



REAKTIONSMEKANISMEN BAKOM  
SUBSTITUTIONSREAKTIONER ( $S_N1$  OCH  $S_N2$ )  
NIKLAS DAHRÉN

# Nukleofiler, elektrofiler och karbokationer

- ✓ **Nukleofil ("kärnälskare"):** Nukleofiler är ämnen (molekyler eller joner) som attraheras av positiv laddning. Nukleofiler är "elektronrika" och har minst ett fritt elektronpar (alt. en dubbel eller trippelbindning). De är också ofta negativt laddade p.g.a. att de har fått ett elektronöverskott. Det fria elektronparet kan de använda för att "attackera" och skapa bindningar till fullständigt eller partiellt positivt laddade ämnen, s.k. elektrofiler.

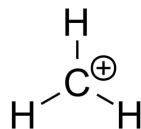
*Exempel på nukleofiler:*       $\text{OH}^-$  (syreatomen)       $\text{H}_2\text{O}$  (syreatomen)       $\text{NH}_3$  (kväveatomen)       $\text{Cl}^-$

- ✓ **Elektrofil ("elektronälskare"):** Elektrofiler är ämnen (molekyler eller joner) som attraheras av negativ laddning. De attraheras av ämnen som har fria elektroner och extra mycket om ämnet har ett elektronöverskott så att en negativ laddning uppstår. Elektrofilerna består av eller innehåller atomer som är fullständigt eller partiellt positivt laddade eftersom de har fått ett elektronunderskott.

*Exempel på elektrofiler:*       $\text{H}^+$        $\text{HBr}$  (vävet)       $\text{CH}_3\text{Cl}$  (kolet)

**OBS:** Vissa ämnen kan fungera som både nukleofiler och elektrofiler eftersom olika atomer i molekylen kan ha olika egenskaper.

- ✓ **Karbokatjon:** En karbokatjon är en positivt laddad jon med laddningen koncentrerad på en kolatom. Karbokationer uppkommer som intermediärer (övergångsprodukter/mellansteg) i organiska reaktioner. De är mycket reaktiva p.g.a. den starka positiva laddningen och har därför väldigt kort livstid. Karbokationer kan fungera som elektrofiler eftersom de har en positivt laddad kolatom.



# Substitutionsreaktioner

- ✓ **Vad menas med en substitutionsreaktion?:** Vid en substitutionsreaktion byts en atom eller en atomgrupp i en molekyl ut mot en annan atom eller atomgrupp.
- ✓ **Nukleofil substitutionsreaktion:** Vid en nukleofil substitutionsreaktion är den ena reaktanten en nukleofil och utför en nukleofil attack på den andra reaktanten (elektrofilen).
- ✓ **Exempel på en nukleofil substitutionsreaktion (en  $S_N1$ -reaktion):**



*Halogenalkanen 2-klor-2-metylpropan reagerar med en hydroxidjon och bildar alkoholen 2-metyl-2-propanol (i en  $S_N1$ -reaktion).*

- ✓ **Exempel på en nukleofil substitutionsreaktion (en  $S_N2$ -reaktion):**



*Halogenalkanen klormetan reagerar med en hydroxidjon och bildar alkoholen metanol (i en  $S_N2$ -reaktion).*

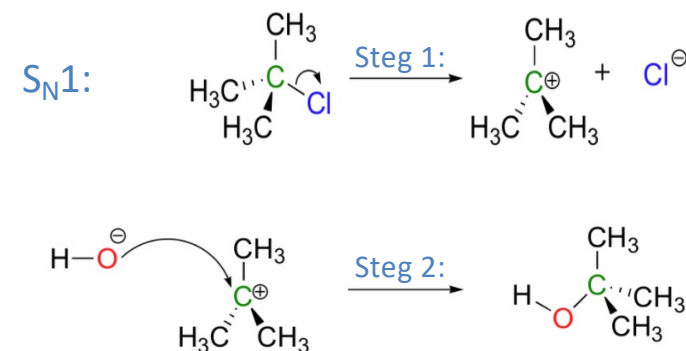
# Sammanfattning av S<sub>N</sub>1 och S<sub>N</sub>2-reaktioner

## S<sub>N</sub>1-reaktioner:

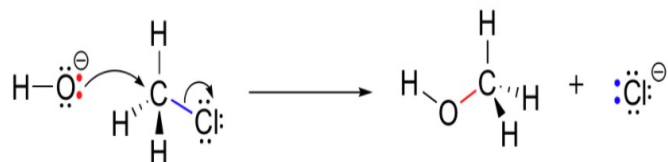
**S<sub>N</sub>**: Nukleofil substitutionsreaktion (S = Substitutionsreaktion, N = Nukleofil attack).

**1:** Detta är en s.k. monomolekylär reaktion där enbart den ena av de två reaktanterna (ej nukleofilen) deltar i det hastighetsbestämmande första reaktionssteget (totalt är det två reaktionssteg vid en S<sub>N</sub>1-reaktion).

**Reaktionsmekanism:** Reaktionen sker i 2 steg. I steg 1 lossnar den lämnande gruppen (halogenen) i form av en negativ jon och det skapas en karbokation, i steg 2 attackerar nukleofilen karbokationen och skapar en bindning.



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



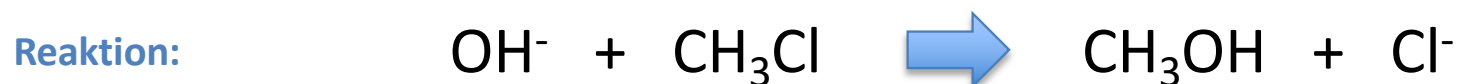
## S<sub>N</sub>2-reaktioner:

**S<sub>N</sub>**: Nukleofil substitutionsreaktion (S = Substitutionsreaktion, N = Nukleofil attack).

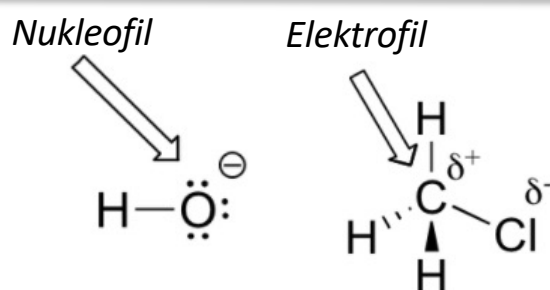
**2:** Detta är en s.k. bimolekylär reaktion där båda reaktanterna deltar i det hastighetsbestämmande reaktionssteget (vilket också är det enda reaktionssteget som sker vid en S<sub>N</sub>2-reaktion).

**Reaktionsmekanism:** Reaktionen sker i 1 steg. Nukleofilen attackerar elektrofilen (halogenalkanen) bakifrån och börjar skapa en bindning, samtidigt som den lämnande gruppen (halogenen) lossnar framtill i form av en negativ jon.

# Reaktionsmekanismen bakom S<sub>N</sub>2-reaktionen mellan klormetan och OH<sup>-</sup>

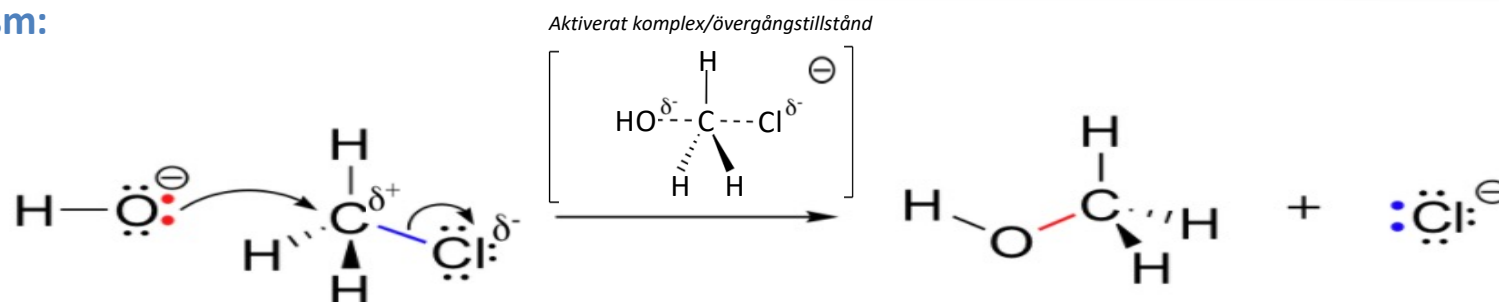


Förutsättningar:



I CH<sub>3</sub>Cl har Cl hög elektronegativitet och drar åt sig elektronerna som den delar med kolatomen. Detta gör att klor blir partiellt minusladdat och kol partiellt plusladdat. Det positiva kolet gör att CH<sub>3</sub>Cl kan fungera som elektrofil i denna reaktion. OH<sup>-</sup> är en bra nukleofil eftersom den dels har fria elektronpar på syreatomen och dels är en negativt laddad jon.

Reaktionsmekanism:



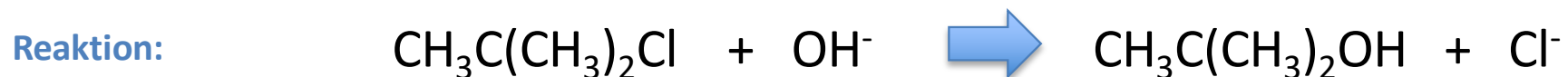
Syreatomen gör en nukleofil attack på kolatomen och en bindning börjar skapas. När syret börjar skapa en bindning till kolet blir det för mycket elektroner runt kolet. Bindningen mellan C och Cl börjar då upplösas genom att bindningselektronerna förskjuts ännu mer mot Cl. Vi har nu fått ett s.k. *aktiverat komplex/övergångstillstånd*. Till slut är bindningen mellan O och C klar och samtidigt lämnar Cl i form av en kloridjon, Cl<sup>-</sup>. Allt detta sker i ett enda steg.

# Reaktionsmekanismen bakom S<sub>N</sub>2-reaktionen mellan klormetan och OH<sup>-</sup>

✓ Allt detta sker i ett och samma steg:

- **Nukleofil attack:** OH<sup>-</sup> fungerar som en nukleofil och attraheras av den partiellt positiva laddningen på kolatomen i klormetan. Klormetan fungerar som en elektrofil i denna reaktion tack vare den partiellt positivt laddade kolatomen. OH<sup>-</sup> utför en nukleofil attack på kolatomen. Varför är kolatomen partiellt positivt laddad? Jo, därför att kloratomen i CH<sub>3</sub>Cl är mer elektronegativ än kolatomen i samma molekyl och drar därför åt sig bindningselektronerna litegrann, vilket leder till att kolet blir lite partiellt positivt laddat och kloratomen negativt laddad.
- **Aktiverat komplex/övergångstillstånd:** Ett aktiverat komplex/övergångstillstånd har nu bildats där en ny bindning börjar bildas medan en gammal bindning börjar försvagas. Den nukleofila attacken leder nämligen till att det börjar skapas en polär kovalent bindning mellan syret i OH<sup>-</sup> och kolatomen. Samtidigt leder detta till att bindningen mellan kolatomen och kloratomen försvagas ännu mer eftersom det nu är för många elektroner runt kolatomen (de många elektronerna repellerar varandra). Det aktiverade komplexet/övergångstillståndet har mycket hög energi eftersom det är många elektroner som repellerar varandra. Det krävs därför att partiklarna krockar med varandra i rätt vinkel och med tillräckligt hög hastighet för att det aktiverade komplexet/övergångstillståndet ska kunna uppstå. Det krävs alltså relativt mycket aktiveringsenergi för att det aktiverade komplexet/övergångstillståndet ska kunna uppstå.
- **Produkter bildas:** Tillslut är bindningen mellan OH<sup>-</sup> och kolatomen klar, och bindningen mellan kol och klor har upplösts. Kloratomen har då lossnat och lämnat i form av en kloridjon, Cl<sup>-</sup> (den tar med sig bindningselektronerna och får därmed ett elektronöverskott). En metanolmolekyl och en kloridjon har nu bildats.

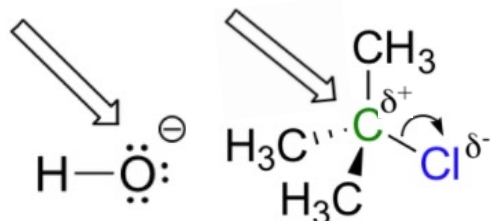
# Reaktionsmekanismen för S<sub>N</sub>1-reaktionen mellan 2-klor-2-metylpropan och OH<sup>-</sup>



Förutsättningar:

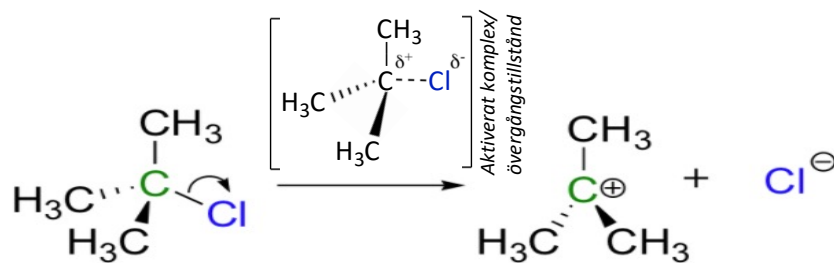
Nukleofil

Elektrofil

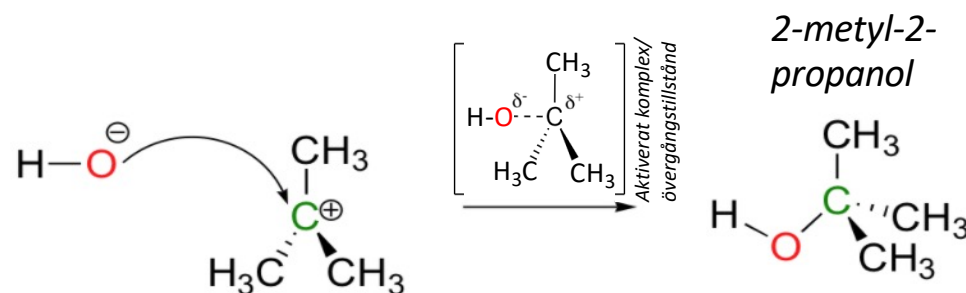


I  $\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{Cl}$  är Cl elektronegativ och drar åt sig elektronerna som den delar med kolatomen. Detta gör att klor blir partiellt minusladdat och kol partiellt plusladdat. Det positiva kolet gör att  $\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{Cl}$  kan fungera som elektrofil i denna reaktion.  $\text{OH}^-$  är en kraftig nukleofil eftersom den dels är en negativt laddad jon och dels har fria elektronpar på syreatomen.

Reaktionsmekanism:



**Steg 1:** Kloratomen drar fullständigt åt sig elektronerna, som den delar med kolatomen, och lämnar i form av en kloridjon. Kvar blir då en intermediär i form av en karbokation som är en plusladdad och reaktiv partikel.



**Steg 2:** Syreatomen i  $\text{OH}^-$  gör en nukleofil attack på kolatomen i karbokationen, en bindning skapas. *2-metyl-2-propanol* har då bildats.

# Reaktionsmekanismen för S<sub>N</sub>1-reaktionen mellan 2-brom-2-metylpropan

## ✓ Steg 1 (det långsamma steget) - En karbokation bildas som intermediär:

- Först lämnar klor molekylens i form av en kloridjon, varpå en karbokation bildas. Karbokationen är en plusladdad och reaktiv partikel. Kloridjoner är stabila och kan binda med starka jon-dipolbindningar till vattenmolekyler, så därför sker det ibland spontant att t.ex. klor lossnar från föreningar och bildar kloridjoner.
- Karbokationen räknas som en *intermediär* (en instabil och mycket reaktiv mellanprodukt vid kemiska reaktioner).
- 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. 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.

## ✓ Steg 2 (det snabba steget) - En nukleofil attack sker:

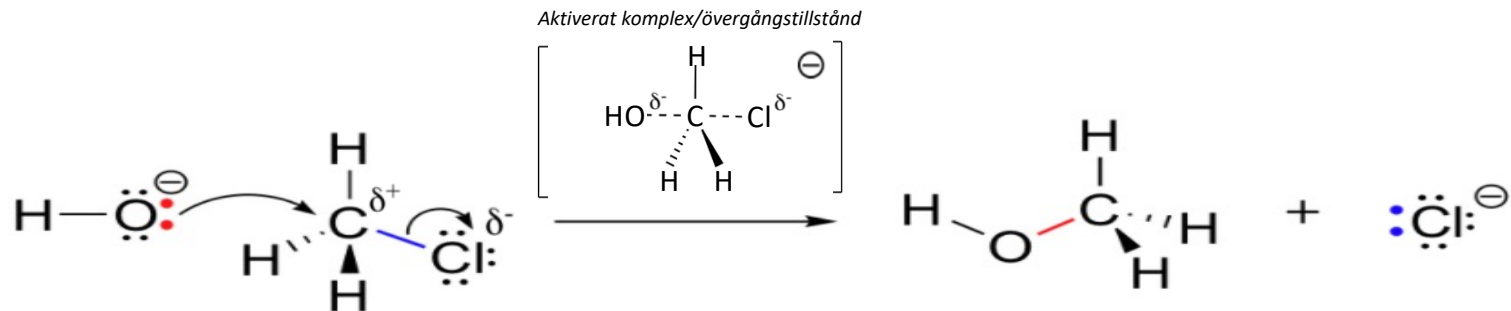
- I steg 2 kommer nukleofilen (hydroxidjonen) attackera den uppkomna karbokationen. Detta steg sker väldigt lätt eftersom nukleofilen attraheras väldigt kraftigt av den positiva karbokationen. Detta steg är därför inte hastighetsbestämmande på något sätt.



# Reaktionshastigheten i en S<sub>N</sub>2-reaktion bestäms av två reaktanter

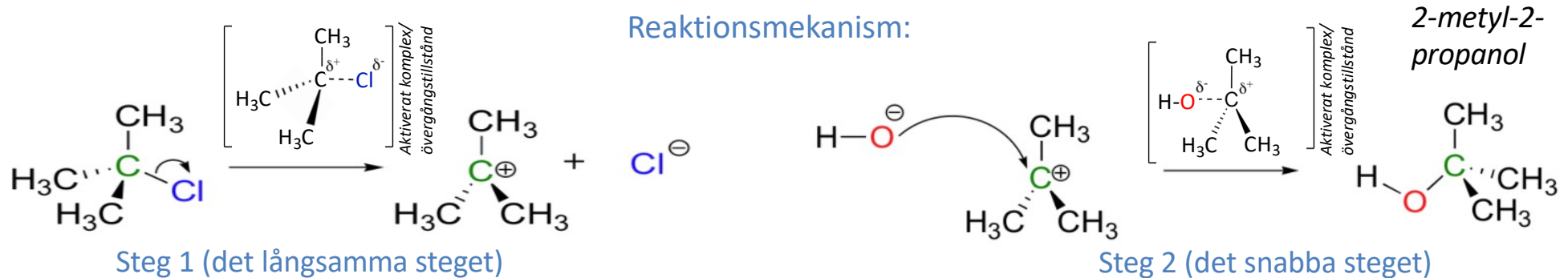
- ✓ S<sub>N</sub>2-reaktioner är s.k. *bimolekylära reaktioner*, vilket innebär att båda reaktanterna deltar i det hastighetsbestämmande reaktionssteget (vilket också är det enda steget i denna reaktion!).
- ✓ Eftersom båda reaktanterna reagerar i det första (och enda reaktionssteget) innebär det att koncentrationen av båda reaktanterna påverkar reaktionshastigheten. Ökar vi koncentrationen av någon av reaktanterna så kommer fler krockar ske mellan de båda reaktanterna per tidsenhet, vilket ökar reaktionshastigheten.

Reaktionsmekanism:

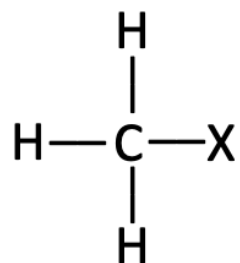


# Reaktionshastigheten i en S<sub>N</sub>1-reaktion bestäms av enbart en reaktant

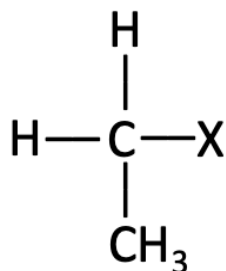
- ✓ S<sub>N</sub>1-reaktioner är s.k. *monomolekylära reaktioner*, vilket innebär att det enbart är en reaktant (elektrofilen) som deltar i det hastighetsbestämmande första reaktionssteget. S<sub>N</sub>1-reaktionen är indelad i två steg varav steg 1 är mycket långsammare än steg 2, och i det första steget deltar alltså enbart elektrofilen (halogenalkanen). Därför är det endast koncentrationen av elektrofilen (halogenalkanen) som påverkar reaktionshastigheten i en S<sub>N</sub>1-reaktion. Koncentrationen av nukleofilen spelar faktiskt ingen roll, så länge det finns något av den! Om koncentrationen av elektrofilen är hög går reaktionen fortare och om den är låg går reaktionen långsammare.
- ✓ I steg 1 lossnar den *lämnande gruppen* (halogenen) på egen hand från elektrofilen och det bildas en karbokation. Detta sker dock mycket långsamt (laddningsseparationen är svår att få till) och kräver relativt mycket aktiveringsenergi. När det väl har skett så går steg 2 väldigt snabbt. Karbokationen är positivt laddad och väldigt reaktiv vilket innebär att nukleofilen och karbokationen reagerar väldigt enkelt och snabbt med varandra.



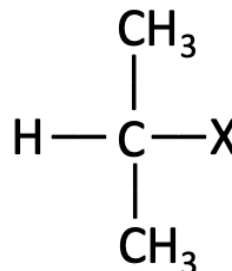
# Olika typer av kolatomer påverkar det steriska hindret



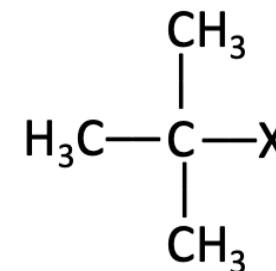
*Metylkol  
(inget steriskt hinder)*



*Primärt kol  
(litet steriskt hinder)*



*Sekundärt kol  
(steriskt hinder)*

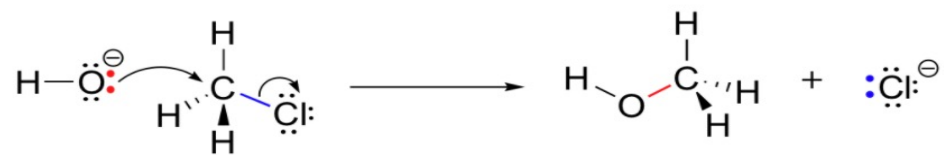


*Tertiärt kol  
(stort steriskt hinder)*

- **Metylkol:** Den kolatom som binder halogenen (X) binder ingen alkylgrupp (kolvätegrupp) utan enbart väteatomer.
- **Primärt kol:** Den kolatom som binder halogenen (X) binder en alkylgrupp (kolvätegrupp).
- **Sekundärt kol:** Den kolatom som binder halogenen (X) binder två alkylgrupper (kolvätegrupper).
- **Tertiärt kol:** Den kolatom som binder halogenen (X) binder tre alkylgrupper (kolvätegrupper).
- **Steriskt hinder:** Ett steriskt hinder innebär i detta fall att det sitter atomer/atomgrupper i vägen så att nukleofilen har svårare att attackera kolatomen i halogenalkanen.

# $S_N2$ sker framförallt när vi har metylkol eller primära kol p.g.a. litet steriskt hinder

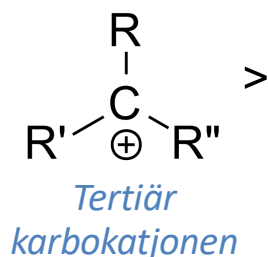
- ✓  **$S_N2$ -reaktioner sker lättast med metylkol och primära kol:**  $S_N2$ -reaktioner sker lättast när vi har ett metylkol eller ett primärt kol som nukleofilen attackerar (dock allra snabbast på metylkol). Vi har då inget eller ett litet steriskt hinder som stoppar nukleofilen från att kunna attackera substratet.
- ✓  **$S_N2$ -reaktioner sker inte med tertiära kol:**  $S_N2$ -reaktioner kan inte ske med tertiära kol p.g.a. stort steriskt hinder. Nukleofilen kan inte komma åt att attackera om det sitter för mycket atomer/atomgrupper i vägen.
- ✓  **$S_N2$ -reaktioner kan ske med sekundära kol:**  $S_N2$ -reaktioner kan ske till viss del med sekundära kol men reaktionen är betydligt långsammare jämfört med på primära kol, eftersom det steriska hindret är större. Det steriska hindret är dock mindre jämfört med tertiära kol.



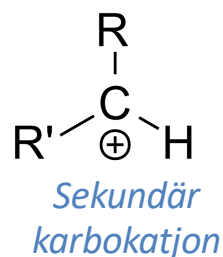
*$S_N2$  på ett metylkol*

# Stabiliteten av olika karbokationer avgör hur lätt en S<sub>N</sub>1-reaktion kan ske

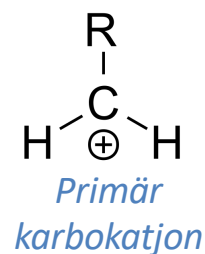
*Mest stabila  
karbokationen  
(kräver lite  
aktiveringsenergi  
för att bildas)*



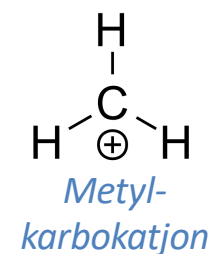
>



>



>



*Mest reaktiva  
karbokationen  
(kräver mycket  
aktiveringsenergi  
för att bildas)*

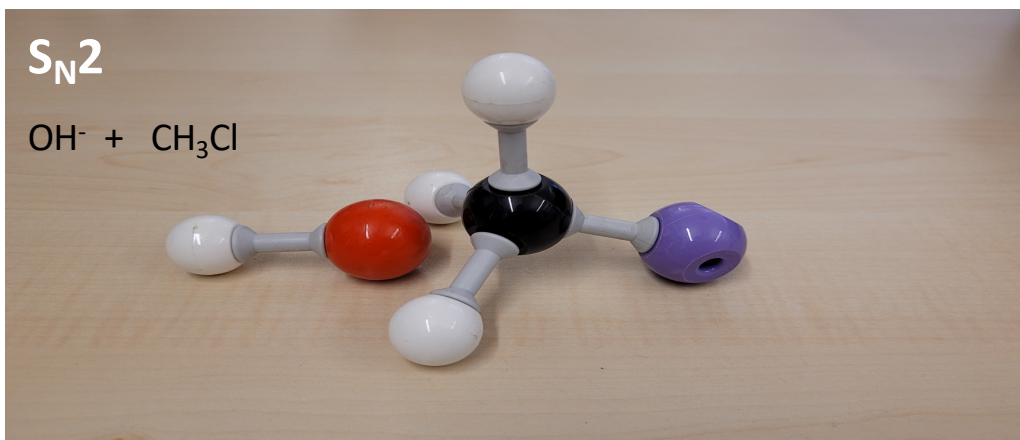
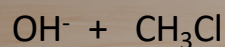
- ✓ **Högre substitutionsgrad (fler alkylgrupper) ger stabilare karbokationer:** Desto fler alkylgrupper (kolvätegrupper) som binder den positiva kolatomen i karbokationen, desto stabilare karbokation eftersom kolatomen har fler "cola kompisar" som kan låna ut sina elektroner så att den positiva laddningen fördelas ut (smetas ut) på fler atomer. Karbokationen blir då inte lika reaktiv. Stabilare karbokationer (framförallt tertiära) bildas lättare eftersom det krävs mindre aktiveringsenergi för att den lämnande gruppen (halogenen i form av en negativ jon) ska kunna lossna.
- ✓ **S<sub>N</sub>1-reaktioner sker nästan aldrig med metylkol eller primära kol** eftersom det då skulle bildas en mycket reaktiv karbokation som attraherar den lämnande gruppen för mycket. Lossnar den lämnande gruppen så tas den snabbt tillbaka. Det krävs för mycket aktiveringsenergi för att den ska lossna fullständigt och inte tas tillbaka.
- ✓ **S<sub>N</sub>1-reaktioner sker lättast med tertiära kol** eftersom det då bildas en stabil tertiär karbokation som är relativt dålig på att attrahera och ta tillbaka den lämnande gruppen. Det krävs därför lite aktiveringsenergi för att dessa ska bildas.

# $S_N1$ sker framförallt när vi har ett tertiärt kol

- ✓  **$S_N1$ -reaktioner sker lättast med tertiära kol:**  $S_N1$ -reaktioner sker med tertiära kol eftersom den nukleofila attacken vid  $S_N1$  sker efter att den lämnande gruppen (halogenen i form av en negativ jon) har lämnat molekylen. Då är det steriska hindret mindre och nukleofilen kommer åt att attackera.  $S_N1$ -reaktioner sker även snabbast på tertiära kol eftersom att karbokationen (som enbart bildas vid  $S_N1$ ) lättare uppkommer när det är tertiära kol. Karbokationen uppkommer lättare eftersom vi av olika anledningar då får en mycket stabilare karbokation som kräver mindre aktiveringsenergi för att bildas. En viktig anledning till den ökade stabiliteten är att den positiva laddningen kan spridas ut på de omgivande kolatomerna, vilket gör att den lämnande gruppen inte känner av den positiva laddningen lika mycket. En stabilare karbokation innebär alltså att den negativa jonen lättare lossnar i steg 1 och att den inte tas tillbaka lika lätt efter att den har lämnat.
- ✓  **$S_N1$ -reaktioner sker inte med metylkol och primära kol:**  $S_N1$ -reaktioner sker nästan aldrig med metylkol och primära kol p.g.a. att den karbokation som i så fall skulle uppstå är mycket reaktiv. Skulle den lämnande gruppen lyckas lämna så kommer karbokationen snabbt plocka upp och binda den igen. Den positiva laddningen är koncentrerad till enbart en eller två kolatomer vilket gör att den negativa jonen känner av laddningen mycket mer.
- ✓  **$S_N1$ -reaktioner kan ske med sekundära kol:**  $S_N1$ -reaktioner kan ske på sekundära kol men reaktionen är betydligt långsammare jämfört med på tertiära kol. Reaktionen kräver mer aktiveringsenergi för att kunna ske. Anledningen är att den karbokation som uppstår är sekundär och inte lika stabil som tertiära karbokationer. Den positiva laddningen kan inte spridas ut på lika många omgivande kolatomer, vilket gör att den lämnande gruppen känner av den positiva laddningen mycket mer. Sekundära karbokationer har därför svårare att bildas.

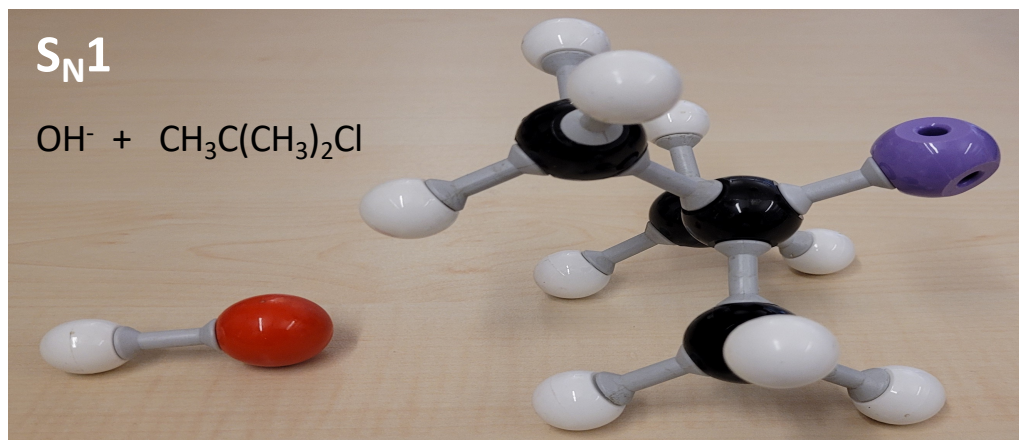
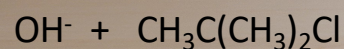
# Jämförelse mellan S<sub>N</sub>2 och S<sub>N</sub>1

S<sub>N</sub>2



- Inget steriskt hinder, vilket innebär att nukleofilen (OH<sup>-</sup>) kan attackera den partiellt positiva kolatomen i den andra reaktanten (halogenalkanen) utan att den lämnande gruppen (halogenen) behöver lossna först.
- Reaktionen sker i ett enda steg; de nya bindningarna börjar skapas samtidigt som de gamla börjar lossna.
- Båda reaktanterna reagerar i det första (och enda reaktionssteget) vilket innebär att koncentrationen av båda reaktanterna påverkar reaktionshastigheten. Ökar vi koncentrationen av någon av reaktanterna så kommer fler krockar ske mellan de båda reaktanterna per tidsenhet vilket ökar reaktionshastigheten.

S<sub>N</sub>1



- Här finns ett tydligt steriskt hinder, nukleofilen (OH<sup>-</sup>) kan inte attackera den centrala positiva kolatomen.
- Den lämnande gruppen (halogenen) måste först lossna för att öppna upp molekylen och minska det steriska hindret.
- I nästa steg kan sedan den nukleofila attacken ske (på den uppkomna karbokationen).
- Reaktionen sker alltså i två steg, varav det första steget är mycket långsammare än det andra steget.
- Enbart den ena reaktanten (halogenalkanen) reagerar i det första och hastighetsbestämmande steget, vilket innebär att det är enbart koncentrationen av den reaktanten (ej nukleofilen) som påverkar reaktionshastigheten.

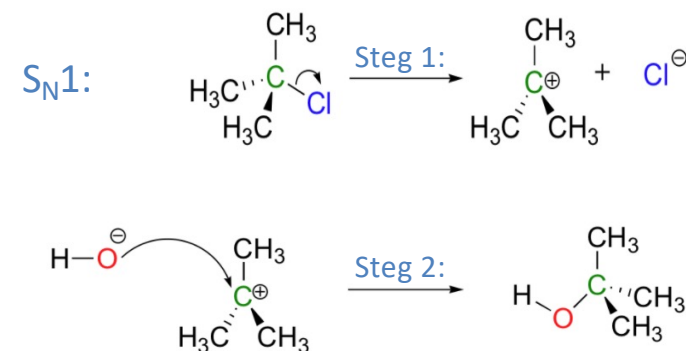
# Sammanfattning av S<sub>N</sub>1 och S<sub>N</sub>2-reaktioner

## S<sub>N</sub>1-reaktioner:

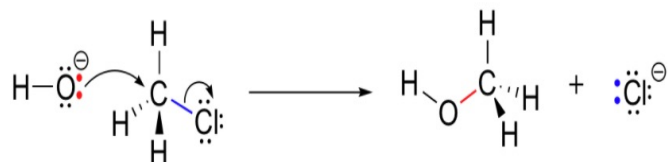
**S<sub>N</sub>**: Nukleofil substitutionsreaktion (S = Substitutionsreaktion, N = Nukleofil attack).

**1:** Detta är en s.k. monomolekylär reaktion där enbart den ena av de två reaktanterna (ej nukleofilen) deltar i det hastighetsbestämmande första reaktionssteget (totalt är det två reaktionssteg vid en S<sub>N</sub>1-reaktion).

**Reaktionsmekanism:** Reaktionen sker i 2 steg. I steg 1 lossnar den lämnande gruppen (halogenen) i form av en negativ jon och det skapas en karbokation, i steg 2 attackerar nukleofilen karbokationen och skapar en bindning.



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



## S<sub>N</sub>2-reaktioner:

**S<sub>N</sub>**: Nukleofil substitutionsreaktion (S = Substitutionsreaktion, N = Nukleofil attack).

**2:** Detta är en s.k. bimolekylär reaktion där båda reaktanterna deltar i det hastighetsbestämmande reaktionssteget (vilket också är det enda reaktionssteget som sker vid en S<sub>N</sub>2-reaktion).

**Reaktionsmekanism:** Reaktionen sker i 1 steg. Nukleofilen attackerar elektrofilen (halogenalkanen) bakifrån och börjar skapa en bindning, samtidigt som den lämnande gruppen (halogenen) lossnar framtill i form av en negativ jon.



# Repetera:

✓ **Förklara följande begrepp:**

- Reaktionsmekanism
- Substitutionsreaktion
- Nukleofil substitutionsreaktion
- Nukleofiler
- Elektrofiler
- Karbokatjoner
- Primära, sekundära och tertiära halogenalkaner
- Primära, sekundära och tertiära karbokatjoner

✓ **Förklara följande begrepp:**

- Aktiverat komplex/övergångstillstånd
- Monomolekylär reaktion
- Bimolekylär reaktion
- $S_N1$ -reaktioner
- $S_N2$ -reaktioner
- Lämnande grupp
- Nukleofil attack
- Steriskt hinder



**Se gärna fler filmer på:**  
[kemilektioner.se](http://kemilektioner.se)  
[youtube.com/kemilektioner](https://youtube.com/kemilektioner)