

## S<sub>N</sub>1 oder S<sub>N</sub>2? – Fachsprachentraining und szenisches Lernen

Dr. habil. Harald Kosegarten, Linden

**Niveau:** Sek. II

**Dauer:** 1–5 Doppelstunden

### Bezug zu den KMK-Bildungsstandards

Fachwissen: Mechanismus der nukleophilen Substitution, Unterschied zwischen S<sub>N</sub>1 und S<sub>N</sub>2, Reaktionsbedingungen, Enantiomere (Struktur und Wirkung)

Erkenntnisgewinnung: Anwenden von Fachsprache und Modellen zur Erklärung des Mechanismus der nukleophilen Substitution, szenisches Lernen durch Körperbewegung, Sprechen und Hören zur Visualisierung und Veranschaulichung von abstrakten chemischen Mechanismen, Problemlösung von abiturrelevanten Aufgaben

Kommunikation: eigenständige Gestaltung und Vorführung von Rollenspielen, fachlich korrektes und folgerichtiges Argumentieren, Vertreten eigener Standpunkte zu chemischen Sachverhalten und selbstkritische Reflexion von Einwänden, Vertreten von Standpunkten gegenüber der Lehrkraft und den Mitschülerinnen und Mitschülern

Bewertung: Diskutieren und Bewerten der Brauchbarkeit von Fachsprachentraining und Rollenspiel zum Erlernen chemischer Mechanismen

### Der Beitrag enthält Materialien für

- ✓ offene Unterrichtsformen
- ✓ Schülerpräsentation und Diskussion
- ✓ Lernen an Modellen
- ✓ Rollenspiele

II/C

### Hinweise zur Didaktik und Methodik

Die **nukleophile Substitution (S<sub>N</sub>)** ist obligatorischer Bestandteil der Lehrpläne im Leistungskurs der Jahrgangsstufe 12 für das landesweite Zentralabitur in Hessen.

In der Regel ist für die Lernenden diese Reaktion auf der Ebene der Reaktionsgleichung schnell nachvollziehbar. Man steigt in dieses Thema daher am besten mit einem Schülerversuch (Heinrichs und Höner, 2012) oder einem Videoclip (Keusch, 2003) ein. Eine Reaktionsgleichung aufzustellen und zu erkennen, dass eine nukleophile Abgangsgruppe im Edukt durch ein anderes nukleophiles Teilchen ersetzt wurde, gelingt nämlich meistens problemlos. Die nukleophile Substitution wird am besten im Rahmen der Herstellung von Alkoholen aus Halogenalkanen im Unterricht thematisiert, beispielsweise als alternative Möglichkeit zur alkoholischen Gärung, die man ebenfalls in Schülerversuchen vorher behandelt hat. Mit dem Fachbegriff *nukleophile Substitution* können die Lernenden häufig etwas verbinden, denn es existieren Vorkenntnisse, da Fachbegriffe wie *Substitution*, *elektrophil* und *nukleophil* in der Regel bereits definiert und zum Teil angewendet wurden.

Schwieriger wird es immer, wenn Lernende eine Reaktion auf der mechanistischen Ebene nachvollziehen und erklären sollen. Bei der nukleophilen Substitution sind die Schwierigkeiten besonders augenscheinlich, da in Abhängigkeit von Molekülstruktur und Reaktionsbedingungen der **Mechanismus auf zwei verschiedenen Wegen** – über ein **Carbenium-Ion (S<sub>N</sub>1)** oder über die **Ausbildung eines Übergangszustandes (S<sub>N</sub>2)** – zwischen Halogenalkan und nukleophilem Teilchen erfolgt (**M 1a**). Daher ist besonders hier die Verwendung und das **Einüben von Fachbegriffen (M 1a–d)** zur Erklärung und Beschreibung komplexer chemischer Zusammenhänge sehr wichtig (**Fachsprachentraining**). Ohne ein Angebot fachlicher Begriffe fällt

**Materialübersicht**

⌚ V = Vorbereitungszeit    SV = Schülerversuch    AB = Arbeitsblatt mit Aufgaben  
 ⌚ D = Durchführungszeit    LV = Lehrerversuch    FO = Folie    FoVo = Folienvorlage

<b>M 1a</b>	<b>Ab</b>	<b>Nukleophile Substitution (S<sub>N</sub>) – zwei Reaktionswege</b>
	⌚ V: 5 min	
	⌚ D: 85 min	
<b>M 1b</b>	<b>Ab/FoVo</b>	<b>Strukturformeln – Vorlage zum Ausschneiden</b>
<b>M 1c</b>	<b>Ab</b>	<b>Formulierungshilfen</b>
<b>M 1d</b>	<b>Info</b>	<b>Glossar</b>
<b>M 2a</b>	<b>Info</b>	<b>Die Walden-Umkehr bei S<sub>N</sub>-Reaktionen</b>
<b>M 2b</b>	<b>Info</b>	<b>Exkurs: Wussten Sie schon? Chirale Moleküle: kleine Unterschiede, große Wirkung</b>
<b>M 2c</b>	<b>Ab</b>	<b>Wir bauen, zeichnen und benennen räumliche Isomere</b>
	⌚ V: 5 min	<input type="checkbox"/> Modellbaukästen
	⌚ D: 85 min	
<b>M 3a</b>	<b>Info</b>	<b>Lenkung der beiden Reaktionswege</b>
<b>M 3b</b>	<b>Ab</b>	<b>„Ich bin das Carbenium-Ion, und du?“ – Nukleophile Substitution im darstellenden Spiel</b>
<b>M 3c</b>	<b>Fo</b>	<b>Szenen aus dem Klassenzimmer</b>
	⌚ V: 15-45 min	<input type="checkbox"/> stabiler Karton <input type="checkbox"/> Stifte, Schere
	⌚ D: 30-135 min	<input type="checkbox"/> verschiedene Schülermaterialien <input type="checkbox"/> Requisiten
<b>M 4a</b>	<b>Ab</b>	<b>Übungen zur Vorbereitung auf das Zentralabitur</b>
	⌚ V: 5 min	<input type="checkbox"/> Modellbaukästen
	⌚ D: 85 min	
<b>M 4b</b>	<b>Info</b>	<b>Infos zur nukleophilen Stärke: Basizität und Polarisierbarkeit der nukleophilen Teilchen</b>

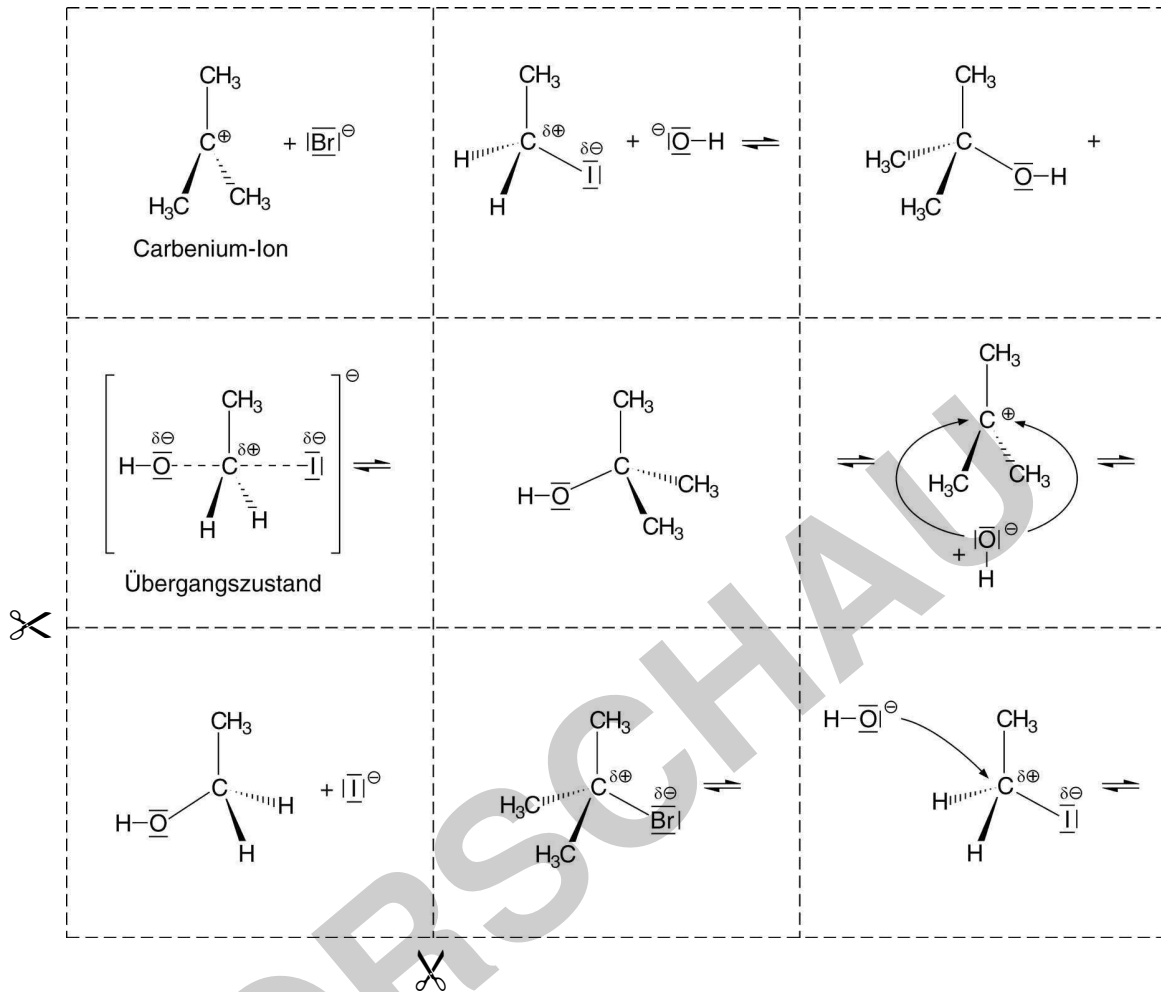
Die Erläuterungen und Lösungen finden Sie ab Seite 20.

II/C



## M 1b Strukturformeln – Vorlage zum Ausschneiden

II/C



VORSCHAU

## M 1c Formulierungshilfen

S <sub>N</sub> 1: 1. Schritt		
<b>Fachbegriffe</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 2-Brom-2-methylpropan</li> <li>• Elektronegativität</li> <li>• Bindung</li> <li>• positive Teilladung/negative Teilladung</li> <li>• Bromatom</li> <li>• heterolytische Spaltung</li> <li>• Bromid-Anion</li> <li>• Carbenium-Ion</li> <li>• stabil</li> <li>• sp<sup>3</sup>- und sp<sup>2</sup>-Hybridisierung des C-Atoms</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• drei Bindungspartner</li> <li>• sp<sup>3</sup>-Hybridorbitale der Methylgruppen</li> <li>• leeres p-Orbital des positiv geladenen sp<sup>2</sup>-hybridisierten, tertiären C-Atoms</li> <li>• Delokalisierung von σ-Elektronen</li> <li>• tertiäres C-Atom</li> <li>• Zwischenprodukt</li> <li>• ohne Beteiligung des Nukleophils</li> </ul>
<b>Verben</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• sich bilden</li> <li>• spalten</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• polarisieren</li> <li>• stabilisieren</li> </ul>
<b>Eigenschaft der Moleküle (Zwischenstadien)</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• stabiles tertiäres Carbenium-Ion</li> </ul>	
S <sub>N</sub> 1: 2. Schritt		
<b>Fachbegriffe</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• negativ geladenes Hydroxid-Anion</li> <li>• Carbenium-Ion</li> <li>• positiv geladen</li> <li>• planare Struktur</li> <li>• nukleophil</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• nukleophiler Angriff</li> <li>• zwei Seiten</li> <li>• Alkohol</li> <li>• Halogenalkan</li> </ul>
<b>Verben</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• angreifen</li> <li>• anlagern</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• sich bilden</li> </ul>
<b>Eigenschaft der Moleküle (Zwischenstadien)</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• planares Carbenium-Ion</li> </ul>	
S <sub>N</sub> 2: 1. Schritt		
<b>Fachbegriffe</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Iodethan</li> <li>• negativ geladenes Hydroxid-Anion</li> <li>• positive Teilladung/negative Teilladung</li> <li>• Elektronegativität</li> <li>• Iodatom</li> <li>• kein stabiles Carbenium-Ion</li> <li>• primäres C-Atom</li> <li>• gestrichelte Linien</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• nukleophiler Angriff an der entgegengesetzten Seite zur Abgangsgruppe</li> <li>• Elektronen in Richtung Iodatom „drücken“</li> <li>• Übergangszustand</li> <li>• sp<sup>2</sup>-hybridisiertes C-Atom im Übergangszustand</li> <li>• keine echten Bindungen im Übergangszustand</li> </ul>
<b>Verben</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• angreifen</li> <li>• (aus-)bilden</li> <li>• polarisieren</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• lockern</li> <li>• stabilisieren</li> </ul>
<b>Eigenschaft der Moleküle (Zwischenstadien)</b>	Übergangszustand (ohne echte Bindung zum Nukleophil und mit gelockerter Bindung zur Abgangsgruppe)	
S <sub>N</sub> 2: 2. Schritt		
<b>Fachbegriffe</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Neubildung einer Atombindung</li> <li>• Hydroxid-Anion</li> <li>• Lösen der Abgangsgruppe</li> <li>• negativ geladenes Iodid-Anion</li> <li>• planares, sp<sup>2</sup>-hybridisiertes C-Atom</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• tetraedrischer sp<sup>3</sup>-Zustand</li> <li>• Alkohol</li> <li>• Halogenalkan</li> </ul>
<b>Verben</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• lösen</li> <li>• bilden</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• abspalten</li> </ul>
<b>Eigenschaft der Moleküle (Zwischenstadien)</b>	umgeklapptes Molekül (umgeklappt wie ein Regenschirm, in den von der Seite an einem stürmischen Tag Wind hineinbläst)	

II/C

## M 3b „Ich bin das Carbenium-Ion, und du?“ – Nukleophile Substitution im darstellenden Spiel

### Spielauftrag

Schlüpfen Sie in die Rolle der einzelnen Teilchen, die die verschiedenen Zwischenstadien der nukleophilen Substitution durchlaufen und in Abhängigkeit der Reaktionsbedingungen unterschiedliche Reaktionswege einschlagen. Binden Sie Ihre Darstellung des Mechanismus in eine Alltagsgeschichte ein!

Wählen Sie aus **M 4a** ein Aufgabenbeispiel aus. Machen Sie sich immer zunächst Gedanken darüber, ob die Reaktion nach S<sub>N</sub>1 oder S<sub>N</sub>2 erfolgt.

II/C



### So geht's

- Wählen Sie einen **Regisseur** und **zwei bis drei Assistenten**, die den Regisseur als Beobachter und Berater unterstützen. Der Regisseur leitet und überwacht alle Vorbereitungen für das darstellende Spiel.
  - Unter seiner Anleitung teilen Sie sich untereinander die verschiedenen Rollen zu. Unter seiner Regie wird auch der Handlungsrahmen des „Theaterstücks“ konzipiert.
  - Setzen Sie sich mit Ihrer Rolle auseinander und üben Sie Ihren Handlungsablauf ein.
- Während dieser Vorbereitungsphase sollten Sie sich auch mit den anderen Rollen auseinandersetzen.
  - Wählen Sie einen **Erzähler** und entwickeln Sie eine Alltagsgeschichte zu Ihrem „Theaterstück“. Da Ihre Vorführung lebendig sein soll, überlegen Sie sich, ob auch einzelne Teilchenstrukturen reden und Dialoge entwickelt werden sollen.
  - Wählen Sie außerdem einen kompetenten **Chemiker**, der mithilfe der Fachsprache die einzelnen Szenen, die den Reaktionsweg und die einzelnen Schritte des Mechanismus wiedergeben, kommentiert.
  - Zur Hervorhebung bedeutsamer Stellen im Mechanismus können Sie auch verschiedene theatrale Mittel (z. B. beschriftete Pappkartons, Papierketten, Hüte etc.) einsetzen.
  - Ordnen Sie zur Nachreflexion den einzelnen Szenen entsprechende konkrete chemische Zwischenschritte des Mechanismus unter Verwendung von Fachbegriffen zu. Sie können auch das gesamte Spiel als Video aufnehmen und setzen die einzelnen Szenen dann als Medium zur Reflektion ein. Vergleichen Sie die beiden Lernmethoden – szenisches Lernen und Fachsprachentraining – in Hinsicht auf ihre Brauchbarkeit für den Lernprozess.

## M 4a Übungen zur Vorbereitung auf das Zentralabitur

Halogenalkane stellen eine ganz zentrale Stoffklasse in der organischen Synthesechemie dar. Nicht nur Alkohole und neue Halogenalkane, sondern beispielsweise auch Ether und Ester können durch nukleophile Substitution aus Halogenalkanen hergestellt werden.

### Aufgaben

- I) Erstellen Sie die jeweilige Reaktionsgleichung sowie den Reaktionsmechanismus mithilfe von Strukturformeln. Begründen Sie den eingeschlagenen Weg ausführlich mithilfe der **Molekülstruktur** und **aller in den Übungsbeispielen gegebenen Reaktionsbedingungen**.
- II) Skizzieren Sie von allen Edukten und Produkten die tetraedrische Anordnung der Nachbargruppen am zentralen C-Atom, an dem die Substitution stattfindet. Veranschaulichen Sie dabei die Gruppen, die **vor**, in oder **hinter** der Papierebene liegen (**Keilstriche**, **ausgezogene Linien**, **GESTRICHELTE LINIEN**). Benennen Sie das Produkt (die Produkte) mithilfe der Nomenklaturregeln.
- III) Präsentieren Sie die Lösungen und diskutieren Sie die Lösungswege in Ihrer Lerngruppe.

### Beispiele zum Üben

- 3-Brom-2,2,4,4-tetramethylpentan reagiert mit Natronlauge.
- (S)-2-Brombutan wird in Gegenwart von konzentrierter Lithiumfluoridlösung und Propanon (Aceton) als Lösungsmittel zur Reaktion gebracht.
- 1-Iodpropan reagiert mit Kaliumbromid (Methanol als Lösungsmittel).
- (R)-3-Iod-3-methylhexan wird mit Kaliumchlorid in geringer Konzentration in Gegenwart von Ethanol als Lösungsmittel umgesetzt.
- 2-Methylpropan-2-ol wird mit Salzsäure umgesetzt.
- Brompentan wird mit Natriumethanolat umgesetzt. Lösungsmittel ist Propanon (Aceton).
- (R)-2-Brompropansäure wird mit konzentrierter Kalilauge umgesetzt.
- (S)-2-Iodbutan wird in Gegenwart von Wasser zur Reaktion gebracht.
- Natriumacetat reagiert mit 1-Chloroctan.
- Es soll gezielt (R)-3-Hexanol aus einem Halogenalkan synthetisiert werden. Wählen Sie möglichst optimale Bedingungen für den erforderlichen Reaktionsmechanismus. Lösungsmittel ist Methanol.



**Tipps** Bauen Sie mithilfe des Molekülbaukastens Tetraeder-Modelle und verschaffen Sie sich eine Übersicht über die räumliche Anordnung aller Gruppen am reaktiven C-Atom.

Nutzen Sie den Info-Text **M 4b**.



Die exemplarische Reihung der Stärke der nukleophilen Teilchen und der Abgangsgruppen von stark nach schwach erfolgt von links nach rechts:

**Nukleophil:**  $\text{R-O}^- > \text{H-O}^- > \text{RCOO}^- > \text{H}_2\text{O}$

$\text{I}^- > \text{Br}^- > \text{Cl}^- \gg \text{F}^-$  (in protischen Lösungsmitteln)

$\text{I}^- < \text{Br}^- < \text{Cl}^- \ll \text{F}^-$  (in aprotischen Lösungsmitteln)

**Abgangsgruppe:**  $\text{I}^- > \text{Br}^- > \text{Cl}^- \gg \text{F}^-$

## Erläuterungen und Lösungen

### Erläuterung (M 1)

Kopieren Sie M 1b auf Folie. Schneiden Sie die einzelnen Teile dann aus und halten Sie diese für die Präsentation am Overhead-Projektor für die Schülerinnen und Schüler bereit. Die Lösung von M 1 entspricht den beiden in M 2a skizzierten Reaktionsbeispielen. Bei der S<sub>N</sub>1-Reaktion kann OH<sup>-</sup> von beiden Seiten angreifen. Es handelt sich in diesem Fall bei den beiden Produkten um das gleiche Molekül, da das C-Atom nicht asymmetrisch ist. Im Falle eines asymmetrischen C-Atoms würden die beiden unterschiedlichen Enantiomere entstehen.

### Lösungen (M 1)

Zu 2.: (zur Lösung des Puzzles siehe Material M 2a)

Zu 3.: Entscheidender Unterschied ist, dass der S<sub>N</sub>1-Weg über ein Carbenium-Ion erfolgt (da die Abgangsgruppe sich an einem tertiären C-Atom befindet). Beim S<sub>N</sub>2 Weg bildet sich bei Vorliegen eines primären C-Atoms zur Abgangsgruppe in der Ausgangsverbindung ein Übergangszustand aus. Ein primäres Carbenium-Ion bildet sich nicht aus.

Zu 6./7.: **S<sub>N</sub>1:**

#### Schritt 1: Bildung eines stabilen, tertiären Carbenium-Ions ohne Beteiligung eines Nucleophils

Die Bindung zwischen dem Bromatom und dem C-Atom im Edukt 2-Brom-2-Methylpropan ist wegen der hohen Elektronegativität des Bromatoms polarisiert (positive Teilladung am C-Atom und negative Teilladung am Bromatom). Durch heterolytische Spaltung bildet sich ein Bromid-Anion und ein positiv geladenes Carbenium-Ion. Dabei erfolgt ein Wechsel von sp<sup>3</sup>- auf sp<sup>2</sup>-Hybridisierung des C-Atoms (3 Bindungspartner beim Carbenium-Ion). Da es sich um ein tertiäres C-Atom handelt, ist das Carbenium-Ion stabilisiert. Es findet eine Delokalisierung von σ-Elektronen zwischen den sp<sup>3</sup>-Hybridorbitalen der Methylgruppen und dem leeren p-Orbital des positiv geladenen sp<sup>2</sup>-hybridisierten, tertiären C-Atoms statt. Das tertiäre Carbenium-Ion kann sich daher als Zwischenprodukt ohne Beteiligung eines Nucleophils ausbilden.

#### Schritt 2: Nucleophiler Angriff am Carbenium-Ion: Bildung der Produkte

Aufgrund der planaren Struktur des Carbenium-Ions kann das negativ geladene Hydroxid-Anion nucleophil von zwei Seiten angreifen. Das nucleophile OH<sup>-</sup>-Anion lagert sich an das positiv geladene Carbenium-Ion an. Es bildet sich aus dem Halogenalkan ein Alkohol.

**S<sub>N</sub>2:**

#### Schritt 1: Bildung eines Übergangszustandes durch nucleophilen Angriff

Die Bindung zwischen dem Iodatome und dem C-Atom im Iodethan ist wegen der hohen Elektronegativität des Iodatoms polarisiert (positive Teilladung am C-Atom und negative Teilladung am Iodatome). Ein Carbenium-Ion kann sich nicht bilden, da sich ein Carbenium-Ion mit einem primären C-Atom nicht stabilisieren kann. Das negativ geladene Hydroxid-Anion greift daher nucleophil am C-Atom an der entgegengesetzten Seite zur Abgangsgruppe an. Dabei werden die Elektronen in Richtung Iodatome „gedrückt“, sodass die positive Teilladung am C-Atom und die negative Teilladung am Iodatome noch stärker werden. Es bildet sich auf diese Weise ein Übergangszustand aus: die Bindung zwischen der Abgangsgruppe (Iodatome) und dem C-Atom hat sich gelockert, aber es hat sich auch noch keine echte Bindung zum Nucleophil ausgebildet (gestrichelte Linien). Das C-Atom ist in diesem Zustand wieder sp<sup>2</sup>-hybridisiert.

II/C

