

FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER**Introduktion till olika reaktionstyper och reaktionsmekanismer:**

1. Förklara följande begrepp:

a) Eliminationsreaktion

Svar: Vid en eliminationsreaktion avskiljs två atomer eller atomgrupper från en molekyl vilket ger upphov till en dubbel- eller trippelbindning.

b) Additionsreaktion

Svar: Vid en additionsreaktion adderas en atom/atomgrupp till en annan molekyl som från början har en eller flera dubbel- eller trippelbindningar.

c) Substitutionsreaktion

Svar: Vid en substitutionsreaktion byts en atom eller en atomgrupp i en molekyl ut mot en annan atom eller atomgrupp.

d) Kondensationsreaktion

Svar: Vid en kondensationsreaktion binds två molekyler samman under avspjälkning av en vattenmolekyl.

e) Hydrolysreaktion

Svar: Vid en hydrolysreaktion sönderdelas ett ämne under upptagning av en vattenmolekyl.

f) Syra-basreaktioner

Svar: Vid en syra-basreaktion överförs minst en vätejon (proton, H^+) från ett ämne (en syra) till ett annat ämne (en bas).

g) Redoxreaktioner

Svar: Vid en redoxreaktion överförs minst en elektron, fullständigt eller partiellt, från ett ämne till ett annat ämne.

FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

h) Nukleofil

Svar:

- Nukleofiler är joner eller molekyler som attraheras av positiv laddning (partiell eller fullständig) på andra molekyler/joner (på elektrofiler).
- Nukleofiler är ofta negativt laddade (partiellt eller fullständigt) och har minst ett fritt elektronpar (eller en s.k. pi-bindning).
- En nukleofil kan skapa en bindning till en elektrofil med hjälp av ett fritt elektronpar.

i) Elektrofil

Svar:

- Elektrofiler är molekyler eller joner som attraheras av och binder till fria elektroner på andra molekyler/joner (på nukleofiler).
- Elektrofiler är positivt laddade (partiellt eller fullständigt) p.g.a. ett elektronunderskott och attraheras därför av elektroner på andra molekyler/joner.

j) Karbokation

Svar:

- Karbokationer är positivt laddade joner där laddningen sitter på en kolatom.
- Karbokationer är p.g.a. den positiva laddningen och elektronunderskottet på kolatomen mycket reaktiva och fungerar som elektrofiler vid kemiska reaktioner.
- Karbokationer är ofta intermediärer (mellanprodukter) i organiska reaktioner.

2. Vad är skillnaden mellan en reaktionsformel och en reaktionsmekanism?

Svar:

En reaktionsformel visar enbart vilka reaktanter som ingår i reaktionen och vilka produkter som bildas.

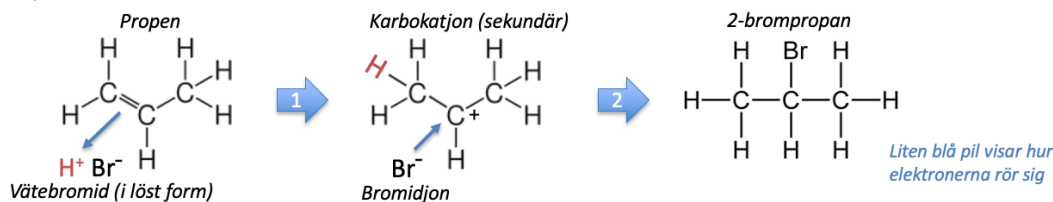
Exempel:



FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

En reaktionsmekanism beskriver stegvis hur en viss kemisk reaktion går till. Reaktionsmekanismerna innefattar hur de kemiska bindningarna förändras, hur det aktiverade komplexet uppstår, hur komplexet ser ut, hur produkterna uppkommer, vilka produkterna blir, samt strukturen av produkterna. I en reaktionsmekanism så ritas elektronernas förflyttningar ut med pilar.

Exempel:



3. Avgör vilka av nedanstående molekyler/joner som kan fungera som nukleofiler vid kemiska reaktioner:

a) Cl^- b) H_2O c) Na^+ d) NH_3 e) CH_3COOH f) CH_3^+

Svar:

Nukleofiler är ofta negativt laddade (partiellt eller fullständigt) och har minst ett fritt elektronpar (eller en s.k. pi-bindning) som kan skapa en bindning till en elektrofil.

Dessa kan fungera som nukleofiler; Cl^- , H_2O , NH_3 och CH_3COOH .

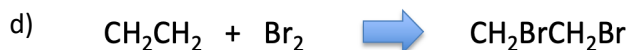
Cl^- : Negativt laddad och har tre fria elektronpar.

H_2O : Syreatomen är partiellt negativt laddad och har två fria elektronpar.

NH_3 : Kväveatomen är partiellt negativt laddad och har ett fritt elektronpar.

CH_3COOH : Båda syreatomerna är partiellt negativt laddade och har två fria elektronpar.

4. Avgör vilken reaktionstypen är:



FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

Svar:

- a) Eliminationsreaktion.
- b) Substitutionsreaktion (S_N2).
- c) Syra-basreaktion (protolysreaktion).
- d) Additionsreaktion.

Substitutionsreaktioner och syra-basreaktioner:

5. Förklara reaktionsmekanismen bakom substitutionsreaktionen mellan CH_3Br och OH^- . Ange även vilka produkter som bildas.

Svar:

Bromatomen i CH_3Br är mer elektronegativt än kolet och drar därför till sig bindningselektronerna lite vilket gör att bromatomen blir partiellt negativt laddad och kolet partiellt positivt laddat. OH^- är en nukleofil eftersom den har en negativ laddning och fria elektronpar på syreatomen. OH^- attraheras av det positiva kolet i CH_3Br och gör en nukleofil attack. Ett av syrets fria elektronpar kommer börja skapa en bindning till kolatomen.

Det har nu bildats ett aktiverat komplex där en bindning mellan kolet och syret i OH^- börjar skapas samtidigt som bindningen mellan kolet och bromatomen börjar brytas. Bindningen mellan kolatomen och brom börjar brytas eftersom det blir för mycket elektroner runt kolatomen som repellerar varandra. Detta tillstånd är svårt att uppnå eftersom att det har hög energi p.g.a. alla elektroner. Det krävs alltså också mycket energi för att uppnå detta tillstånd. Reaktanterna måste träffa varandra i hög hastighet och i rätt vinkel.

OH^- binder till kolatomen och brom släpper fullständigt i form av en bromidjon eftersom den tar med sig bindningselektronerna. Produkterna som bildats är då CH_3OH (metanol) och Br^- (bromidjon).

6. Hur kan vi veta att CH_3Br och OH^- kommer reagera med varandra i en S_N2 -reaktion (och inte i en S_N1 -reaktion) genom att enbart studera de kemiska beteckningarna?

Svar:

Man kan se det eftersom nukleofilen (OH^-) kommer attackera ett primärt kol. Det är inte en massa atomgrupper i vägen (steriskt hinder) som stoppar nukleofilen från att kunna attackera kolatomen, vilket gör att en S_N2 reaktion kan ske.

FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

7. Förklara reaktionsmekanismen bakom S_N1 -reaktionen mellan $\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{Cl}$ och OH^- .

Svar:

I $\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{Cl}$ är klor elektronegativt och drar åt sig bindningselektroner. Detta gör att det centrala kolet blir partiellt positivt laddat.

Det första som händer i reaktionen är att klor lämnar molekylens och blir en kloridjon. Det bildas då en karbokation av molekylens. Karbokationen är plusladdad och väldigt reaktiv.

Detta är det långsamma och hastighetsbestämmande steget. Detta steg är nämligen relativt svårt att få till eftersom det är en laddningsseparation som sker när en negativ resp. positiv jon bildas och separeras från varandra. Karbokationen som bildas är också väldigt reaktiv och energirik. Men desto högre koncentration vi har av ämnet desto fler karbokationer kommer kunna bildas per tidsenhet och därmed kommer steg 2 kunna ske i större utsträckning.

Det som händer sen är att OH^- gör en nukleofil attack på karbokationen och binder till denna. Det bildas då 2-metyl-2-propanol. OH^- är en nukleofil eftersom den har en negativ laddning och fria elektronpar på syreatomen. Detta steg sker väldigt lätt eftersom nukleofilen attraheras väldigt kraftigt av den positiva karbokationen. Detta steg är därför inte hastighetsbestämmande på något sätt.

Produkterna blir alltså; 2-metyl-2-propanol och en kloridjon.

8. Hur kan vi veta att $\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{Cl}$ och OH^- kommer reagera med varandra i en S_N1 -reaktion (och inte i en S_N2 -reaktion) genom att enbart studera de kemiska beteckningarna?

Svar:

Det kan man se genom att det är ett tertiärt kol. S_N1 -reaktioner kan, i jämförelse med S_N2 -reaktioner, ske med tertiära kol eftersom den nukleofila attacken vid S_N1 sker efter att något har lossnat och lämnat molekylens (t.ex. en jon). Då är det steriska hindret mindre och nukleofilen kommer åt att attackera kolatomen.

9. Förklara reaktionsmekanismen bakom syra-basreaktionen mellan OH^- och HCl . Ange även vilka produkter som bildas.

Svar:

I molekylens HCl är Cl elektronegativ och drar åt sig bindningselektronerna som den delar med väteatomen. Detta gör att klor blir partiellt negativt laddat och väte partiellt positivt laddat. OH^- är en kraftig nukleofil (kärnålskare) eftersom den dels är en negativt laddad jon och dels har fria elektronpar på syreatomen.

Syreatomen gör, med ett av sina fria elektronpar, en nukleofil attack på vätet, en bindning börjar skapas.

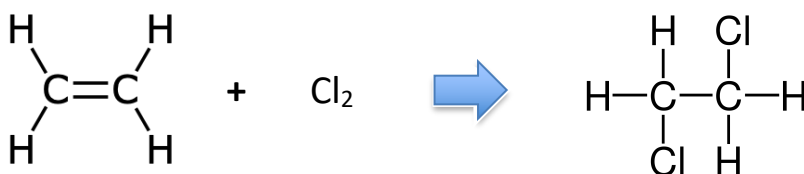
FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

När syret börjar skapa en bindning till vätet, blir det för mycket elektroner runt vätet. Bindningselektronerna mellan H och Cl repelleras och förskjuts fullständigt till Cl.

Cl lämnar i form av en kloridjon och en vattenmolekyl bildas.

Additionsreaktioner:

10. Studera nedanstående bild. Om eten blandas med klorgas så bildas en halogenalkan (1,2 dikloretan). Om istället etan blandas med klorgas (istället för eten) så händer ingenting. Varför då?



Svar:

Förklaringen till varför eten, men inte etan, reagerar med klorgas är att eten är en alken medan etan är en alkan. Alkener och alkyner har dubbel- resp. trippelbindningar vilket gör att dessa är mer reaktionsbenägna i jämförelse med alkaner som enbart har enkelbindningar.

I en dubbelbindning eller trippelbindning finns det alltid ett resp. två elektronpar som är "över" och som därför kan binda till andra atomer i additionsreaktioner. Elektronerna i den eller de "extra" elektronparen i dubbel- resp. trippelbindningarna påverkas inte heller så mycket av atomkärnorna (elektronerna befinner sig inte mellan atomkärnorna) och därför kan de lättare reagera med och binda till andra ämnen.

Eten är en alken och har en dubbelbindning. Dubbelbindningen består av en sigma-bindning mellan atomkärnorna och en pi-bindning där elektronerna inte befinner sig mellan atomkärnorna utan snarare rör sig ovanför och nedanför dessa. Dessa pi-elektroner är därför "över" och sitter betydligt lösare och kan därför lätt binda till sig andra atomer. Därför kan eten delta i additionsreaktioner.

Eftersom samtliga bindningar i en etan är enkelbindningar (sigma-bindningar), så finns det inga elektronpar som är "över", och som därför kan delta i en additionsreaktion.

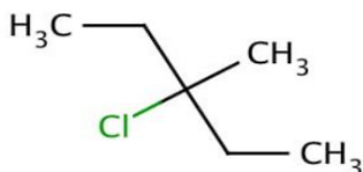
FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

11. Additionsreaktionen mellan 3-metyl-2-penten och HCl kan i teorin ge upphov till 2 olika produkter.

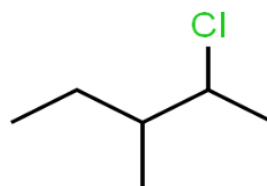
a) Vilka är produkterna? Ange rationellt namn och rita dessa.

Svar:

3-klor-3-metylpentan:



2-klor-3-metylpentan:



b) En av produkterna kommer bildas i mycket större mängd än den andra. Vilken produkt är det och varför kommer den bildas i mycket större mängd?

Svar:

3-klor-3-metylpentan kommer bildas i mycket större mängd.

Intermediären vid bildandet av 3-klor-3-metylpentan är en tertiär karbokation medan det bildas en sekundär karbokation som intermediär vid bildandet av 2-klor-3-metylpentan.

Tertiära karbokationer är mer stabila/mindre reaktiva än sekundära eftersom den positiva kolatomen i en tertiär karbokation binder en extra alkylgrupp.

Desto fler alkylgrupper (kolvätegrupper) som binder den positiva kolatomen, desto stabilare karbokation eftersom kolatomen har fler "kompisar" som kan låna ut sina elektroner så att den positiva laddningen fördelas ut på fler atomer. (Mer fördjupad förklaring finns i svaret till fråga 15). Det krävs därför mindre aktiveringsenergi för tertiära karbokationer att bildas, och det är därför större sannolikhet att dessa bildas. Därför kommer det att bildas nästan enbart 3-klor-3-metylpentan.

FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

- c) Med hjälp av Markovnikovs regel kan man på ett snabbt sätt lista ut vilken av produkterna som lättast bildas. Hur lyder regeln?

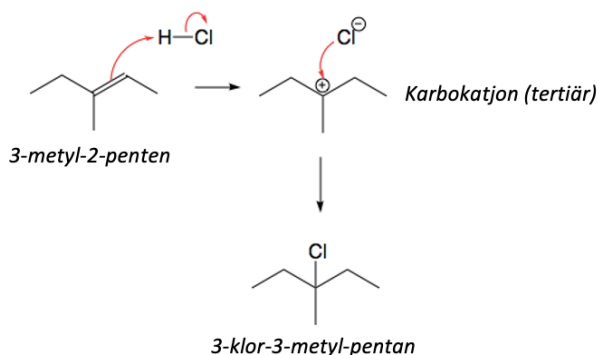
Svar:

Den ryske kemisten Vladimir Markovnikov undersökte en mängd liknande kemiska reaktioner och formulerade en regel; Vid addition av en vätehalogen/vätehalid eller vatten till en alken så kommer vätet hamna på den kolatom vid dubbelbindningen som redan binder flest antal väten (halogenatomen, eller OH-gruppen om det gäller vatten, hamnar därför på den kolatom som binder minst antal väten).

Markovnikovs regel lite annorlunda uttryckt; Vid addition av en vätehalogenid/vätehalid eller av vatten till en alken kommer vätet placeras på den plats som ger upphov till den mest stabila karbokationen.

- d) Förklara och rita ned reaktionsmekanismen för reaktionen. Rita den reaktionsmekanism som ger upphov till den vanligaste produkten.

Svar:



Steg 1 - En karbokation bildas:

- 3-metyl-2-penten är en nukleofil p.g.a. pi-elektronerna i dubbelbindningen. Dessa attraheras av och kan skapa en bindning till elektrofiler. Vätejonen/protonen som avges från väteklorid (en stark syra som protolyseras fullständigt i lösning) fungerar samtidigt som en elektrofil eftersom den är positivt laddad och attraheras av elektroner hos nukleofiler.
- Pi-elektronerna i dubbelbindningen hos 3-metyl-2-penten skapar en bindning till protonen. Det skapas då alltså en bindning mellan protonen och en av kolatomerna i 3-metyl-2-penten. Detta steg kallas ibland för en nukleofil attack och/eller en protonering av alkenen (detta är dock lite inkonsekvent i litteraturen, i vissa källor kallas det t.o.m. för en elektrofil attack eftersom man menar att det är protonen som attackerar dubbelbindningen).

FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

- 3-metyl-2-penten har nu blivit en karbokation eftersom den ena kolatomen i propen nu enbart har tre bindningar. Det kallas för en tertiär karbokation om det tredje kolet i 3-metyl-2-penten bär den positiva laddningen (vilket är fallet i just denna reaktion), eftersom det positiva kolet då binder tre stycken alkylgrupper.
- Detta är det långsamma och hastighetsbestämmande steget eftersom karbokationen som bildas är en reaktiv och energirik intermediär (mellanprodukt). Det krävs därför relativt mycket aktiveringsenergi för att steg 1 ska kunna ske.

Steg 2 – En nukleofil attack sker på karbokationen:

- I steg 2 kommer kloridjonen (nukleofilen) attackera den uppkomna karbokationen (elektrofilen) i en s.k. nukleofil attack. Kloridjonen har fria elektroner som den använder för att skapa en bindning till karbokationen. Detta steg sker väldigt lätt eftersom nukleofilen är negativt laddad, har fria elektroner och attraheras därför väldigt mycket av den positivt laddade karbokationen. Detta steg är därför inte hastighetsbestämmande på något sätt.
- Produkten som bildas är; *3-klor-3-metyl-pentan*.

12. Eten och vatten kan användas för att tillverka (syntetisera) etanol. Men för att reaktionen ska kunna ske måste man använda sig av en syra som katalysator.

a) Skriv en reaktionsformel för reaktionen.



b) Förklara varför en syra behövs för att reaktionen ska kunna ske.

Svar:

Syran behövs i det första steget. Syramolekylerna protolyseras och ger upphov till protoner/vätejoner och dessa är mycket starkare elektrofiler än vattenmolekylerna, p.g.a. sin fullständiga laddning. Dessa kan därför lättare reagera med pi-elektronerna i dubbelbindningen. Syran får då igång reaktionen och möjliggör att steg 2 kan ske.

Syran (t.ex. svavelsyra) fungerar alltså som en katalysator i denna reaktion, genom att protonerna/vätejonerna från syran får igång reaktionen, och sedan återbildas dessa i det sista steget.

c) Vad heter den här typen av reaktion?

Svar: Additionsreaktion.

FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

d) Förklara reaktionsmekanismen.

Svar:

Steg 1 - En karbokatjon bildas:

- Vattenmolekylen kan fungera som både en svag nukleofil (syreatomen) och en svag elektrofil (väteatomerna). Väteatomerna har partiella och därmed relativt svaga positiva laddningar, vilket gör vatten till en svag elektrofil. Därför behövs en stark syra (t.ex. svavelsyra) i det första steget. Syramolekylerna protolyseras och ger upphov till protoner/vätejoner och dessa är mycket starkare elektrofiler p.g.a. sin fullständiga laddning. Dessa kan därför lättare reagera med pi-elektronerna i dubbelbindningen.
- Syran fungerar som en katalysator i denna reaktion, genom att protonerna/vätejonerna från syran får igång reaktionen, och sedan återbildas dessa i det sista steget.
- Eten är en nukleofil p.g.a. pi-elektronerna i dubbelbindningen. Pi-elektronerna i dubbelbindningen skapar en bindning till protonen (elektrofilen) från den starka syran. Det skapas alltså en bindning mellan en proton och en av kolatomerna i eten. Detta steg kallas ibland för en nukleofil attack och/eller en protonering av alkenen (detta är dock lite inkonsekvent i litteraturen, i vissa källor kallas det t.o.m. för en elektrofil attack eftersom man menar att det är protonen som attackerar dubbelbindningen).
- Eten har nu blivit en karbokatjon eftersom den ena kolatomen i eten nu enbart har tre bindningar.
- Detta är det långsamma och hastighetsbestämmande steget eftersom karbokatjonen som bildas är en reaktiv och energirik intermediär (mellanprodukt). Det krävs därför relativt mycket aktiveringsenergi för att steg 1 ska kunna ske.

Steg 2 - En nukleofil attack sker på karbokatjonen:

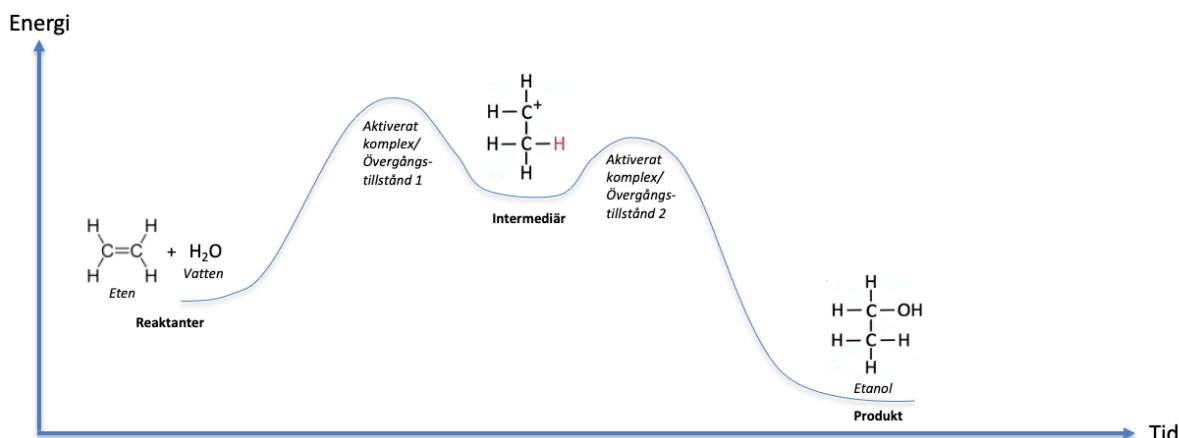
- I steg 2 kommer vattenmolekylen fungera som en nukleofil och göra en nukleofil attack på karbokatjonen (elektrofilen).
- Det är syreatomen i vattenmolekylen som attraheras av karbokatjonen och ett av de fria elektronparen på syreatomen används för att skapa en bindning till karbokatjonen. Detta steg sker väldigt lätt eftersom nukleofilen har en partiell negativ laddning och fria elektroner och attraheras därför väldigt mycket av den positivt laddade karbokatjonen. Detta steg är därför inte hastighetsbestämmande på något sätt.
- När en bindning har skapats mellan syret och en av kolatomerna så kommer en proton/vätejon lossna (deprotonering) från vattenmolekylen och då är det bara en OH-grupp som sitter kvar. Protonen/vätejonen lossnar delvis därför att syret drar till sig bindningselektronerna mellan syret och vätet i vattenmolekylen. Den proton/vätejon som kom från en stark syra och som behövdes för att få igång reaktionen har nu alltså återbildats.
- Produkten som bildas är; *Etanol*.

FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

13. Rita ett energidiagram över additionsreaktionen mellan eten och vatten och förklara varför det första steget i reaktionen bestämmer reaktionshastigheten.

Svar:

Energidiagram över additionsreaktionen mellan eten och vatten:



Reaktionen består av två steg och därför bildas också två aktiverade komplex/övergångstillstånd (transition state). Vätejonen/protonen som avges från en stark syra fungerar som en katalysator och återbildas. Den tas därför inte med som en reaktant eller produkt i energidiagrammet.

Det första steget i reaktionen är det långsamma och hastighetsbestämmande steget eftersom karbokationen som bildas är en reaktiv och energirik intermediär (mellanprodukt). Det krävs därför relativt mycket aktiveringsenergi för att steg 1 ska kunna ske.

14. Förklara reaktionsmekanismen bakom additionsreaktionen mellan eten och brom (Br_2). Ange även vilka produkter som bildas.

Svar:

Steg 1 - En bromoniumjon bildas:

- Eten är en nukleofil p.g.a. pi-elektronerna i dubbelbindningen. Dessa attraheras av och kan skapa en bindning till elektrofiler.
- När Br_2 närmar sig eten kommer elektronerna i dubbelbindningen göra så att den närmsta bromatomen i Br_2 blir partiellt positivt laddad medan den bakre bromatomen blir partiellt negativt laddad (brommolekylen polariseras alltså genom att valenselektronerna repelleras bakåt mot den andra bromatomen).
- Pi-elektronerna i dubbelbindningen skapar en bindning till den främre partiellt positiva bromatomen. Det skapas då alltså en bindning mellan den främre bromatomen och en av kolatomerna. Detta steg kallas ibland för en nukleofil attack

FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

(detta är dock lite inkonsekvent i litteraturen, i vissa källor kallas det t.o.m. för en elektrofil attack eftersom man menar att det är brom som attackerar dubbelbindningen).

- Den främre bromatomen donerar sedan ett av sina fria elektronpar till en bindning med den andra kolatomen vid dubbelbindningen. Den främre bromatomen binder då alltså till båda kolatomerna samtidigt i en "brostruktur". Detta ger i denna reaktion en stabilare intermediär (mellanprodukt), än en karbokation (som annars hade uppstått), eftersom den positiva laddningen kan stabiliseras bättre.
- Nu är det för mycket elektroner runt den främre bromatomen vilket gör att bindningselektronerna mellan de båda bromatomerna förskjuts bakåt till den bakre bromatomen. Den bakre bromatomen släpper då och bildar en bromidjon (negativt laddad p.g.a. att den fick en extra elektron från den främre bromatomen).
- Detta är det långsamma och hastighetsbestämmande steget eftersom bromoniumjonen som bildas är en reaktiv och energirik intermediär (mellanprodukt). Det krävs därför relativt mycket aktiveringsenergi för att steg 1 ska kunna ske.

Steg 2 - En nukleofil attack sker på bromoniumjonen:

- Bromidjonen är en nukleofil och kommer göra en nukleofil attack på den positiva bromoniumjonen. För att bilda produkten måste dock attacken ske på "baksidan" av bromoniumjonen, på en av de kolatomer som binder den positiva bromatomen.
- På baksidan är det steriska hindret minst vilket möjliggör attacken. Kolatomen som attackerar (och även den andra kolatomen) är partiellt positivt laddad eftersom den positiva bromatomen drar åt sig bindningselektronerna från den.
- När bromidjonen attackerar och binder till kolatomen kommer bindningen mellan kolatomen och den positivt laddade bromatomen upphöra ("bron" upphör). Bromatomen får då en elektron från kolatomen och den positiva laddningen upphör.
- Produkt som bildas är; *1,2-dibrometan*.

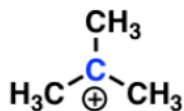
FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

15. Vilken av följande karbokationer är stabilast och varför då?

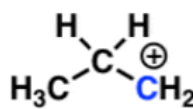
a)



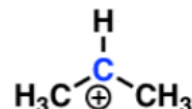
b)



c)



d)



Svar:

Den stabilaste karbokationen är b) eftersom den binder flest alkylgrupper (det är en tertiär karbokation). Desto fler alkylgrupper (kolvätegrupper) som binder den positiva kolatomen, desto stabilare karbokation eftersom kolatomen har fler "kompisar" som kan låna ut sina elektroner så att den positiva laddningen fördelas ut på fler atomer.

Hyperkonjugering stabiliserar karbokationer (fördjupning):

- Alkylgrupper (kolvätegrupper) stabiliserar den positiva laddningen i karbokationer genom att delvis donera elektroner till den positiva kolatomen. Detta gör att den positiva laddningen "smetas ut". Den blir inte koncentrerad till enbart en kolatom utan rör sig mellan flera kolatomer i karbokationen. Karbokationen blir då mindre reaktiv, mindre energirik och därmed mer stabil.
- Sigma-bindningen mellan en atom och en väteatom i en närliggande alkylgrupp ligger i samma plan som den tomma orbitalen (en p-orbital) på den positiva kolatomen och därför kan elektronerna förflyttas mellan dessa. Desto fler närliggande alkylgrupper, desto fler elektroner kan förflyttas och desto fler atomer kan dela på den positiva laddningen, vilket ökar stabiliteten.

Estrars kondensationsreaktion:

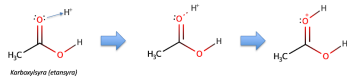
16. Beskriv översiktlig och kortfattat reaktionsmekanismen bakom en esters kondensationsreaktion inkl. vilken typ av ämnen som behövs för att reaktionen ska kunna ske.

Svar:

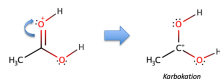
Det behövs en alkohol, en karboxylsyra och en stark syra som katalysator. Karboxylsyran binder en proton och omvandlas till en karbokation. Alkoholen gör nu en nukleofil attack på karboxylsyran så att de binder till varandra. Det sker även en protonöverföring. En vattenmolekyl avspjälkas och det bildas en karbokation igen. En proton lossnar (katalysatorn återbildas) och vi har fått en ester.

Esterreaktionen kan delas in i 5 steg:

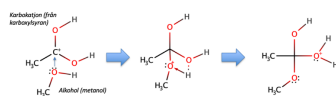
1. Karboxylsyran binder en proton:



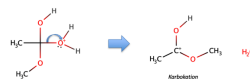
2. Karboxylsyran omvandlas till en karbokation:



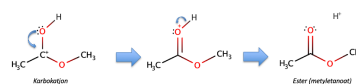
3. Alkoholmolekylen gör en nukleofil attack på karbokationen och en protonöverföring sker:



4. En vattenmolekyl avspjälkas:



5. En proton lossnar (katalysatorn återbildas) och vi har då fått vår färdiga ester:



Reaktionsformeln:



17. En av estrarna som ingår i bananer heter pentylpentanoat. Som kemist har du fått till uppgift att syntetisera denna ester. Estern kommer sedan användas av en godisfabrik vid tillverkningen av skumbananer.

- a) Vilka ämnen behöver du för din syntes?

Svar:

Pentanol, pentansyra och en stark syra som katalysator (ofta koncentrerad svavelsyra).

- b) Vid syntesen av estrar krävs en stark syra som katalysator. Förklara översiktligt varför syran behövs för att reaktionen ska kunna ske.

Svar:

Den starka syran avger en proton/vätejon till karboxylsyrans dubbelbundna syreatom. Det kommer innebära att karboxylsyran omvandlas till en karbokation. Karbokationer är positivt laddade och därför kommer nu syret i alkoholens OH-grupp kunna attraheras av och reagera med den. En bindning uppstår därför mellan karboxylsyran/karbokationen och alkoholen. Utan den starka syran sker inte detta, vilket betyder att den behövs för att starta reaktionen.

- c) Beskriv ingående och steg för steg hur esterreaktionen går till.

Svar:

- Karboxylsyran binder en proton:** Ett fritt elektronpar på karboxylsyrans dubbelbundna syreatom attraheras av protonen från en stark syra (ofta koncentrerad svavelsyra), attackerar och skapar en bindning till denna genom en nukleofil attack. Karboxylsyror avger i vanliga fall protoner (och tar inte upp dessa!), men den starka syran är mycket bättre än den svaga karboxylsyran på att avge protoner, så här vinner den starka syran "matchen" om att få avge en proton. Karboxylsyran blir därför mottagare av protonen i

FACIT: REAKTIONSTYPER OCH REAKTIONSMEKANISMER

denna reaktion. När protonen fäster till syreatomen blir syreatomen positivt laddat eftersom syreatomen nu endast har 5 egna valenselektroner (eftersom den har "lånat ut" en elektron till väteatomen). Man säger att den "formella laddningen" är +1.

- Karboxylsyran omvandlas till en karbokatjon:** Det partiellt positiva syret kommer nu attrahera 2 bindningselektroner från dubbelbindningen med kolatomen. Detta leder till att kolatomen förlorar elektroner och istället blir positivt laddat. Den formella laddningen på kolatomen är +1. Karboxylsyran har då omvandlats till en s.k. karbokatjon (jon med en positiv laddning på en kolatom). Karbokatjonen är väldigt reaktiv och därför säger vi nu att reaktanten är aktiverad. Den starka syran har fått karboxylsyran aktiverad och redo för att reagera med alkoholen!
- Alkoholmolekylen gör en nukleofil attack på karbokatjonen och en protonöverföring sker:** En alkoholmolekyl (metanol i det här exemplet) binder till karbokatjonen genom att ett fritt elektronpar på syreatomen i OH-gruppen attraheras av den positiva kolatomen, gör en nukleofil attack, och skapar en bindning till denna. Nu blir dock syreatomen positivt laddad eftersom den bara har 5 egna valenselektroner. Den formella laddningen på syreatomen är +1. Nu sker en protonöverföring från en syreatom till en annan. Det positiva syret drar åt sig elektronerna från protonen vilket försvagar bindningen till protonen och gör att protonen ganska enkelt kan "lossna". Det andra syret kommer sedan attraheras av protonen och skapa en bindning till denna.
- En vattenmolekyl avspjälkas:** När syret tar upp protonen blir syret positivt laddat eftersom den nu endast har 5 egna valenselektroner. Den formella laddningen på syreatomen är +1. Den positiva laddningen på syret kommer dra åt sig bindningselektronerna som sitter mellan kolet och syret vilket leder till att syret och de två väteatomerna (en vattenmolekyl) släpper. Kvar blir då återigen en positivt laddad karbokatjon.
- En proton lossnar (katalysatorn återbildas) och vi har då fått vår färdiga ester:** Det positiva kolet drar åt sig elektroner från syret, vilket nu istället innebär att syret blir positivt laddad. Det positivt laddade syret kommer nu dra åt sig bindningselektronerna mellan syret och vätet vilket gör att vätet lossnar i form av en proton (eftersom elektronen stannar kvar hos syret). Anjonen från syran (den negativa jonen som återstår efter att en proton har lossnat från syran) kan nu plocka upp protonen och återbildas till en vanlig syra igen. Vi har därmed fått vår ester och vi kan även se att syran inte förbrukas utan fungerar enbart som en katalysator!