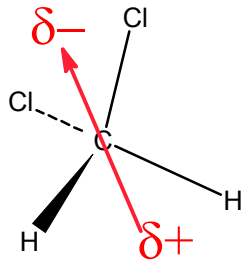


Nebenprodukte: In Abhängigkeit des Chloranteils im Reaktionsgemisch kann es auch zur Mehrfachchlorierung kommen. Dabei wird schon chlorierten Molekülen während der Reaktionskette mit $\text{Cl}\cdot$ ein H-Atom entrissen.

Durch Reaktion radikalischer organischer Moleküle untereinander, kann es in sehr geringem Ausmaß auch Kettenverlängerung kommen.

2.6

Halogenierte Kohlenwasserstoffe besitzen polare Elektronenpaarbindungen zwischen dem Kohlenstoff und dem Halogen z.B. Cl. Die höhere Elektronegativität des Halogen bewirkt, dass es die Bindungselektronen näher zu sich zieht. Insgesamt entstehen Dipolmoleküle, die einen δ^- -Pol und einen δ^+ -Pol besitzen.



Dichlormethan mit eingezeichnetem Dipolvektor.

Bei einigen Halogenalkanen, wie z.B. Tetrachlorkohlenstoff fällt aufgrund des hochsymmetrischen regelmäßigen Baus, der Schwerpunkt der Orte negativer Ladungsdichte mit dem positiven Pol zusammen, so dass es sich hier um unpolare Moleküle handelt.

Obwohl Verbindungen wie Dichlormethan zumindest eine geringe Polarität besitzen, lösen sie sich nur schlecht im ebenfalls polaren Wasser. Die starken Wechselwirkungen zwischen den H₂O-Molekülen (Wasserstoffbrücken) bzw. die Wechselwirkungen zwischen den Dichlormethanmolekülen untereinander lassen sich nicht durch H₂O-Dichlormethan-Wechselwirkungen kompensieren/ersetzen. Es bilden sich 2 Phasen und die Moleküle gehen bindende Wechselwirkungen nur mit ihresgleichen ein.

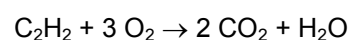
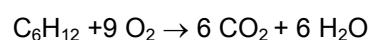
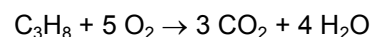
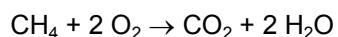
Aus Symmetriegründen sind alle gesättigten aliphatischen (kettenförmig, nicht-cyclisch) Kohlenwasserstoffe unpolare.

2.7

Brom ist ein unpolares Molekül und löst sich damit gut in unpolaren Lösungsmitteln wie z.B. *n*-Hexan. Zwischen den Molekülen kommt es zu bindenden Wechselwirkungen, den VAN-DER-WAALS-Kräften.

In Wasser ist Brom hingegen nur mäßig löslich, weil sich beide Stoffe in der Polarität unterscheiden. Zwar können Wassermoleküle als permanente Dipole in benachbarten Brommolekülen Dipolen induzieren. Allerdings sind die dabei entstehenden bindenden Wechselwirkungen schwächer als die H₂O-H₂O-Wechselwirkungen (Wasserstoff-Brücken-Bindungen) und die Br₂-Br₂-Wechselwirkungen (v.d.W-Wechselwirkungen). Statt sich also im H₂O auf molekularer Ebene zu verteilen und Br₂-H₂O-Wechselwirkungen einzugehen, ist der Zustand des Zusammenbleibens der Br₂-Moleküle (Br₂-Br₂-Wechselwirkungen) bzw. der H₂O-Moleküle energetisch günstiger. Es bilden sich 2 Phasen: Brom-Phase und wässrige Phase (incl. kleinem Br₂-Anteil).

2.8



2.10

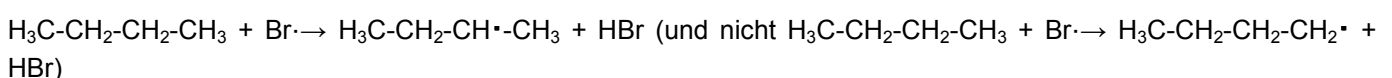
- a) *n*-Octan b) 3-Ethyl-4-methylhexan (auch 4-Ethyl-3-methylhexanals richtig akzeptiert) c) 2,4,4-Trimethylhexan d) 2,2-Dimethylbutan

2.11

a)	CH ₄	+ 2 Cl ₂	→ CH ₂ Cl ₂	+ 2 HCl
Masse m	189 g	1670 g	1000 g	
Molare Masse M	16,04246 g/mol	70,906 g/mol	84,93258 g/mol	
Stoffmenge n	11,77404 mol	23,548090 mol	11,77404 mol	
b)	Reaktionskette Cl· + CH ₄ → HCl + CH ₃ ·			
Radikalbildung	CH ₃ · + Cl ₂ → CH ₃ Cl + Cl·			
Cl ₂ → 2 Cl·	CH ₃ Cl + Cl· → CH ₂ Cl· + HCl			
	CH ₂ Cl· + Cl ₂ → CH ₂ Cl ₂ + Cl·			
	Kettenabbruch: Reaktion zweier Radikale untereinander, z.B.:			
	CH ₃ · + CH ₂ Cl· → H ₃ C-CH ₂ Cl			
	Konkurrenzreaktion: z.B. Dreifachsubstitution			

2.12

n-Butan bildet beim Angriff eines Br-Radikals seine radikalische Ladung bevorzugt am zweiten C-Atom aus (und nicht am ersten C-Atom):



Hintergrund ist, dass ein solches Radikal durch die positiven induktiven Effekte (d.h. elektronenschiebende Effekte) der beiden anhängenden Alkylreste stabilisiert wird. Somit erfordert seine Bildung eine geringere Aktivierungsenergie. Bei der Bildung eines Radikals am terminalen C-Atom fällt der stabilisierende Effekt geringer aus, weil hier nur 1 Alkylgruppe anhängt.

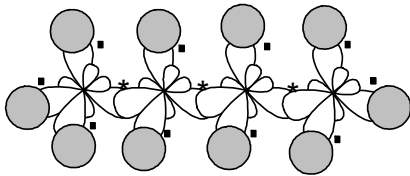
2.13

a) Für die Richtwerte kann man bedenken, dass z.B. n-Pentan bei Raumtemperatur gerade noch flüssig ist. D.h. der Siedepunkt muss knapp über Raumtemperatur liegen. Mit steigender Kettenlänge nimmt die Molekülgröße und damit die Berührungsfläche zwischen den Molekülen zu. So bilden mit steigender Kettenlänge die Moleküle leichter spontane Dipole aus. Auch lassen sich leichter Dipole induzieren, wenn das Nachbarmolekül schon als Dipol vorliegt. Insgesamt nehmen die zwischenmolekularen Anziehungskräfte (hier: van-der-Waals-Kräfte) und der Zusammenhalt zwischen den Molekülen zu. Es wird mehr Energie benötigt, um die Moleküle voneinander zu trennen und aus dem gegenseitigen Anziehungsbereich zu entfernen. Die Überführung in die Gasphase durch Sieden erfolgt also bei höherer Temperatur. Die Kurve flacht ab, da der relative Unterschied zwischen den v.d.W.-Kräften immer geringer ausfällt. So sind die Unterschiede in Molekülgrößen, von v.d.W.-Kräften und von den Siedepunkten zwischen dem C₁-Alkan (Methan) und C₂-Alkan (Ethan) noch sehr groß, zwischen C₂₀ und C₂₁-Alkan aber z.B. nur noch gering.

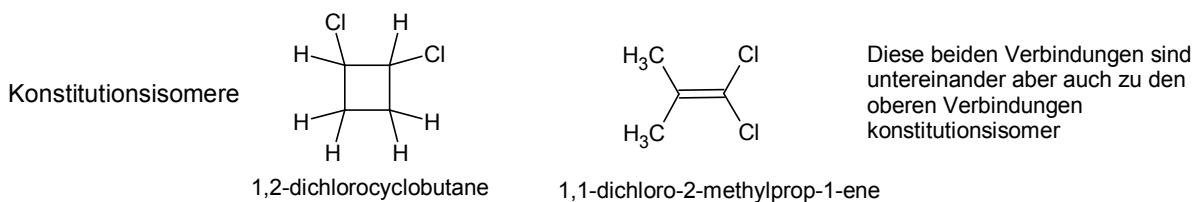
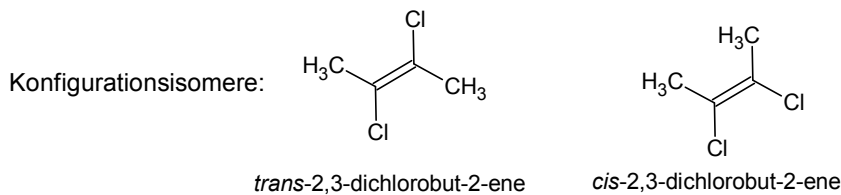
b) Dreisatz => 100 mL sind 0,00446 mol => $M(X) = \frac{m(X)}{n(X)} = \frac{0,197g}{0,00446mol} \approx 44,1 \frac{g}{mol}$ ($\hat{=} C_3H_8$)

c) 2s-AO und 2p-AOs vermischen sich energetisch und räumlich. Aus 4 AOs entstehen 4 Hybridorbitale, die tetraedrisch orientiert sind. Durch die Hybridisierung entstehen räumlich stärker ausgerichtete Orbitallappen, die zu höheren Überlappungsbereichen führen (stärkere Bindungen) (Bgr. war in Klausur nicht verlangt!)

*: σ -Bindungen durch Überlappung von sp³-Hybridorbitalen von C-Atomen; ■: σ -Bindung durch Überlappung von 1s-Atomorbitalen der H-Atome mit sp³-Hybridorbitalen der C-Atome.



Nr. 3.1.



3.2.

Radikale: Moleküle oder Atome mit unpaaren Elektronen. Diese Teilchen sind dann meist sehr reaktiv, d.h. sie suchen einen Reaktionspartner um ihr Elektronendefizit wieder auszugleichen. Beispiel: Chlorradikale (siehe oben: Aufgabe zur radikalische Substitution).

homolytische Bindungsspaltung: Eine Elektronenpaarbindung wird so gespalten, dass beide Bindungspartner ein Elektron bekommen. So entstehen Radikale. z.B. Br-Br → 2 Br·

heterolytische Bindungsspaltung: Eine Elektronenpaarbindung wird so gelöst, dass ein Bindungspartner beide Bindungselektronen erhält. Dies ist meist dann der Fall, wenn ein Bindungspartner elektronegativer als der andere ist, so dass er die Bindungselektronen stärker zu sich zieht. Bsp: H-Cl → H⁺ + Cl⁻. Durch die heterolytische Bindungsspaltung entstehen in der Regel Ionen.

Konfiguration: Räumlicher Bau eines Moleküls ohne Berücksichtigung der verschiedenen räumlichen Anordnungen, die nur durch Rotation um Einfachbindungen zustande kommen. Moleküle mit gleicher Konstitution aber unterschiedlicher Konfiguration werden *Konfigurationsisomere* genannt. Zur gegenseitigen Umwandlung von

Konfigurationsisomeren müssen Elektronenpaarbindungen getrennt und neu gebildet werden, weswegen die zwischen ihnen existierende Energiebarriere ziemlich groß ist. Konfigurationsisomere sind daher isolierbar. Typisches Beispiel für Konfigurationsisomere sind cis/trans-Isomere (Z/E-Isomere).

Konformation: Räumliche Anordnung von Atomen oder Atomgruppen eines Moleküls die durch Rotation um Einfachbindungen entstehen und sich nicht zur Deckung bringen lassen. Von einem Molekül existieren unendlich viele Konformationen, die nur um einen beliebig kleinen Bruchteil um eine Einfachbindung verdreht vorliegen. Entsprechen einzelne Konformationen einem Energieminimum (z.B. gestaffelte Konformation) oder einem Energiemaximum (z.B. ekliptische Konformation) so redet man von *Konformationsisomeren (Konformeren)*. Die Energiebarriere zwischen verschiedenen Konformationsisomeren in der Regel so klein, dass eine Isolierung voneinander nicht möglich ist. Typisches Beispiel sind die Sesselform und die Wannenform bei Cyclohexan.

Konstitution: Bezeichnung für die unverwechselbare und für jede Verbindung charakteristische Verknüpfung der Atome bzw. Atomgruppen im Molekül, ohne dass räumliche Bauunterschiede berücksichtigt werden. Moleküle mit derselben Summenformel aber unterschiedlicher Konstitution werden als *Konstitutionsisomere* bzw. als *Strukturisomere* bezeichnet.

Derivate: Abkömmlinge einer chemischen Verbindung, die sich in ihrer Konstitution nur relativ geringfügig von der Stammverbindung unterscheiden (z.B. Einbau von Fremdatomen etc.). Beispiel: 2-Bromhexan ist ein *Derivat* des *n*-Hexans. Derivate entstehen durch chemische Modifizierung, d.h. chemischen Reaktionen, aus der Stammverbindung.

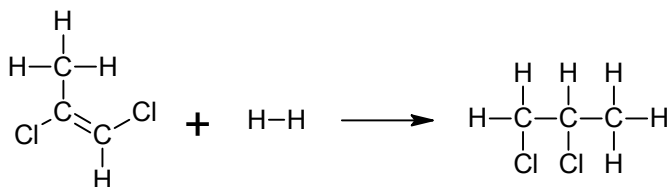
allgemeine Summenformel: Für eine Substanzklasse allgemeingültige Summenformel. z.B. C_nH_{2n} für Cycloalkane (n: natürliche Zahl: n = 1,2,3 ...)

homologe Reihe: Gruppen von chemisch verwandten, das heißt sich nur durch ein Kettenglied unterscheidende Verbindungen, für die man eine *allgemeine Summenformel* angeben kann. So bilden gesättigte Kohlenwasserstoffe eine homologe Reihe, deren Reihenglieder (z.B. C_3H_8 , C_4H_{10} , C_5H_{12}) sich jeweils nur durch eine CH_2 -Gruppe unterscheiden. Die allgemeine Summenformel lautet in dem Fall: C_nH_{2n+2}

van-der-Waals-Kräfte: siehe Schulbuch Chemie (elemente 2 o.ä.)

3.3.

a)



b) 1.: Zuerst rechnen wir die Stoffmenge an 1,2-Dichlorpropen aus. 2.: Mit dem Koeffizientenverhältnis 1:1 kommt man darauf, dass die gleiche Stoffmenge an 1,2-Dichlorpropan entsteht. 3.: Am Schluss wird diese Stoffmenge in die Masse umgerechnet und auf eine vernünftige Zahl an Nachkommastellen gerundet.

$$\text{Zu 1: } n(\text{Dichlorpropen}) = \frac{m(\text{Dichlorpropen})}{M(\text{Dichlorpropen})} = \frac{29,96\text{g}}{110,9699 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \approx 0,269983\text{mol}$$

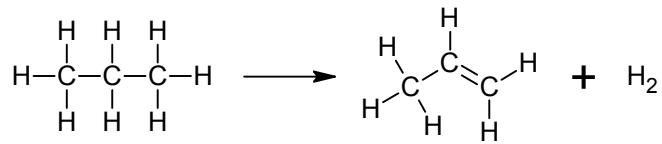
Zu 2: Aus dem 1:1-Koeffizientenverhältnis der Reaktionsgleichung folgt: $n(1,2\text{-Dichlorpropen}) = n(1,2\text{-Dichlorpropan})$. Für jedes eingesetzte Dichlorpropen-Molekül entsteht genau ein Dichlorpropan-Molekül. Wenn 0,269983 mol 1,2-Dichlorpropen eingesetzt wurden, entstehen $n(1,2\text{-Dichlorpropan}) = 0,269983$ mol.

Zu 3: Umrechnung in eine Masse:

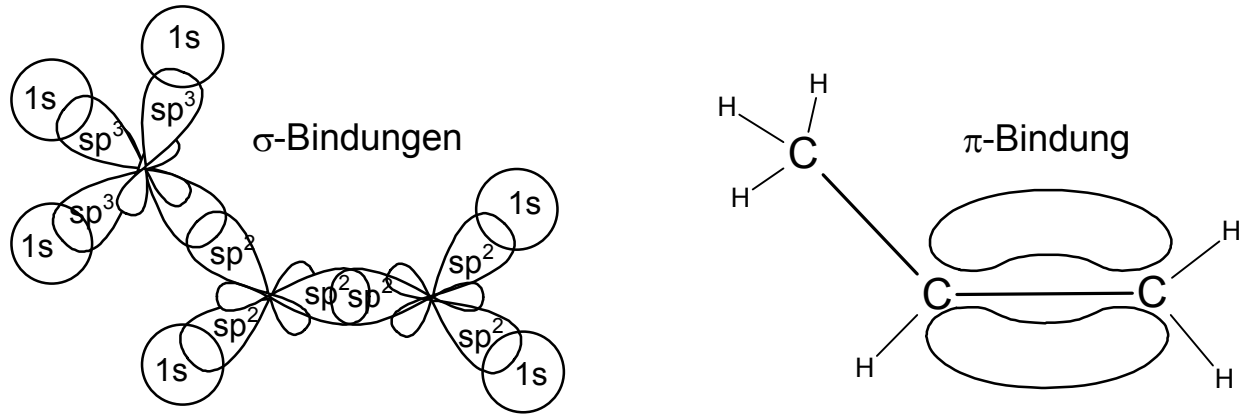
$$m(\text{Dichlorpropan}) = n(\text{Dichlorpropan}) \cdot M(\text{Dichlorpropan}) = 0,269983\text{mol} \cdot 112,9857 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \approx 30,5\text{g}$$

3.4.

a) Es handelt sich um eine Eliminierung ausgehend von Propan.



b)



c)

Reaktionsgleichung: $2 \text{C}_3\text{H}_6 + 9 \text{O}_2 \rightarrow 6 \text{CO}_2 + 6 \text{H}_2\text{O}$

$$n(\text{CO}_2) = \frac{10 \text{ g}}{44,01 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,22722 \text{ mol}$$

Wegen dem 1:6-Verhältnis muss drei mal weniger Propan eingesetzt werden. $\Rightarrow n(\text{C}_3\text{H}_6) = 0,22722 \text{ mol} : 3 = 0,07574 \text{ mol}$

Umrechnung in die Masse: $m(\text{C}_3\text{H}_6) = n(\text{C}_3\text{H}_6) \cdot M(\text{C}_3\text{H}_6) = 0,07574 \text{ mol} \cdot 42,07 \text{ g/mol} \approx 3,2 \text{ g}$