

# Reaktionsmechanismen

## Kap 6

# Rep. Kemiska reaktioner

<https://laughingsquid.com/a-ted-ed-animation-explaining-how-all-sorts-of-different-chemical-reactions-are-triggered/>

”Karbokatjoner är elektrofila intermediärer”

# Centralt innehåll Ke2

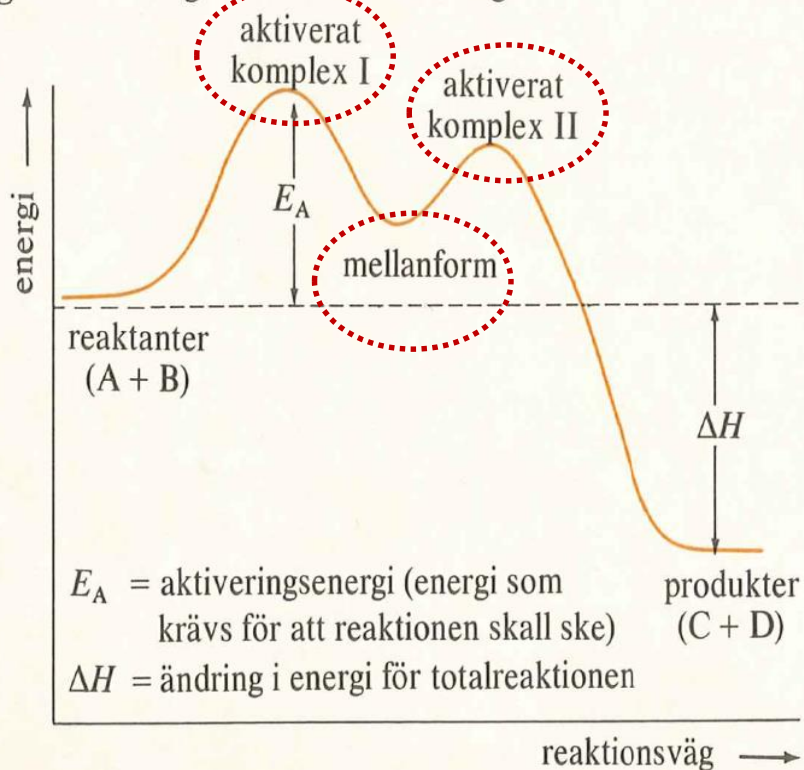
- Kvalitativa resonemang *hur och varför* kemiska reaktioner sker
- *Exempel på energiomsättningar* vid olika slags organiska reaktioner.
- Exempel på *additions-, polymerisation- och substitutionsreaktioner*

## *Reaktionsformel vs reaktionsmekanism*

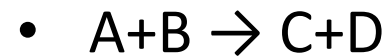
- En **reaktionsformel** berättar *vad* som sker, reaktionsmekanismen *hur* det sker
- En **reaktionsmekanism** är en detaljerad beskrivning av en reaktion med alla *aktiverade komplex* och *mellanformer*.

## Reaktionsmekanism

Figur 1.9 Diagram över reaktionsväg



## Reaktionsformel



# Reaktionsmekanismer

- Elektroner alltid inblandade
- En reaktionsmekanism visar *hur och vilka bindningar som bryts resp. bildas*
- Visar förändringar i *elektronfördelningen* mellan atomer

# Några nya termer och begrepp:

- *Elektrofil*
- *Nukleofil*
- *Nukleofil attack*
- *Intermediär (mellanform)*
- *Karbokatjon*
- *Lämnande grupp*
- *Monomer*
- *Oparad elektron*
- *Radikal*
- *Additionsreaktion*
- *Substitutionsreaktion*
- *Polymerisationsreaktion*



# Nukleofil/elektrofil

Molekyler (eller del av molekylen) och joner kan vara *elektrofila* eller *nukleofila*.

En *elektrofil* ( "gillar" elektroner) är ofta *positivt laddad*.

En *nukleofil* ( "gillar" atomkärnan, positiv laddning) , har ett elektronöverskott (negativ laddning).

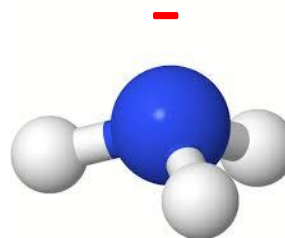
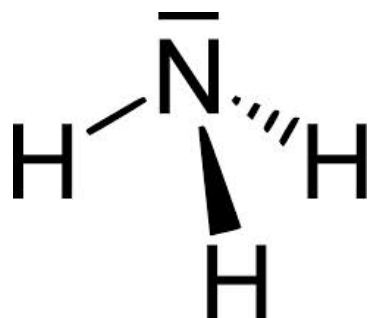
När två ämnen/molekyler reagerar med varandra:

En **elektrofil** söker sig till positioner med hög elektrontäthet (ett område med elektronöverskott).

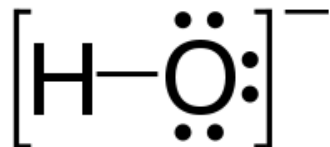
En **nukleofil** söker sig till positioner med brist på elektroner. (ett område med elektronunderskott).

## Nukleofil eller elektrofil?

Ammoniak har ett fritt elektronpar (*elektronöverskott*) och är en **nukleofil**



Hydroxidjonen är negativt laddad (*elektronöverskott*) och är en **nukleofil**

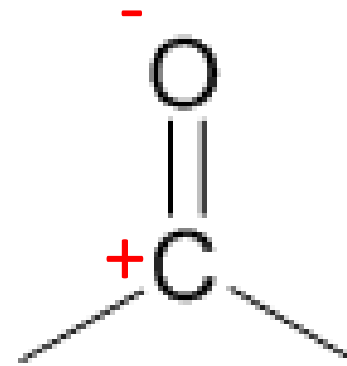


## Nukleofil eller elektrofil?

Syreatomen i en karbonylgrupp är en *nukleofil*

Kolatomen är en *elektrofil*.

(Kolatomen är svagt positiv och syreatomen svagt negativ pga att elektronparet i bindningen dras mot de *elektronegativa syret*)



karbonylgrupp

### Exempel på nukleofiler

- har elektronöverskott, "gillar" positiva områden

cyanidjon	$\text{CN}^-$
jodidjon	$\text{I}^-$
metoxidjon	$\text{CH}_3\text{O}^-$
hydroxidjon	$\text{OH}^-$
kloridjon	$\text{Cl}^-$
ammoniakmolekyl	$\text{NH}_3$

### Exempel på elektrofiler

- har elektronunderskott, "gillar" negativa områden

metalljon t.ex. blyjon	$\text{Pb}^{2+}$
kolatom i karbonylföreningar	$\text{>C=O}$
karbokation	$\text{-C}^+$
kolatom som är bunden till fluor-, klor- eller bromatom	$\text{-C-Cl}$

## Elektrofil

$\text{H}^+$ ,  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{NO}_2^+$ ,  $\text{NO}^+$ ,  $\text{PhN}_2^+$ ,  $\text{R}_3\text{C}^+$ ,  
 $\text{SO}_3$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{BF}_3$ ,  $\text{AlCl}_3$ ,  $\text{I}-\text{Cl}$ ,  $\text{Br}_2$ ,  $\text{O}_3$

## Nukleofil

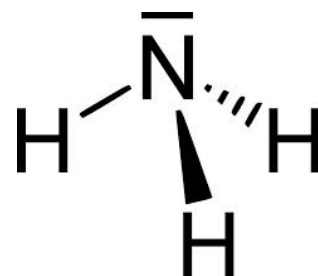
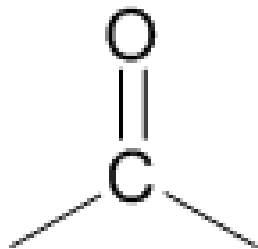
$\text{H}^-$ ,  $\text{BH}_4^-$ ,  $\text{HSO}_3^-$ ,  $\text{HO}^-$ ,  $\text{RS}^-$ ,  $\text{CN}^-$ ,  $\text{RCO}_2^-$ ,  $\text{RC}\equiv\text{C}^-$ ,  
 $^-\text{CH}(\text{CO}_2\text{Et})_2$ ,  $:\text{O}$ ,  $:\text{N}$ ,  $:\text{S}$ ,  $\text{RMgBr}$ ,  $\text{RLi}$

Reaktiviteten hos ett ämne ( dvs hur lätt ämnet reagerar ) och var reaktionen sker i en molekyl beror på *ämnets struktur*

Den *funktionella gruppen* har stor betydelse.

Reaktioner sker på "*laddningens*" plats i en molekyl

→den atom som har ett över- eller underskott av elektroner



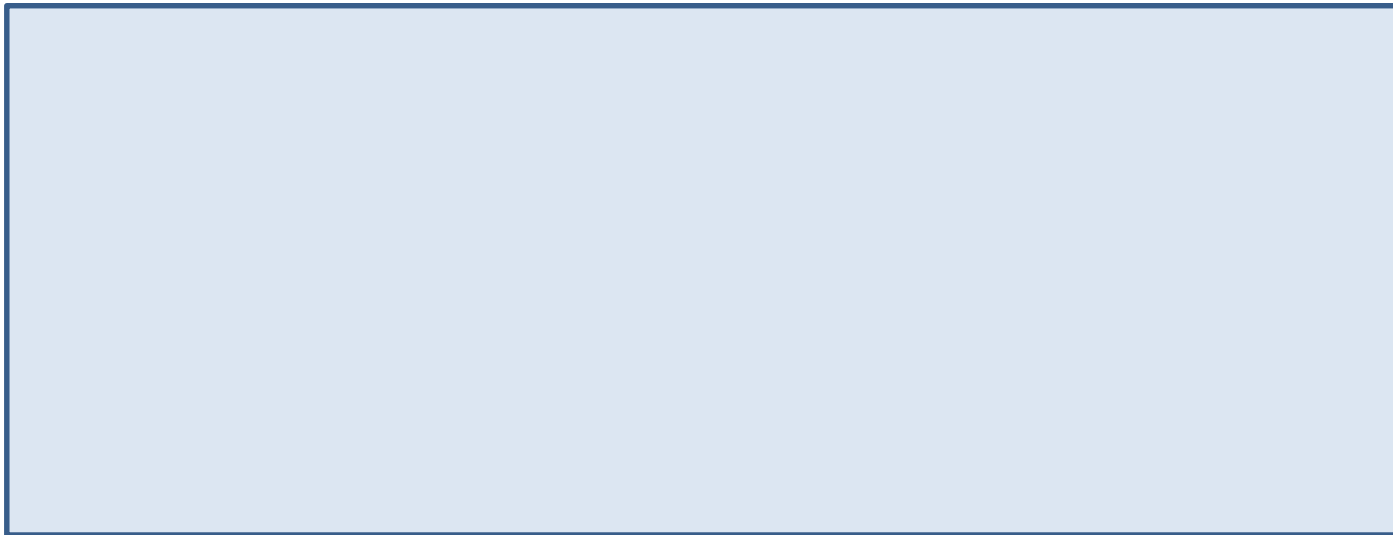
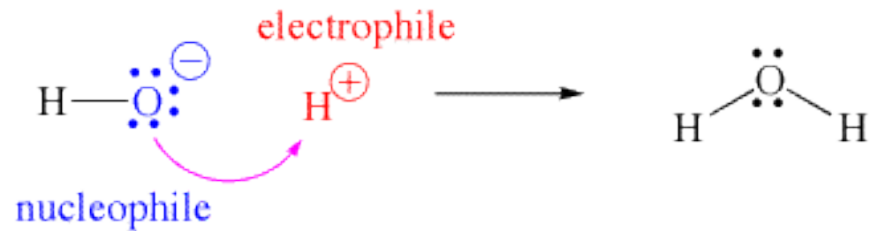
En **nukleofil** reagerar gärna med en **elektrofil**.

Nukleofilen "attackerar" elektrofilen i en så kallad *nukleofil attack*.



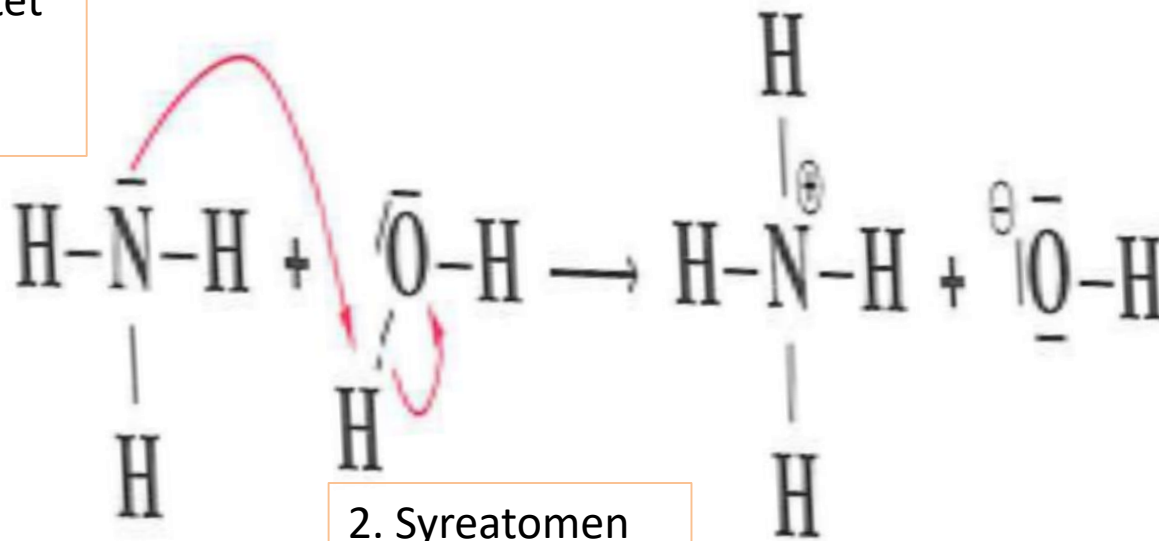
# Exempel 1 på en *nukleofil attack*

*acid-base reaction:*



## Exempel 2 på nukleofil attack

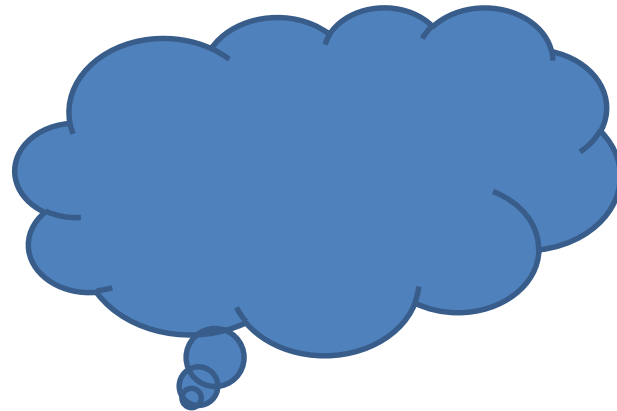
1. Ammoniak är nukleofil, attackerar det "positiva" vätet hos vatten (dipol).



2. Syreatomen drar till sig elektronparet som bundit vätet

Läs sid 159-165,  
172-173

(läxa v7)

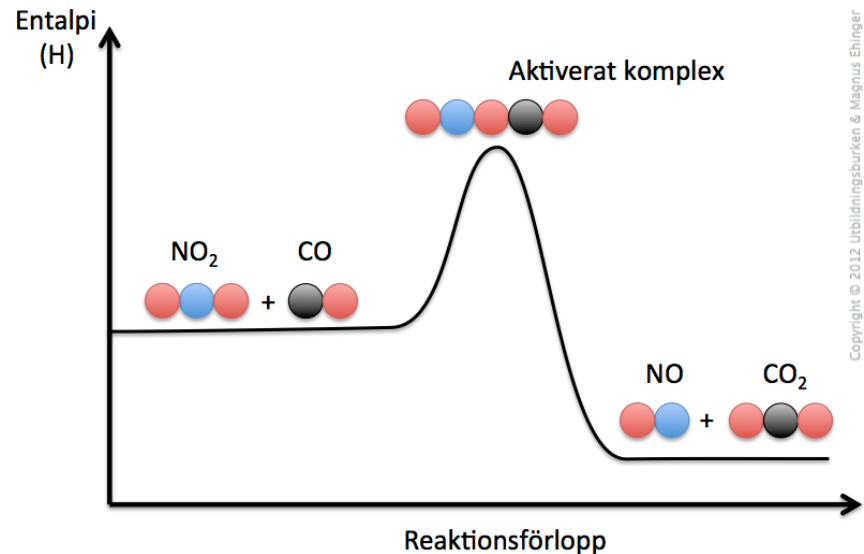


# Begrepp *reaktionshastighet* (rep kap 1)

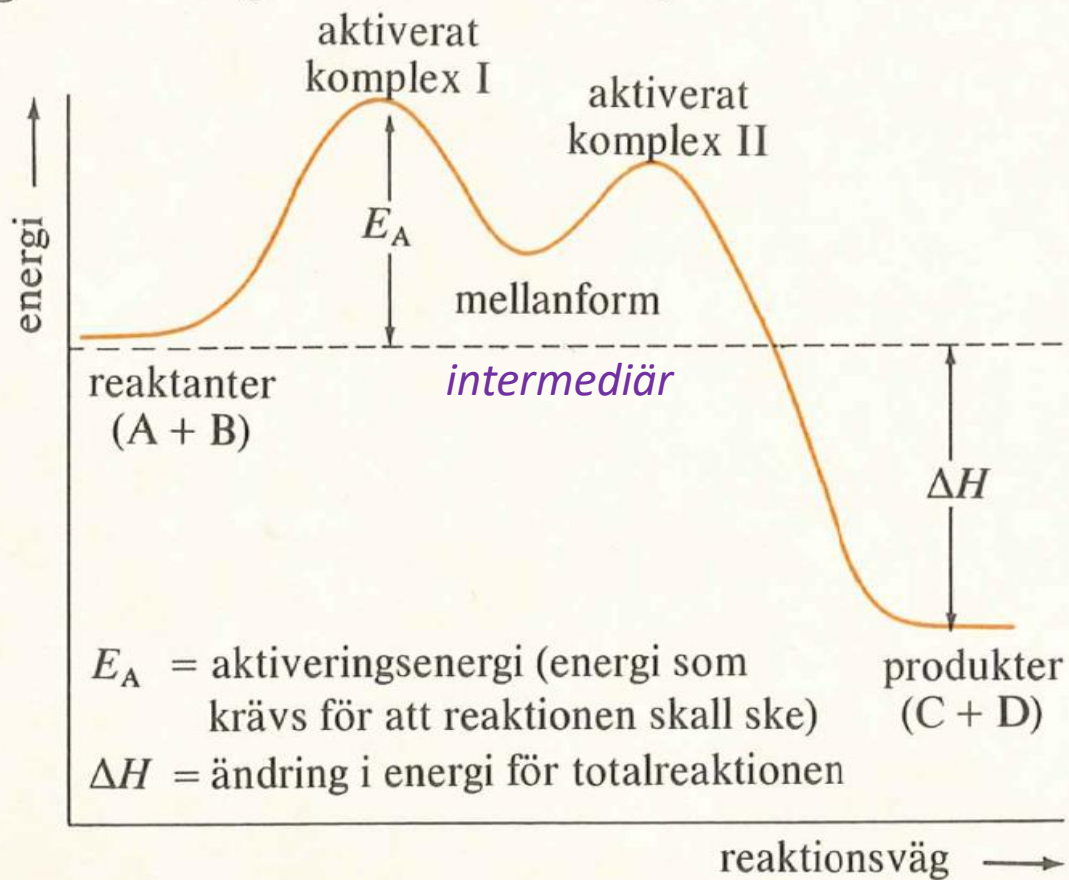
**Aktiveringsenergi** – den energi som krävs för att reaktionen skall sätta igång.

Atomer som träffat varandra med rätt riktning och tillräcklig energi bildar ett **aktiverat komplex**

Ett **aktiverat komplex** existerar mkt kort tidsperiod, ca  $10^{-12}$  sekunder

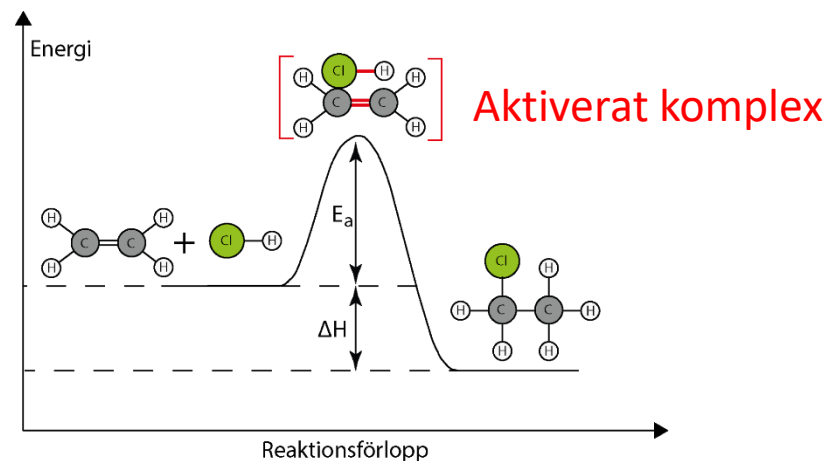


**Figur 1.9** Diagram över reaktionsväg

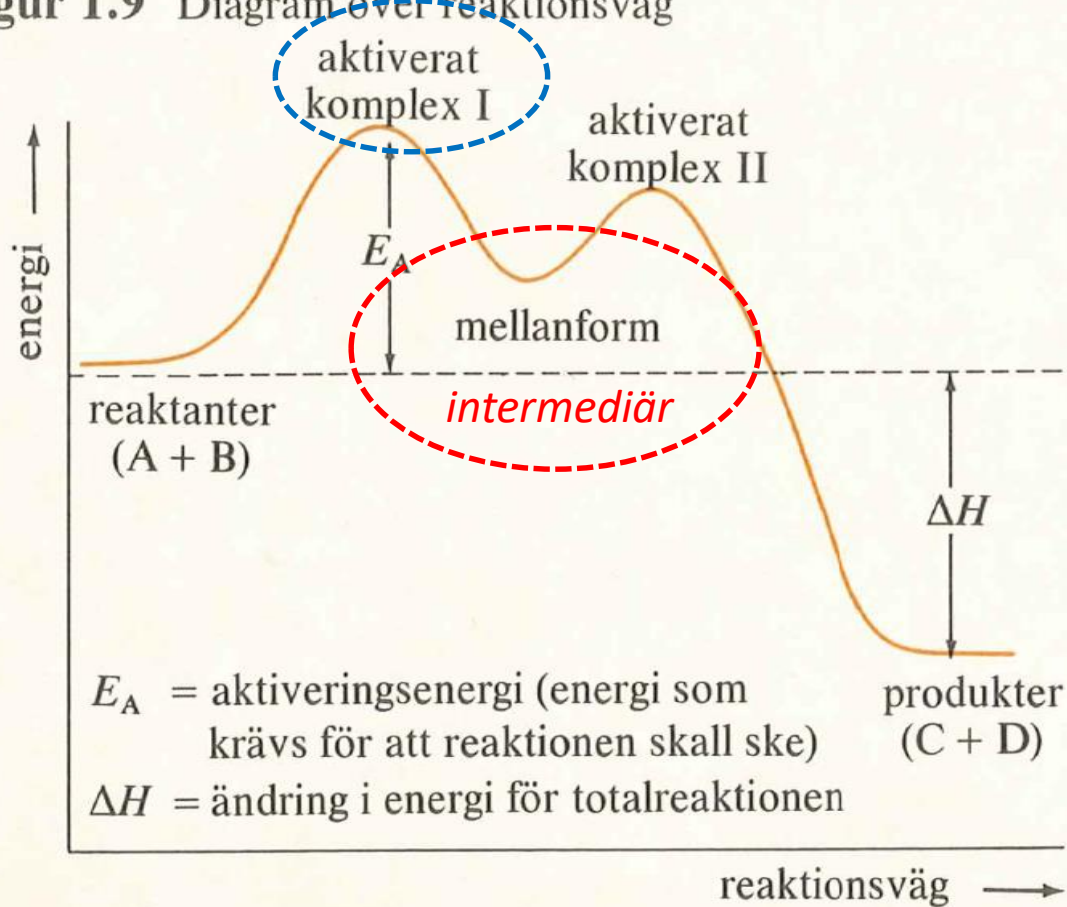


# Övergångstillstånd (aktiverat komplex) (Wikipedia)

- *Övergångstillstånd* kallas den konfiguration av atomkärnor och elektroner som har den högsta energinivån längs en reaktionskoordinat. En molekyl som passerar ett övergångstillstånd befinner sig där en ytterst kort tid ( $10^{-12}$  -  $10^{-13}$  sekunder)
- Ett *övergångstillstånd* beskriver geometri och laddningsfördelning, och *finns inte i fysisk mening*. *Systemet*, det vill säga den samling atomkärnor och elektroner, som har denna konfiguration kallas för *aktiverat komplex*. (Termerna betyder strikt talat olika saker, men används ofta informellt på samma sätt)



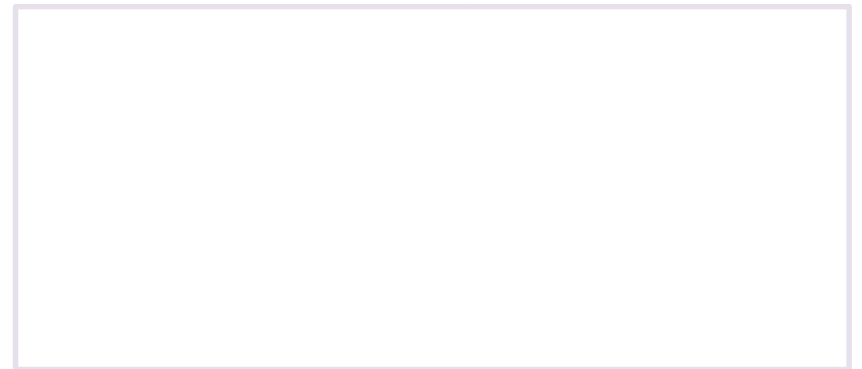
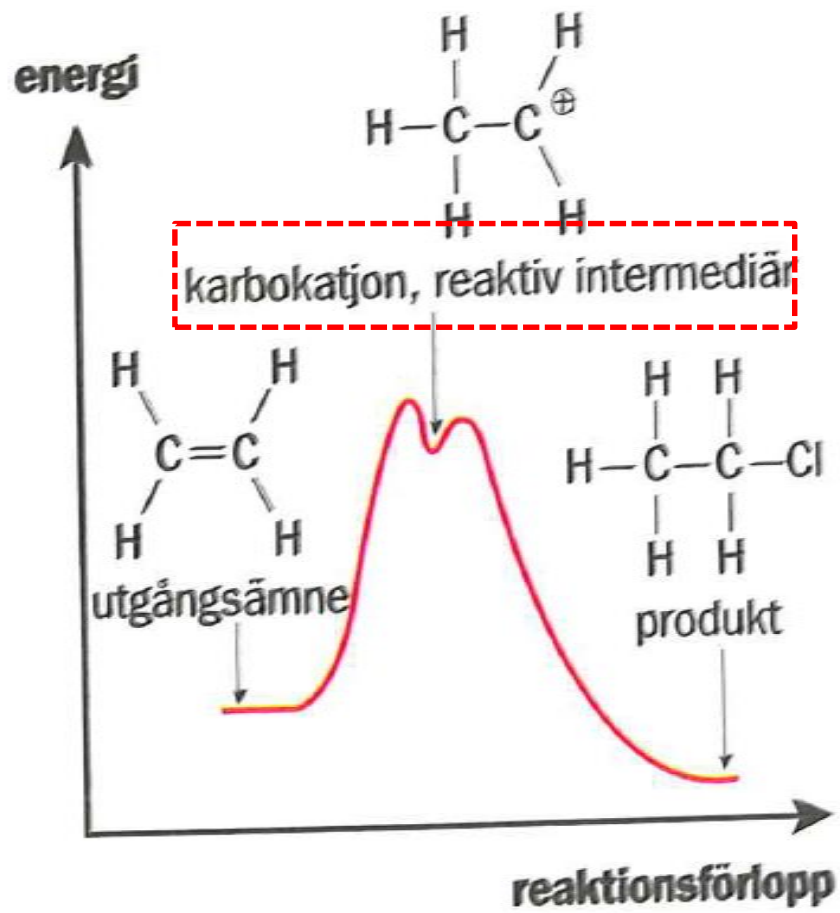
Figur 1.9 Diagram över reaktionsväg



## Intermediär (intermediat) wikipedia

- I kemi är en intermediär ett reaktivt ämne som besitter ett *lokalt energiminimum* på en reaktionskoordinat. Intermediären har alltså lägre energi än andra, liknande tillstånd.
- Utmärkande för intermediärer är hög reaktivitet, kort livslängd och låg koncentration jämfört med reaktanter och produkter. (Går att isolera, Nobel Prize 1994 George Olah)
- Några välkända intermediärer i organiska reaktioner är *karbokatjoner*, karbanjoner, *radikaler*, karbener och nitrener.

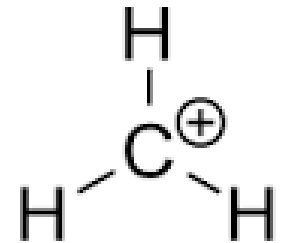




## Två exempel på intermediär (mellanform)

### Karbokatjonen

– en positivt laddad jon med laddningen på kolatomen.



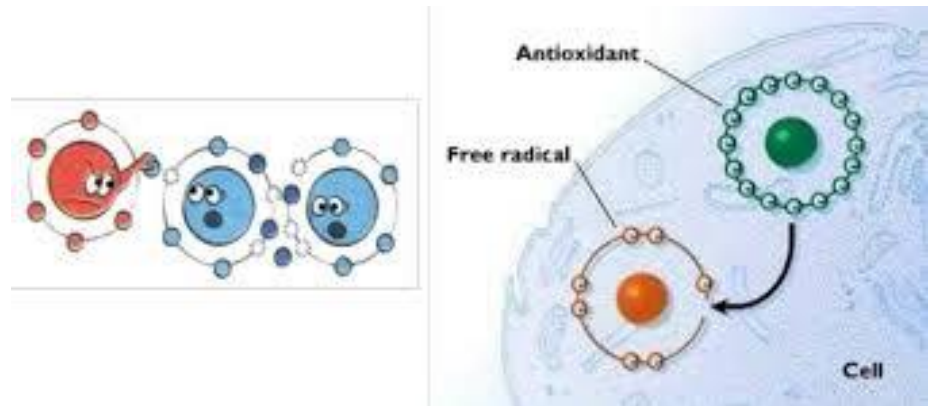
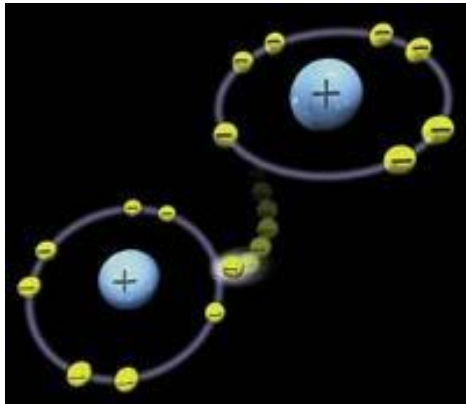
### Radikal

– atom eller atomgrupp med **en** oparad elektron,



# Radikaler – en intermediär med oparad elektron

Bildas tex pga UV-strålning



(Fria radikaler skadliga i organismen – tar elektroner-förstör molekyler)



# Organiska föreningar - syntes - reaktionstyper

**Addition** – atom eller atom grupp läggs till

*Additionsreaktioner*

**Polymerisation** - flera additionsreaktioner i en följd

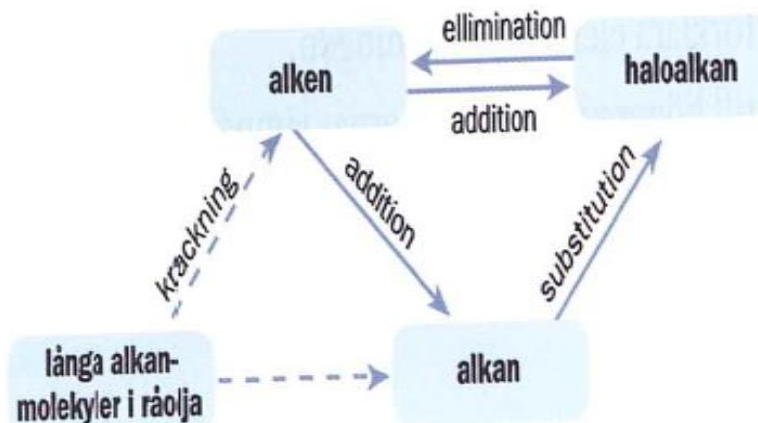
*Polymerisationsreaktion*

**Substitution** –atom eller atomgrupp byts ut

*Substitutionsreaktioner*

**(Elimination** – atom eller atomgrupp tas bort)

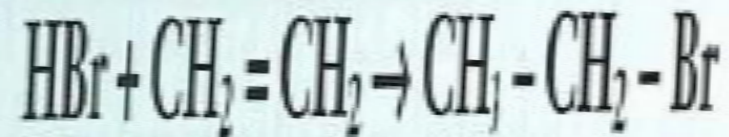
*(Eliminationsreaktioner)*

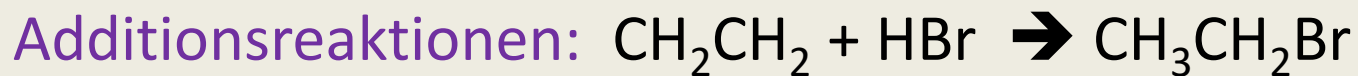


## Exempel på en *additionsreaktion*

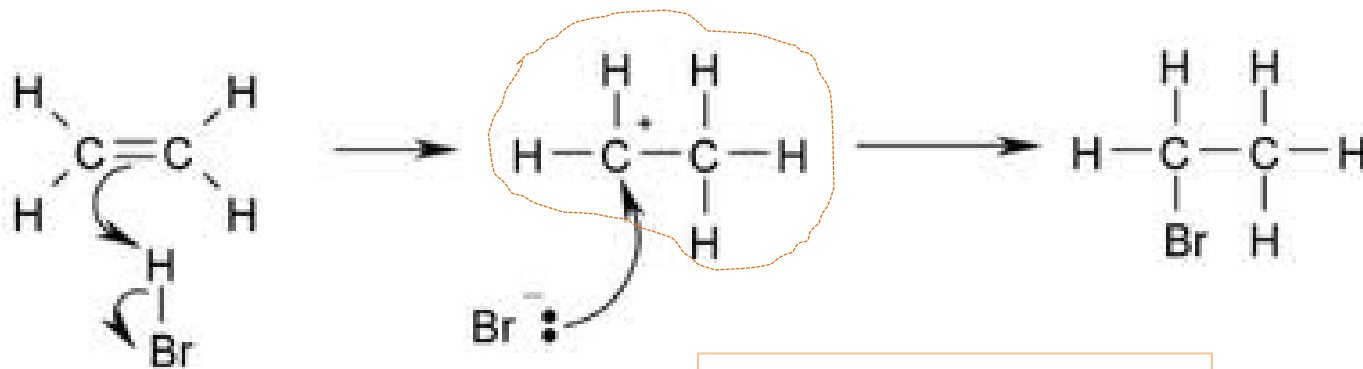
Syntes av en haloalkan genom *addition* av HBr till eten

vätebromid + eten  $\rightarrow$  brometan





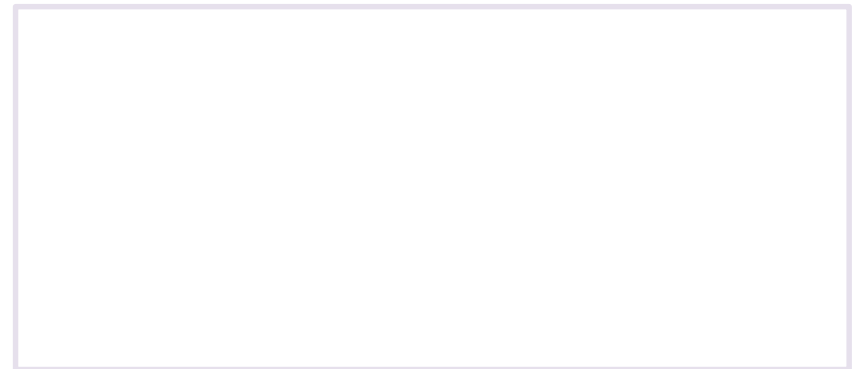
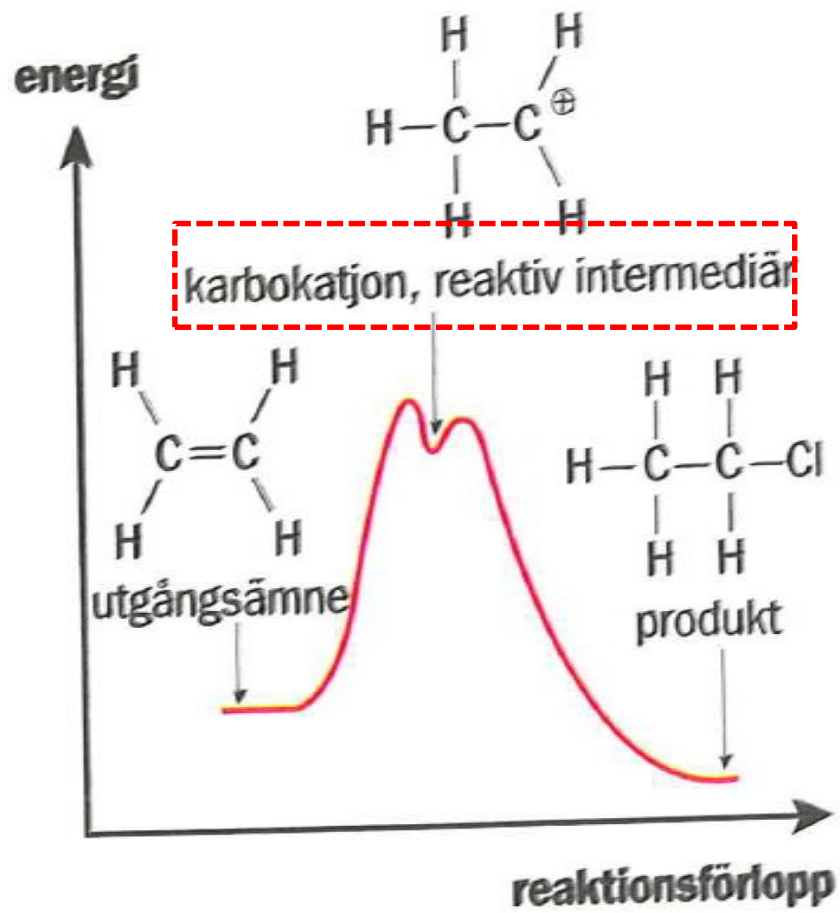
*Hur är reaktionsmekanismen, vad sker?*



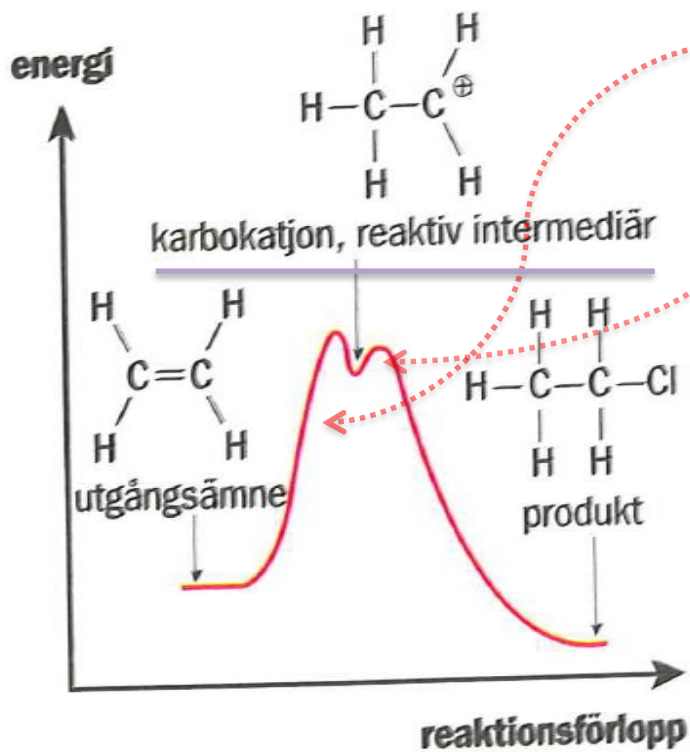
1. Elektontätt i dubbelbindning, en nukleofilattack mot positiva vätet i HBr (dipol). En karbokation bildas

2. Bindande elektronparet i HBr går till Br, en  $\text{Br}^-$  bildas (bromidjon)

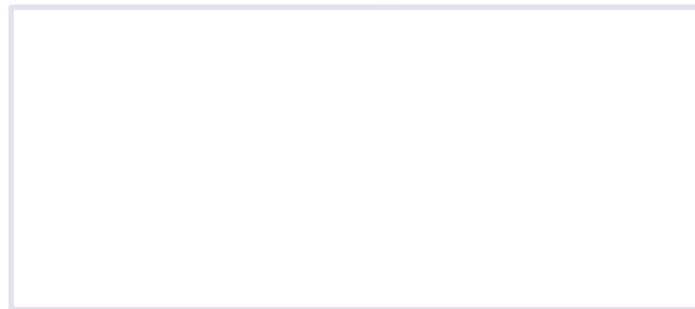
3. Bromidjonen är nukleofil, attackerar karbokationen (elektrofil).





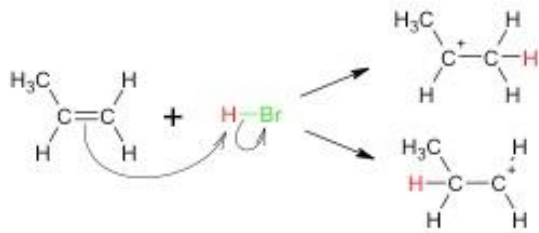


Första steget i reaktionen kräver mer energi än det andra steget och är alltså det steg som bestämmer reaktionshastigheten.

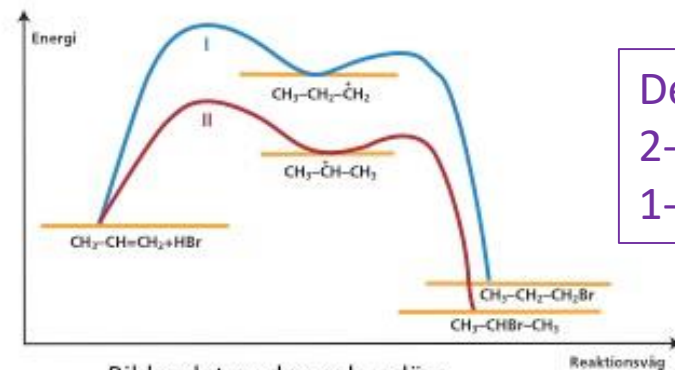
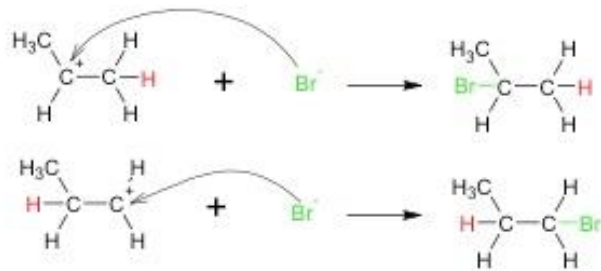


# Additionsreaktion: addition till en *osymmetrisk alken*

## Addition av vätebromid till propen



Två resultat är möjliga



Det bildas mer  
2-brom-propan än  
1-brom-propan

Bildandet av den sekundära  
karbokationen kräver lägre  
aktiveringsenergi och denna  
reaktionsväg gynnas

**Markovnikov regel:** (ryske kemist 1800-talet) vid addition av vätehalogenider eller vatten till en osymmetrisk alken binds väteatomen lättare till den atom i dubbelbindningen som redan har flest bundna väteatomer

# Substitutionsreaktioner

–atom eller atomgrupp *byts ut*

Tex. en haloalkan reagerar med en alkohol

Två olika typer av substitutionsreaktioner :  $S_N1$  och  $S_N2$

S – substitutionsreaktion

N – nukleofil

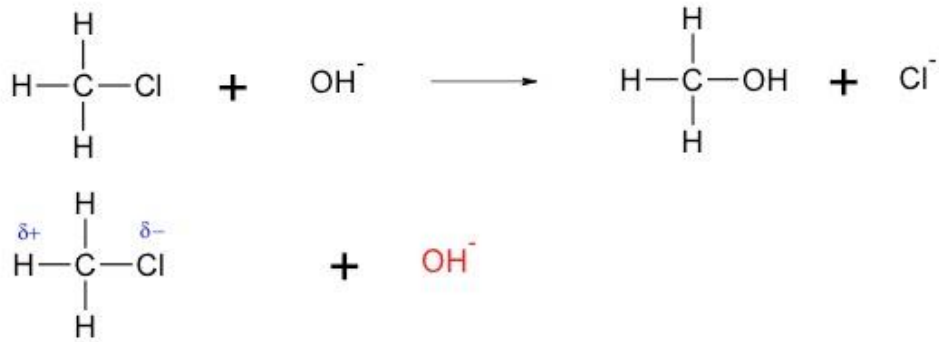
1 – reaktionshastigheten beror på *en* reaktants koncentration.

2 – reaktionshastigheten beror på *båda* reaktanternas koncentrationer

# Substitutionsreaktion ( $S_N2$ )

- reaktionen sker i *ett steg*, koncentrationen av *båda ämnena* påverkar reaktionshastigheten

Primär  
haloalkan



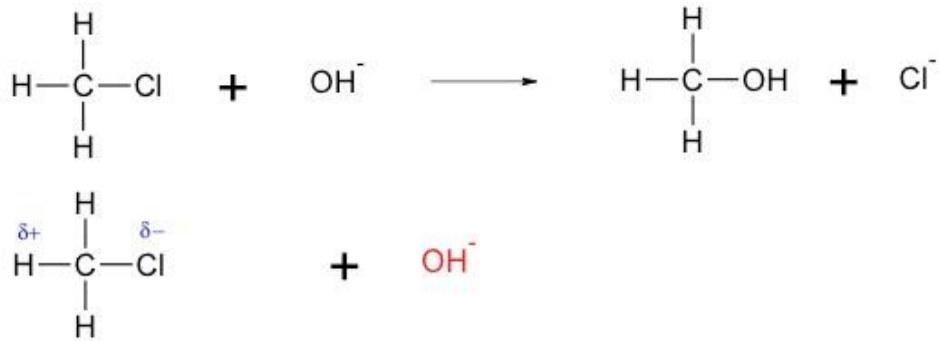
$\text{CH}_3\text{Cl}$  är en dipol

$\text{OH}^-$  är ett nukleofilt reagens =  
e<sup>-</sup>-rik som dras till positiva  
områden

# Substitutionsreaktion ( $S_N2$ )

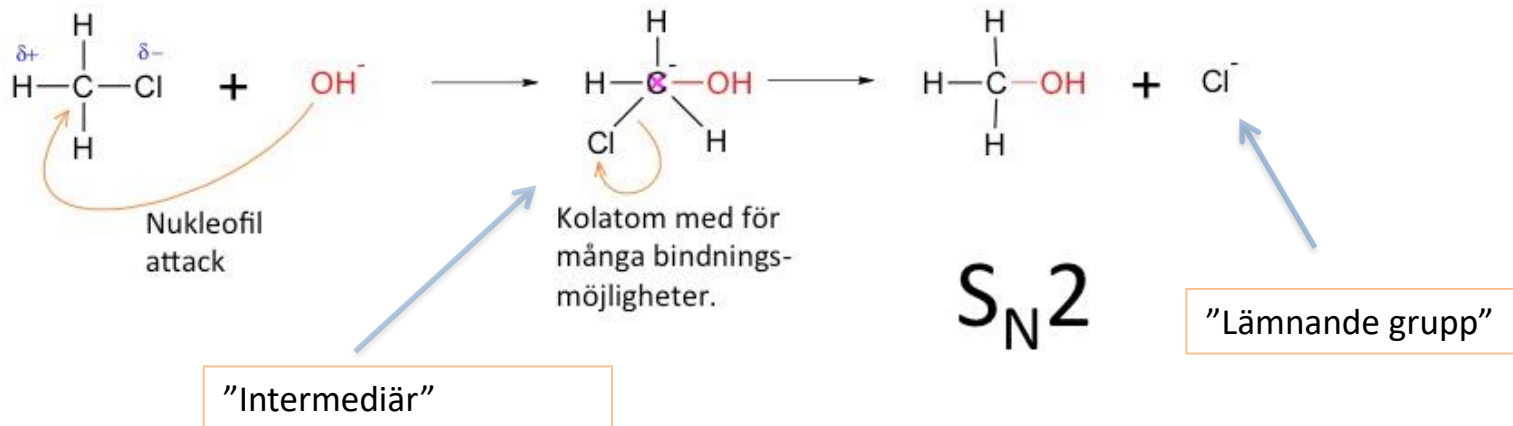
- reaktionen sker i *ett steg*, koncentrationen av *båda ämnena* påverkar reaktionshastigheten

Primär haloalkan



$\text{CH}_3\text{Cl}$  är en dipol

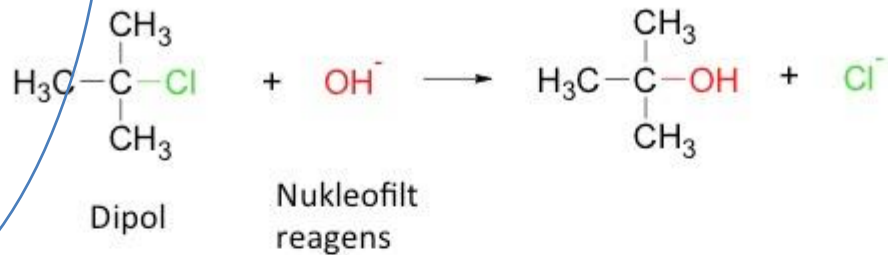
$\text{OH}^-$  är ett nukleofilt reagens = e<sup>-</sup>-rik som dras till positiva områden



# Substitutionsreaktion ( $S_N1$ )

- reaktionen sker i *två steg*, reaktionshastigheten bestäms av koncentrationen av *ett ämne* (ämnet som bildar karbokationen).

Tertiär  
haloalkan



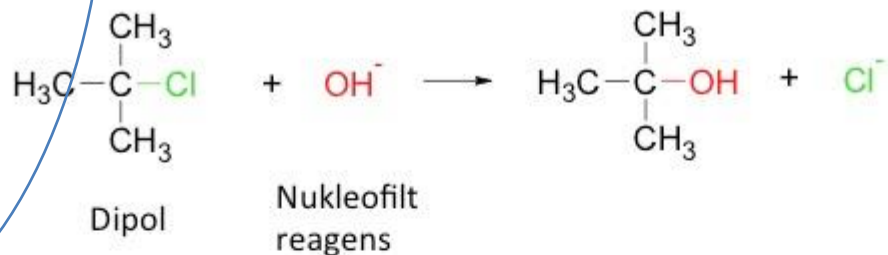
Grenad molekyl,  
ämnena har  
svårt att  
"träffa på"  
varandra  
rätt direkt



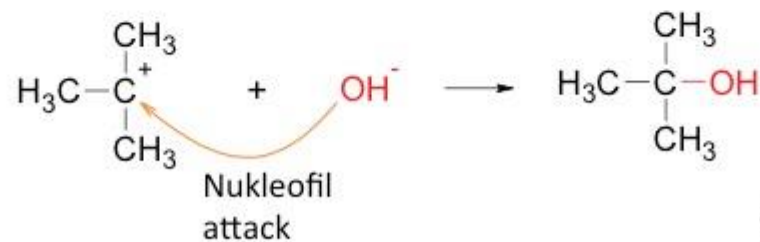
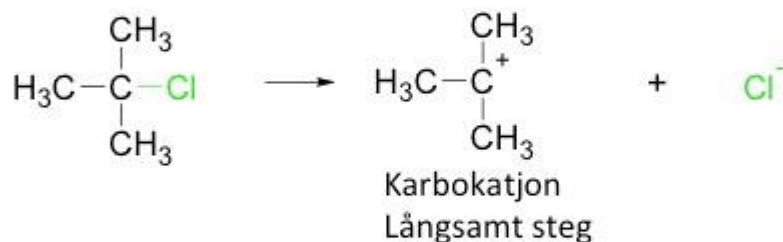
# Substitutionsreaktion ( $S_N1$ )

- reaktionen *sker i två steg*, reaktionshastigheten bestäms av koncentrationen av *ett ämne* (ämnet som bildar karbokationen).

Tertiär  
haloalkan



Grenad  
molekyl,  
ämnena har  
svårt att  
"träffa på"  
varandra



$S_N1$

# Polymerisationsreaktioner

- många små molekyler bildar en stor.

*Polymerer* är makromolekyler som består av många små byggstenar (monomerer)

*Plaster* är syntetiska material som består av polymerer (se tab s179)

## polymer

polyeten

Polypropen

PVC

## monomer

eten

propen

kloreten

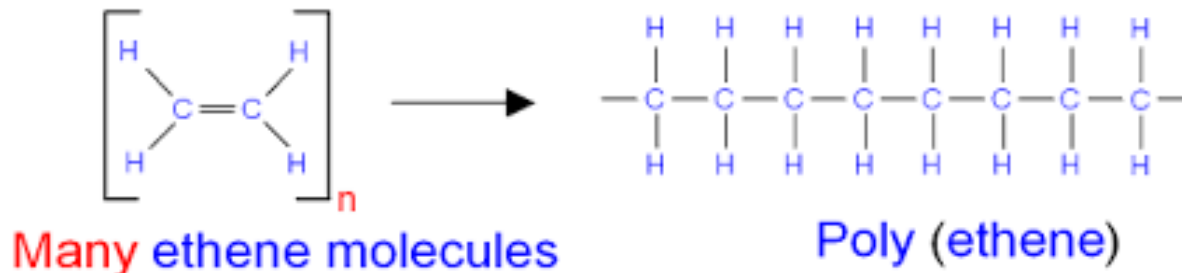
## användning

plastpåsar

plaströr

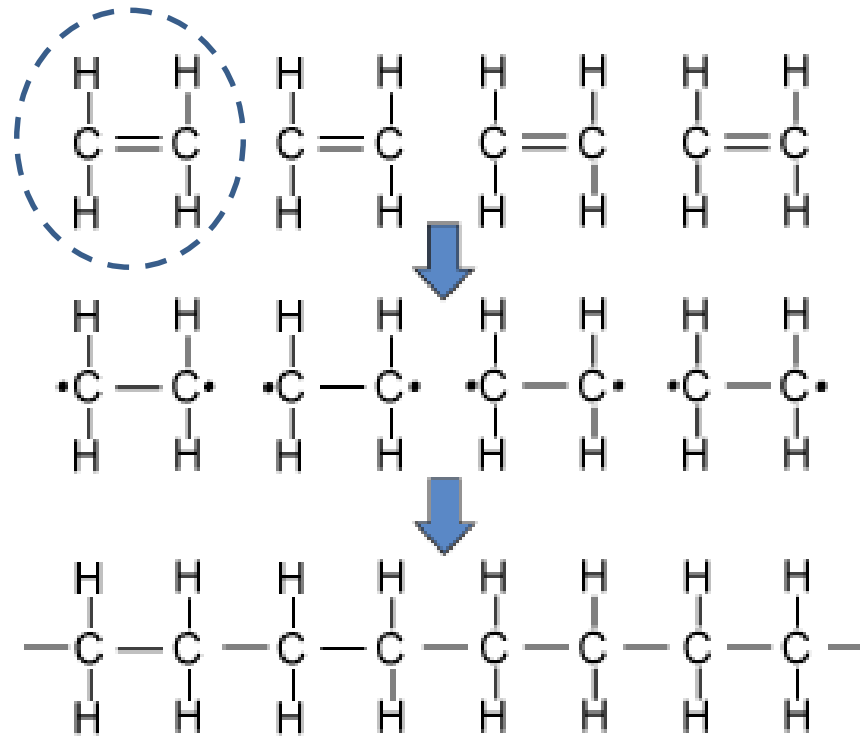
slangar, golvmattor

mm



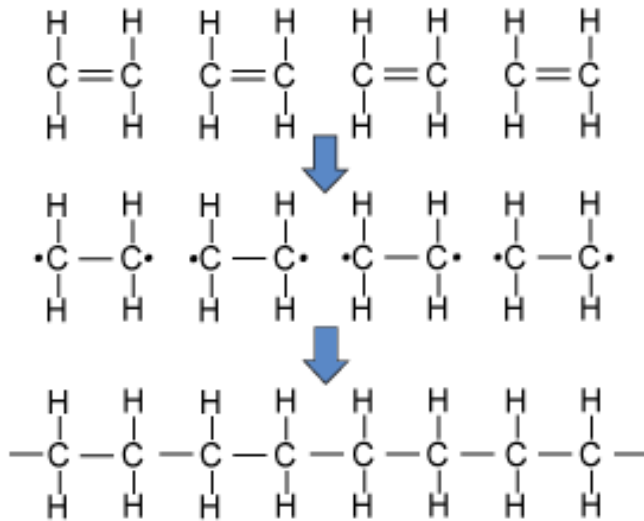


# Ämnet *polyeten* (hårdplast)

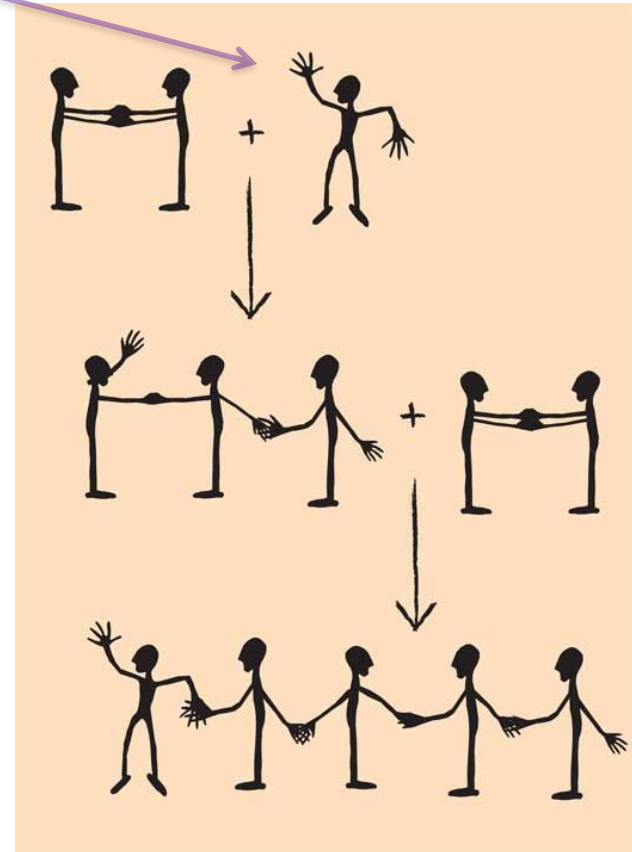


# Polymerisation

I syntesen av en polymerer används ofta *fria radikaler* för att starta reaktionen (*radikal reaktioner*)



polyeten

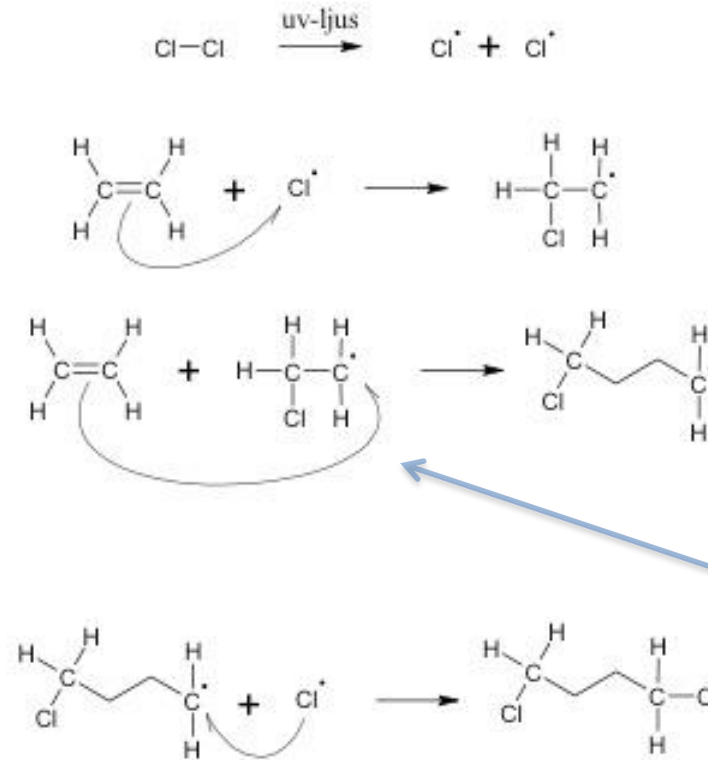


# Radikalreaktion

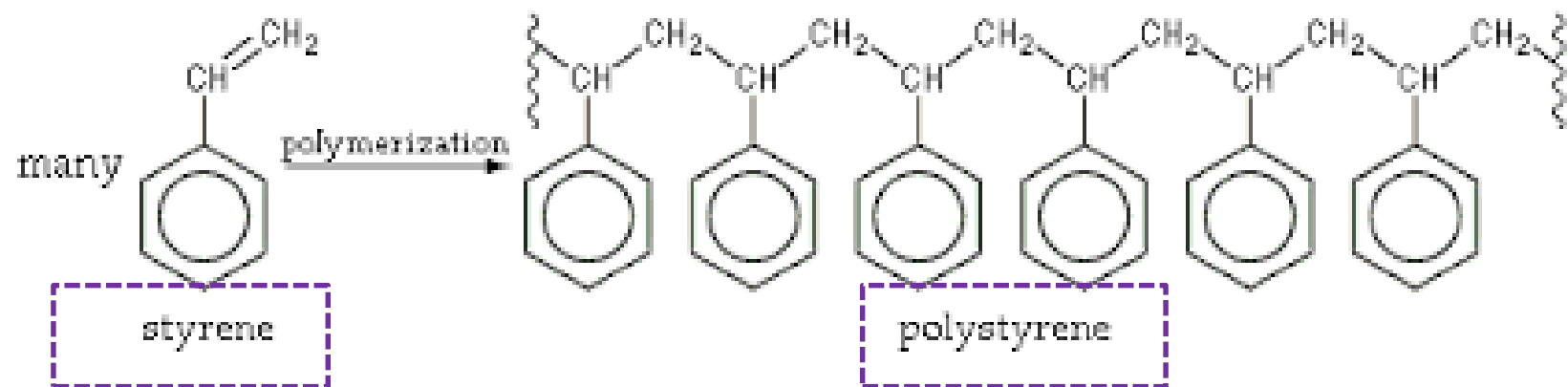
polymerisation

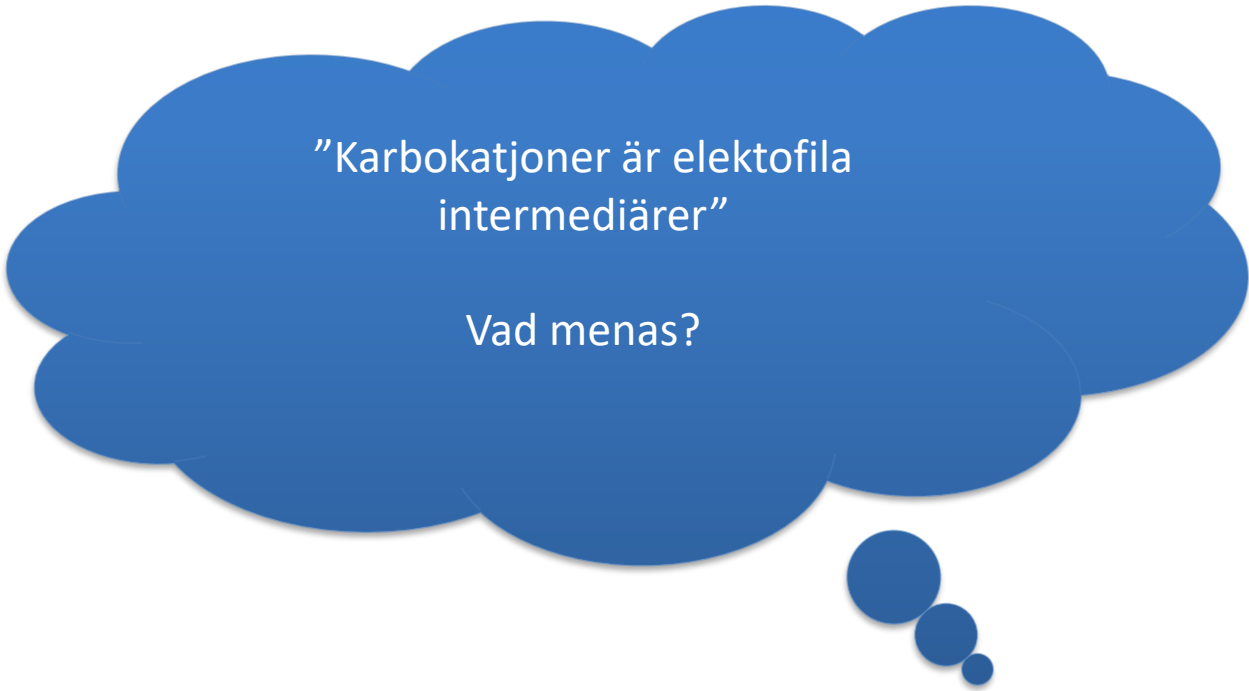
För att reaktionen skall starta behövs en *första radikal* (initiator) tex en *klor-radikal*.

Att endast *en elektron* berörs visas med en pil med endast en "hulling".



Reaktionen rullar på av sig själv tills en ny klor-radikal tillsätts eller två ändar möts





”Karbokatjoner är elektrofila  
intermediärer”

Vad menas?

## *Resonansstabilisering\**

Läs sid 165-168

Uppgift : 6:6:3

# Instudering reaktionsmekanismer

Titta på you tube-klipp:

[https://www.youtube.com/watch?v=t\\_Q3MI509X8](https://www.youtube.com/watch?v=t_Q3MI509X8)

4:30-13:30 substitutionsreaktion,

0:20-4:30 radikalreaktion

Läs/ använd sidorna 160-165, 172-182, 185, samt pp för att lösa nedanstående uppgifter:

- Förklara nya begrepp (pp bild 8).
- Lös uppgifterna : 6:2, 6:10, 6:12,

C/A även:

Läs om *Resonansstabilisering*, sid 165-168

Uppgift : 6:6:3, 6:13 , 6:17 (mekanismen\*\*) )

## Prov v8 fredag

Reaktionsmekanismer kap 6

Sid 160-165, 172-182, 185

*Powerpoint*

Organiska ämnen kap 5- i huvudsak avslutningen

Ämnesklasser, funktionella grupper, namngivning, isomeri (powerpoint). Övningsstenciler, lab



**Följande bilder är en bonus  
(ingår inte och behövs inte för att lösa  
uppgifterna)**

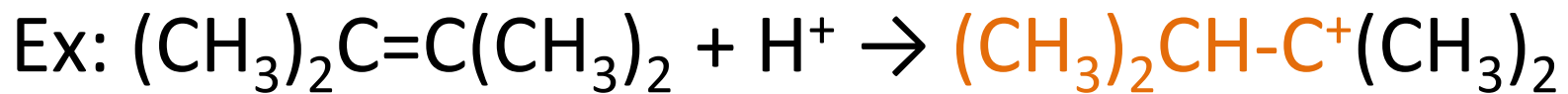
# Karbokatjoner är elektrofila intermediärer

Karbokatjoner kan bildas tex genom att :

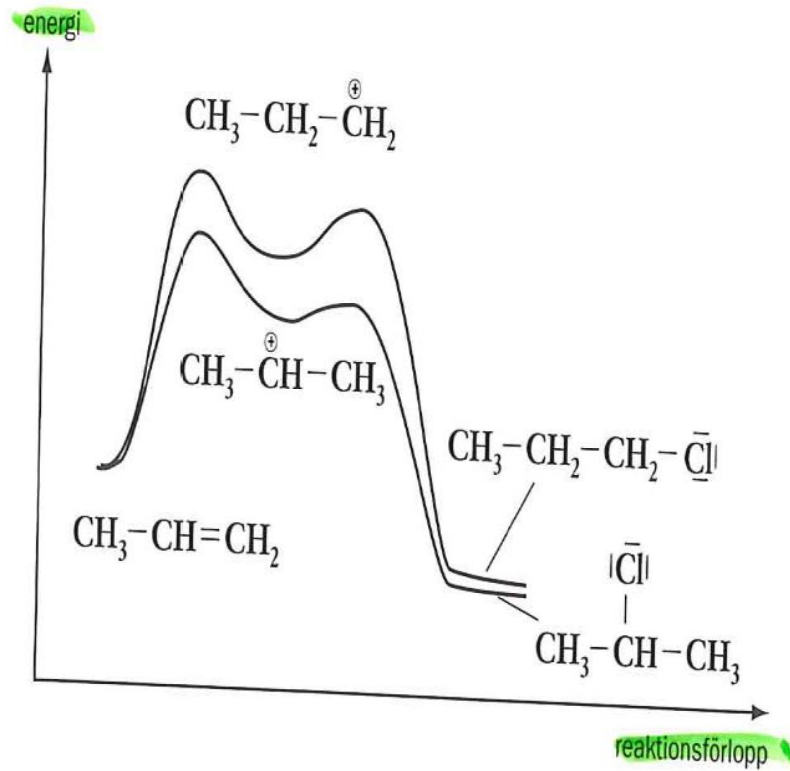
- en lämnande grupp lämnar en molekyl.

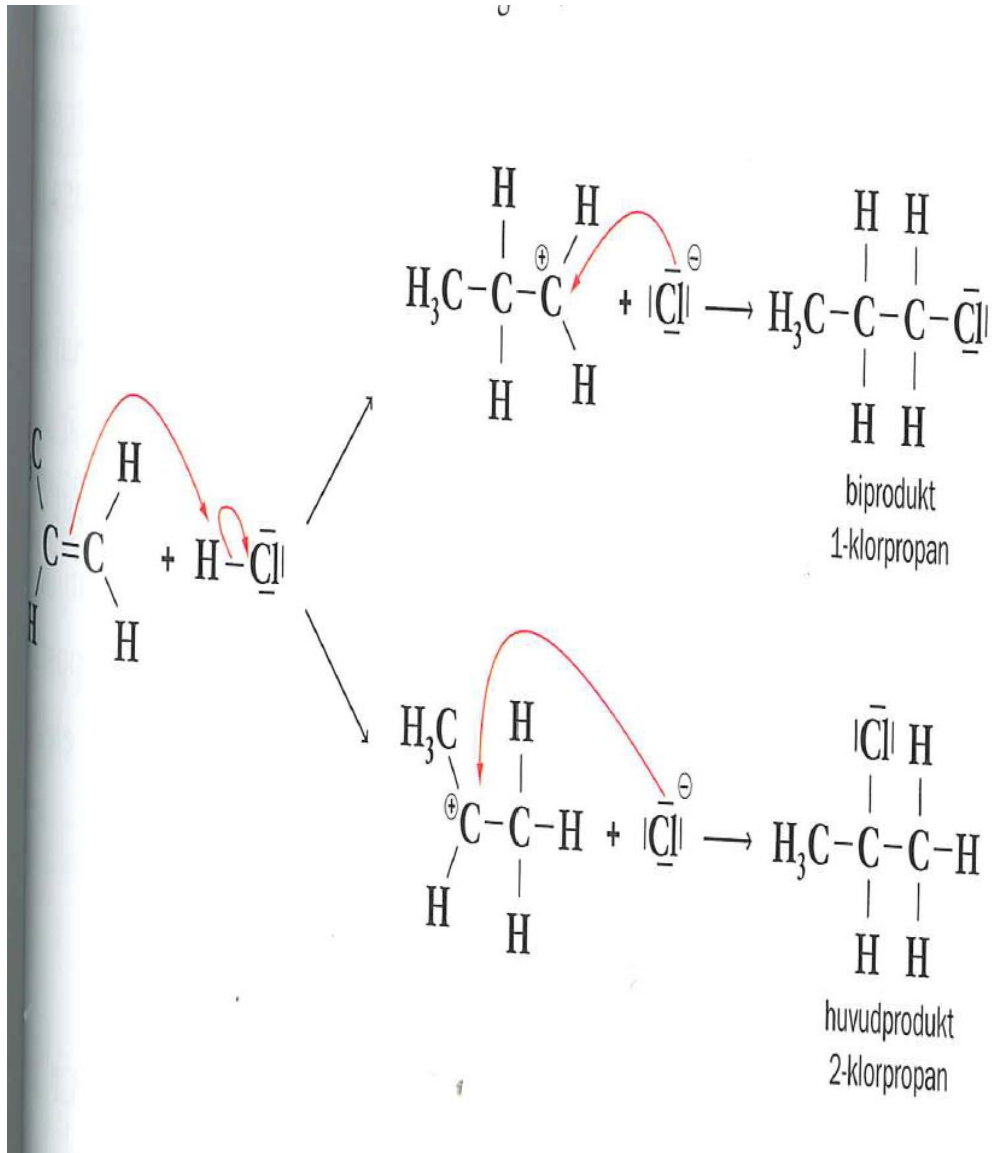


- en väteatom adderas över en dubbelbindning.

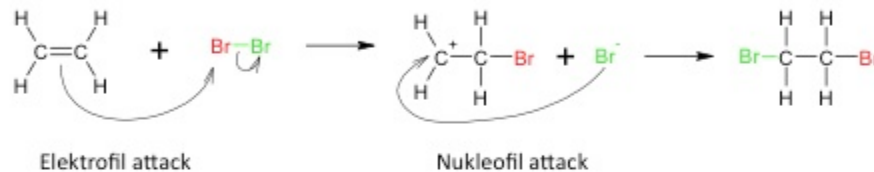


# Addition till en osymmetrisk alken





# Addition av brom till eten

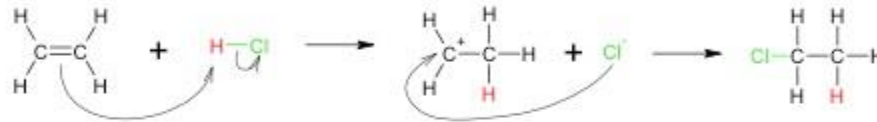


Brom har en hög elektronegativitet, dvs vill ha elektroner. Den gör därför en elektrofil attack på dubbelbindningen. Pilen visar elektronförflyttningar.

Den bildade karbokationen är extremt reaktiv pga av elektronunderskott.

Ett elektrofilt reagens är en partikel som reagerar med elektrontäta områden.

# Addition av väteklorid till eten



Som tidigare men väteklorid är en tydlig dipol

# Addition av vatten till eten

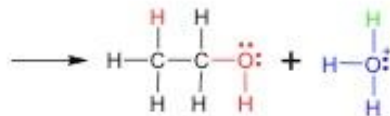


Vatten är inte lika polärt som vätehalogenider vilket kräver en katalysator.

Dubbelbindningen kan då attackera och reagera med en H-atom.

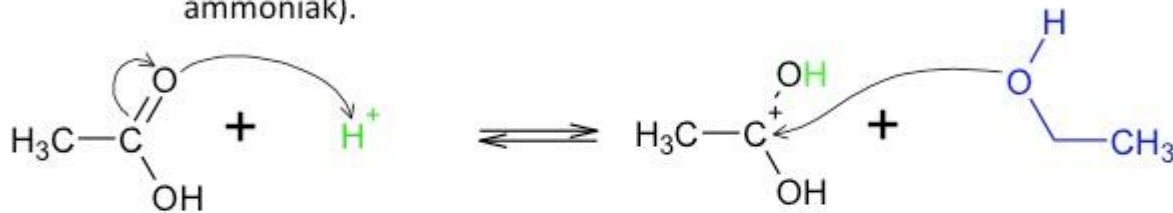


Vatten kan reagera nukleofilt med en bildade karbokation.

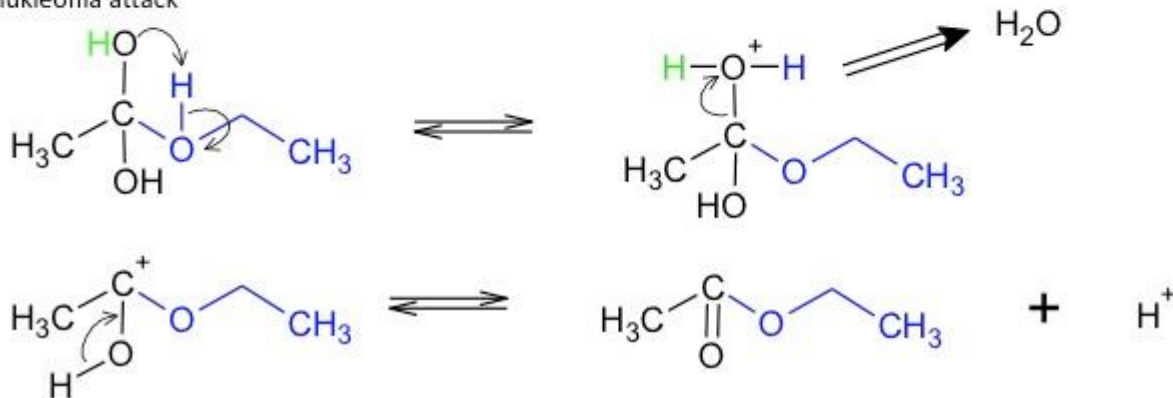


# Kondensationsreaktion

Två molekyler kopplas samman samtidigt som en liten molekyl spjälkas av, ofta vatten (men även koldioxid och ammoniak).

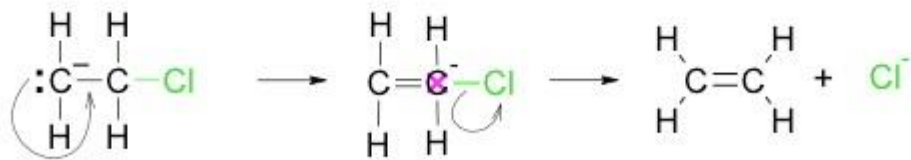
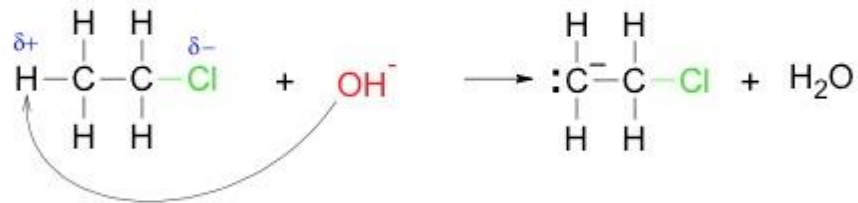
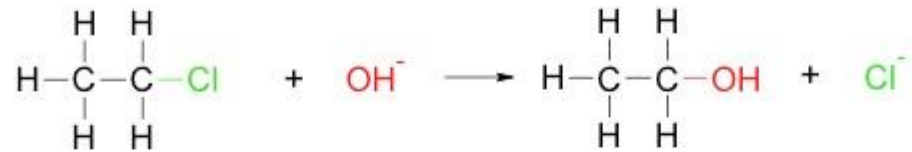


Först vid tillsats av syra som bildar karbokation kan alkoholen utföra sin nukleofila attack





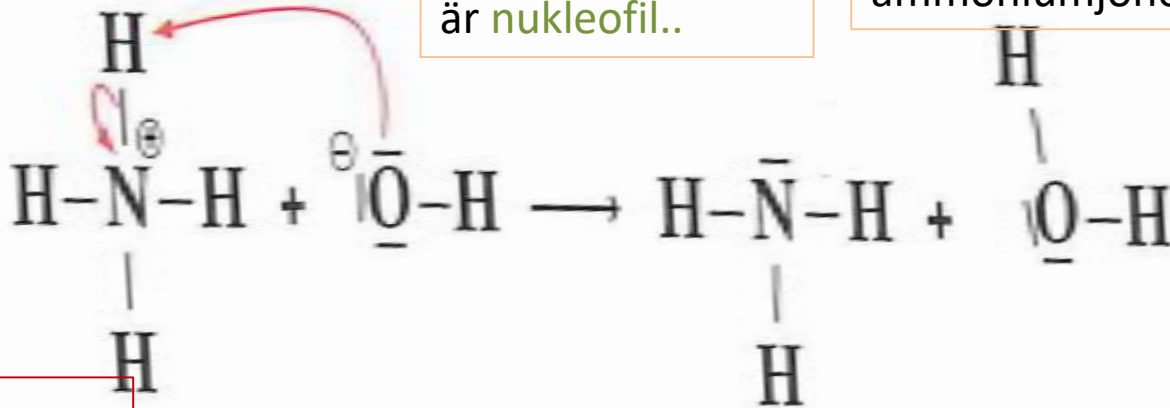
# Eliminationsreaktion



# nukleofil attack(2)

1. Hydroxidjonen (negativladdning) är nukleofil..

..attackerar en väteatom i ammoniumjonen som är **elektofil**



2. Kväveatomen drar till sig elektronparet