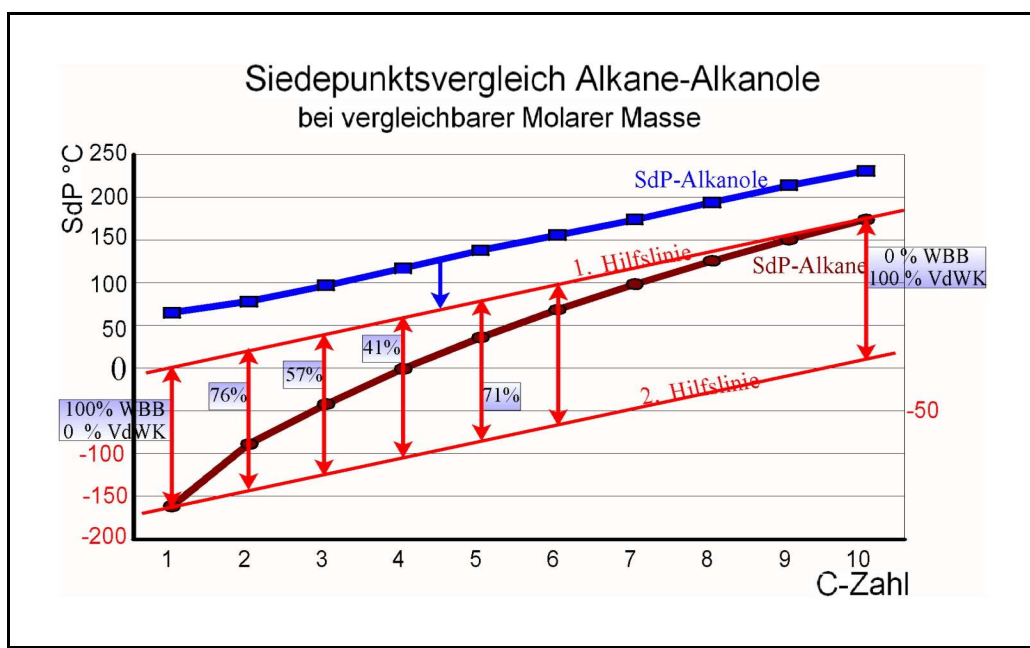


Verfahren zur Abschätzung des Verhältnisses von Wasserstoffbrückenbindungen zu Van-der-Waals-Kräften bei geradkettigen Alkoholen

Bei Alkoholen stellt sich die Frage, ob - in Abhängigkeit von der Kettenlänge - mehr die **Wasserstoffbrückenbindung** oder die **Van-der-Waals-Kräfte** als Sekundärbindungskräfte den Siedepunkt beeinflussen. Grundsätzlich gesehen wirken beide Kräfte zusammen, welche Kraft hat jedoch bei welchem Alkohol den größeren Anteil? Und: warum nimmt die Wasserlöslichkeit von Propanol zu Butanol so rapide ab? Aus Gründen der Datensicherheit werden nur Alkane und Alkanole von C₁-C₁₀ verglichen.

Zur Lösung dieser Frage werden die **Siedepunkte der n-Alkane und n-Alkanole** zunächst graphisch dargestellt. Dabei wird deutlich, dass die Siedepunktskurve der **Alkanole** fast linear verläuft, mit einem kleinen „Knick“ bei Ethanol. Die Siedepunktskurve der **Alkane** verläuft wesentlich tiefer, stetig steigend, wobei die Steigung selbst mit wachsender Anzahl der C-Atome abnimmt.



Im nächsten Schritt wird die fast lineare Siedepunktsskurve der **Alkanole** um einen Faktor X verringert, so dass die Kurve („Gerade“) in ihrem Endpunkt die Siedepunktssreihe der **Alkane** berührt (1. Hilfslinie). Da die C_n-Alkanole vergleichbare molekulare Massen haben wie die C_{n+1}-Alkane, kann der Faktor **Molekülmasse** bei diesem Vergleich eliminiert werden: der Abstand der beiden „Geraden“ (SdP-Alkanole und 1. Hilfslinien) in Richtung der Siedepunktssgeraden voneinander entspricht dem Einfluss der molaren Masse auf den Siedepunkt.

Eine **Parallele zur 1. Hilfslinie** (2. Hilfslinie), beginnend am Siedepunkt von Methan, ergibt den Raum, den sich Wasserstoffbrückenbindungen und Van-der-Waals-Kräfte teilen. Geht man nämlich von der **Annahme** aus, dass im **Methan 100% Van-der-Waals-Kräfte** existieren und umgekehrt im **Methanol 100% Wasserstoffbrückenbindungen** und keine Van-der-Waals-Kräfte, bzw. im C₁₀-Alkan ebenso wie im C₁₀-Alkanol nur 100% Van-der-Waals-Kräfte, kann man die Strecke zwischen Methan/Methanol und Decan/Decanol nach dem Strahlensatz bzw. Verhältnisrechnung prozentual aufteilen und den einzelnen Alkanen bzw. Alkanolen prozentuale Anteile an den beiden Sekundärbindungskräften zuteilen.

Danach ergibt sich folgende **Verteilung von Wasserstoffbrückenbindungen zu Van-der-Waals-Kräften** in den einzelnen Alkanolen (s. Tabelle).

Alkanol	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	C ₅	C ₆	C ₇	C ₈	C ₉	C ₁₀
WBB	100	76	57	41	29	22	15	10	5	0
VdWK	0	24	43	59	71	78	85	90	95	0
WL	∞	∞	∞	7,9	2,3	0,6	0,2	0,05	n.b.	n.b.

Legende: WL = Wasserlöslichkeit [g/100 g Wasser]; n.b.= nicht bekannt

Gut mit dieser Reihe korrespondiert die **Wasserlöslichkeit** der einzelnen Alkanole, die erst ab Butanol

drastisch zurückgeht, weil hier nun mit **59%** die Van-der-Waals-Kräfte deutlich stärker sind, während in Propanol noch die Wasserstoffbrückenbindungen mit **57%** überwiegen.

Gleichzeitig macht dieser Vergleich deutlich, warum gerade **1-Propanol** und **Ethanol** so gute Lösungsmittel sowohl für hydrophile wie hydrophobe Stoffe sind: die hydrophile Wirkung übertrifft die lipophile Wirkung, diese ist aber noch groß genug ist, um ähnliche Stoffe zu lösen. Obwohl der WBB-Anteil bei Butanol noch recht hoch ist, reicht es doch nicht mehr, um eine unendliche Löslichkeit zu erzielen.

Grundsätzlich **wirken beim Siedepunkt beide Sekundärbindungskräfte zusammen**, interessant ist aber doch, welche von beiden welchen Anteil hat bei einem bestimmten Alkanol besitzt. Dieses Verfahren macht eine quantitative Aufteilung verständlich und gibt eine Erklärung für die überraschende Änderung der Wasserlöslichkeit vom 1-Propanol zum 1-Butanol.