



TÁMOP-4.1.1.F-14/1/KONV-2015-0006

SZTE TTIK, KTCS, 1a) Duális és moduláris
képzésfejlesztés a mesterképzéshez

Aromás elektrofil szubsztitúció

Pálinkó István, egyetemi tanár

SZÉCHENYI 2020



MAGYARORSZÁG
KORMÁNYA

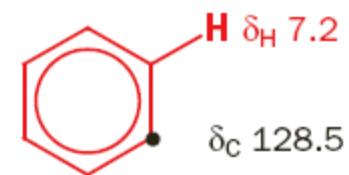
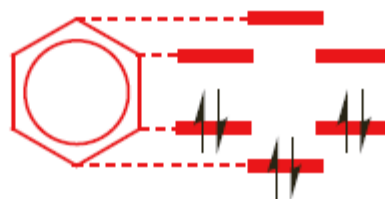
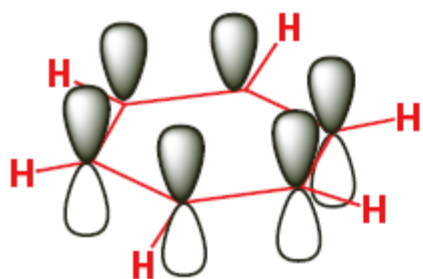
Európai Unió
Európai Szociális
Alap



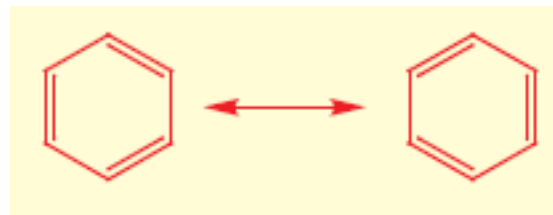
BEFEKTETÉS A JÖVŐBE

az alapvegyület a benzol

MO modell



VB modell

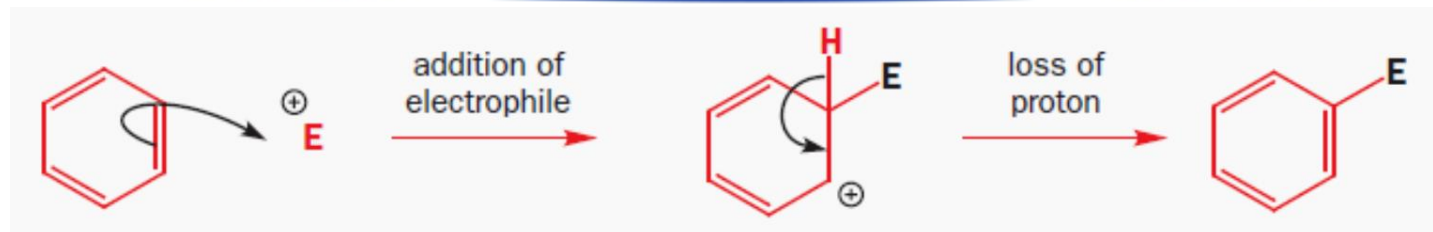




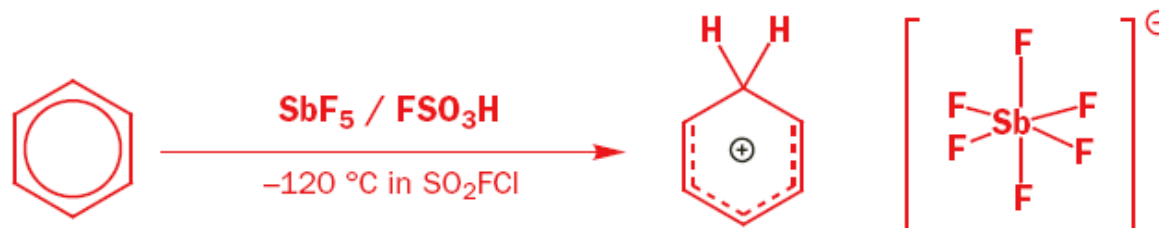
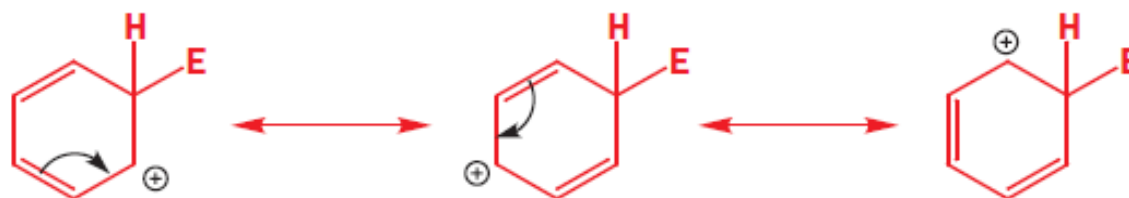
Benzene can be persuaded to react with bromine if a Lewis acid catalyst such as AlCl_3 is added. The product contains bromine but is not from either *cis* or *trans* addition.

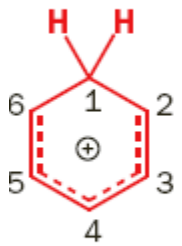
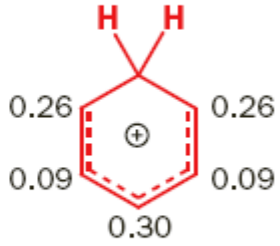


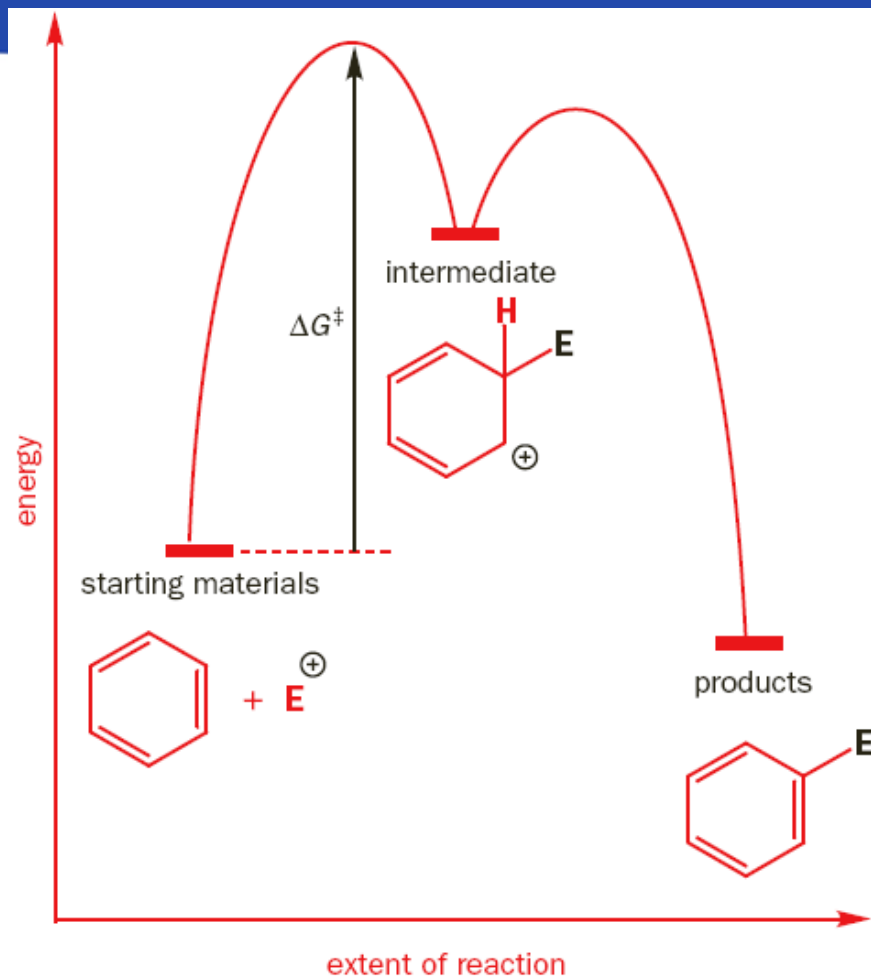
általános mechanizmus



σ -komplex vagy Wheland intermedier



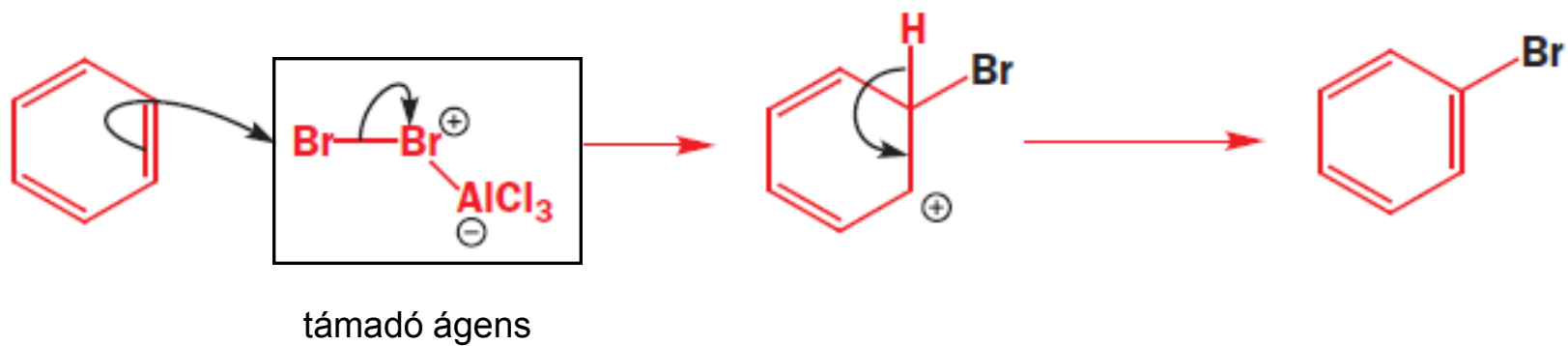
Compound	Position	δ_{H} , p.p.m.	δ_{C} , p.p.m.	Calculated charge distribution
	1	5.6	52.2	
	2, 6	9.7	186.6	
	3, 5	8.6	136.9	
	4	9.3	178.1	
benzene		7.33	129.7	



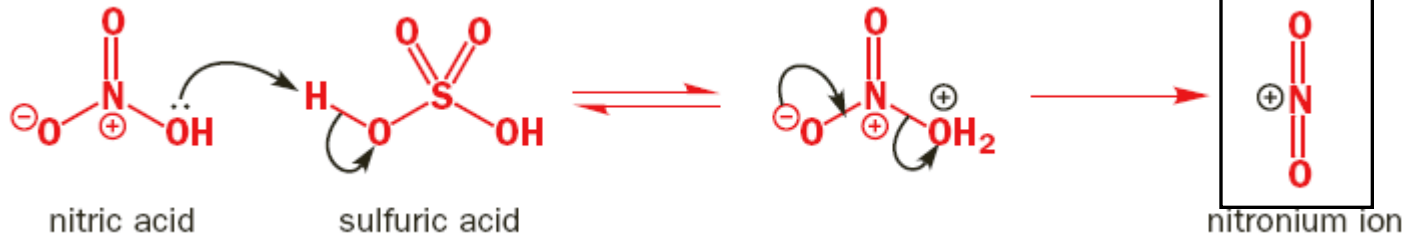
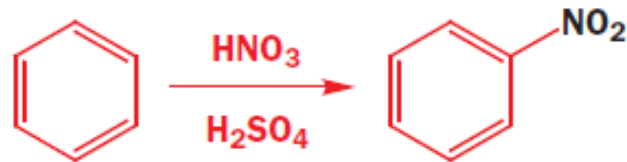
halogénezés



mechanizmus

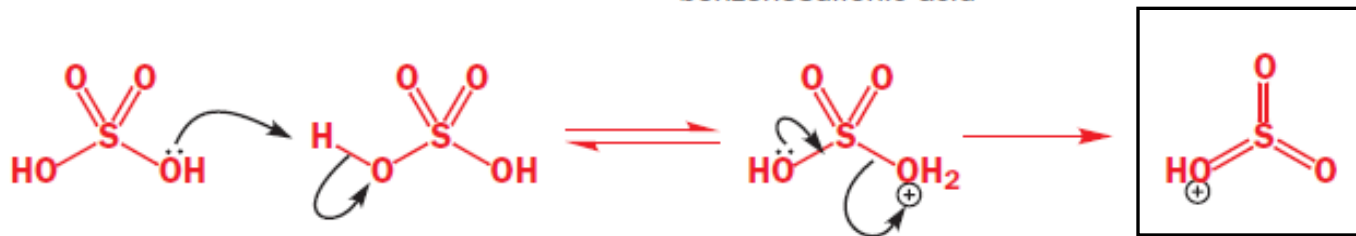
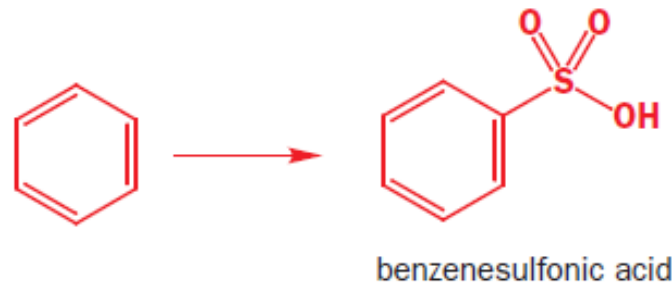


nitrálás

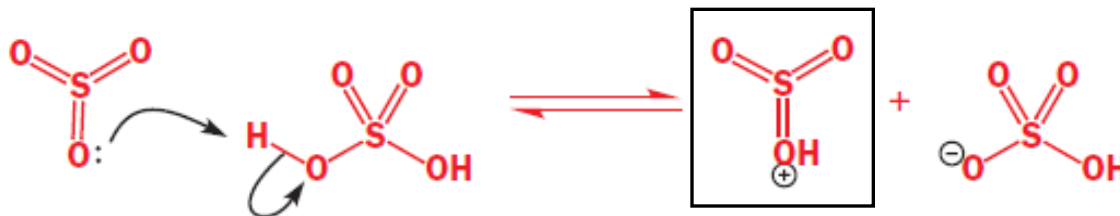


támadó ágens

szulfonálás

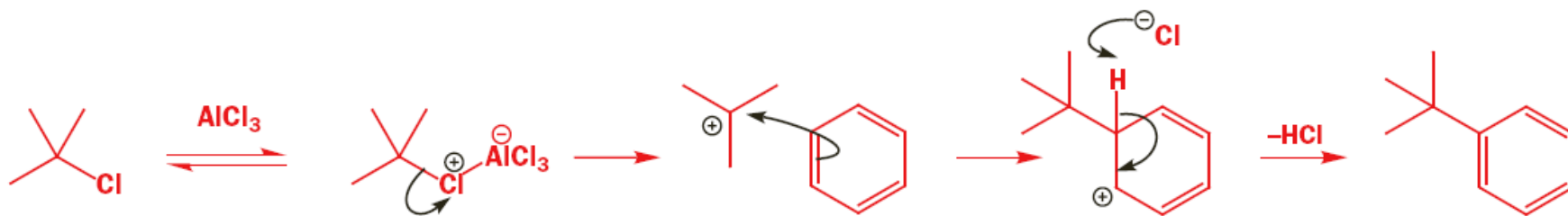


támadó ágens

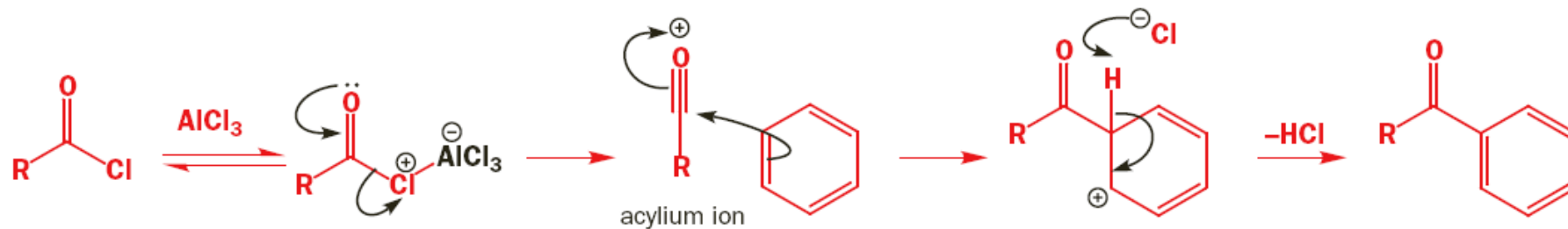


Friedel-Crafts reakciók

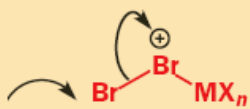
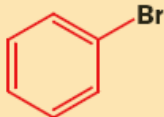
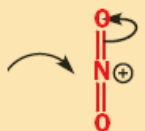
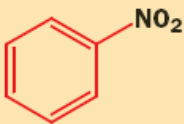
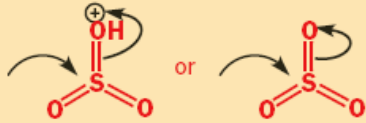
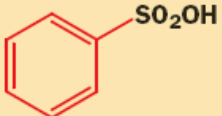

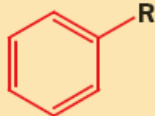

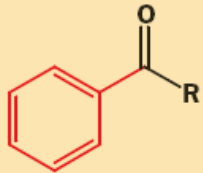
alkilezés



acilezés

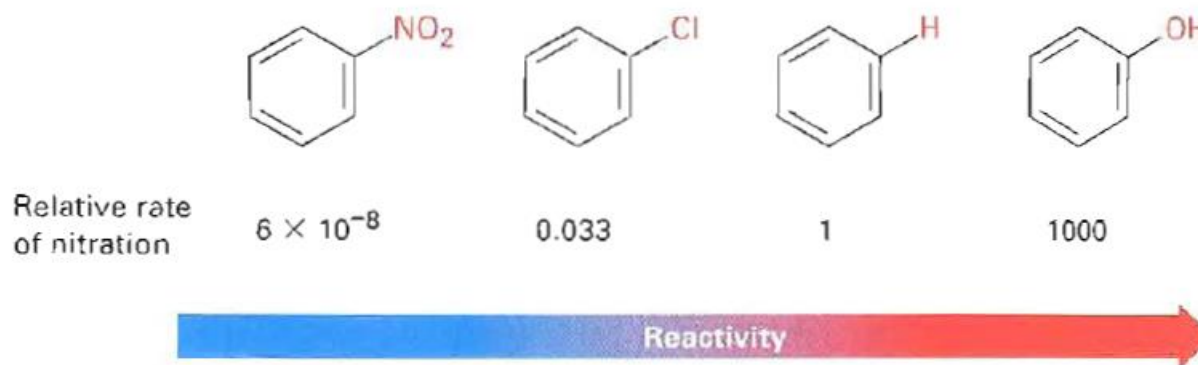


● Summary of the main electrophilic substitutions on benzene

Reaction	Reagents	Electrophile	Products
bromination	Br ₂ and Lewis acid, e.g. AlCl ₃ , FeBr ₃ , Fe powder		
nitration	HNO ₃ + H ₂ SO ₄		
sulfonation	concentrated H ₂ SO ₄ or H ₂ SO ₄ + SO ₃ (oleum)		
Friedel-Crafts alkylation	RX + Lewis acid usually AlCl ₃		
Friedel-Crafts acylation	RCOCl + Lewis acid usually AlCl ₃		

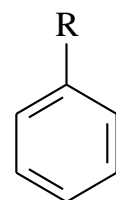
monosubsztituált benzolszármazékok reaktivitása

viszonyítási alap: a benzol hasonló reakciója



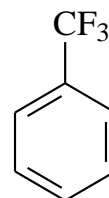
a szubsztituensek lehetnek aktiválóak vagy dezaktiválóak – ezt az induktív és mezomer hatások eredője dönti el

csak induktív hatás van



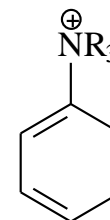
+I

aktiváló



-I

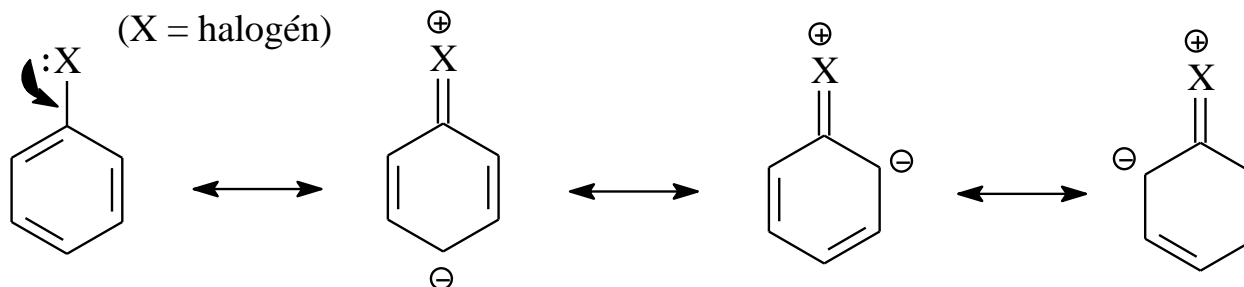
gyengén dezaktiváló



-I

erősen dezaktiváló

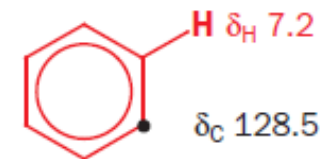
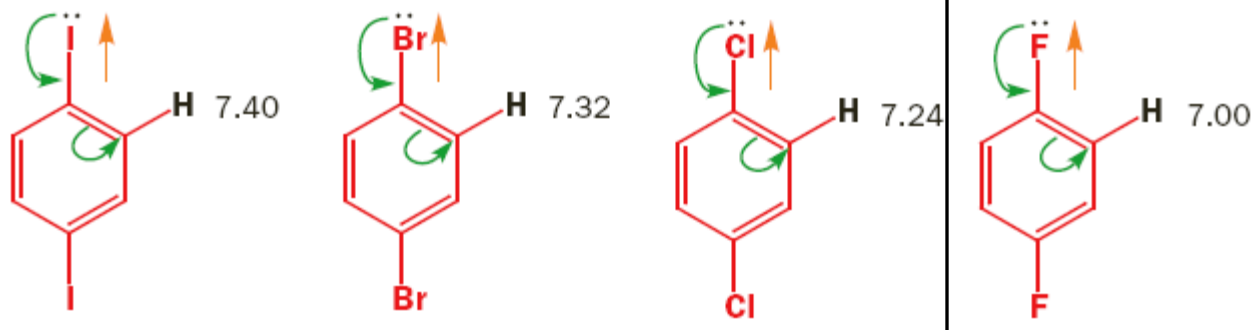
az elektronszívó induktív hatás (-I) erősebb, mint az elektronküldő konjugációs (mezomer) hatás [+M vagy +K] – gyengén **dezaktiváló szubsztituens**



kvantitatív skála – ^1H NMR mérések alapján

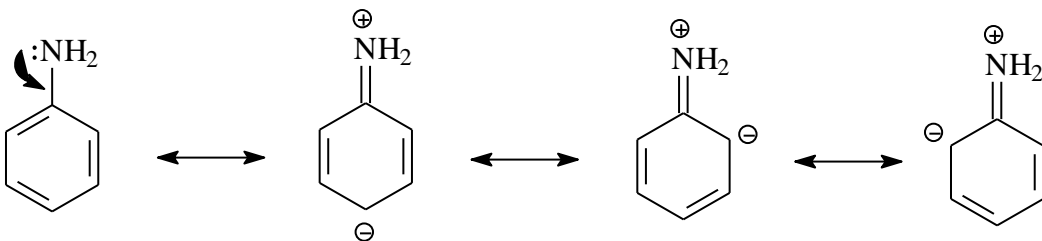
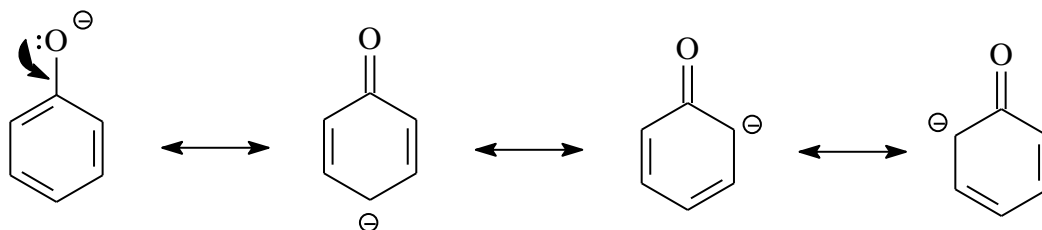
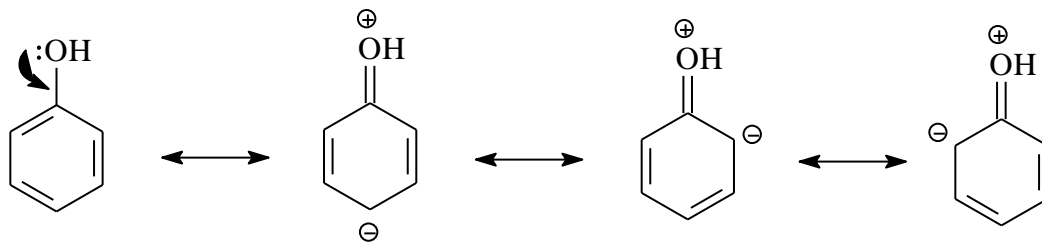
electron-donating and -withdrawing groups

balance between withdrawal by inductive effect and donation of lone pairs by conjugation



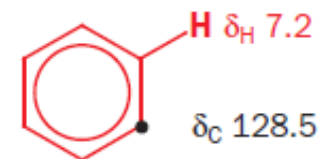
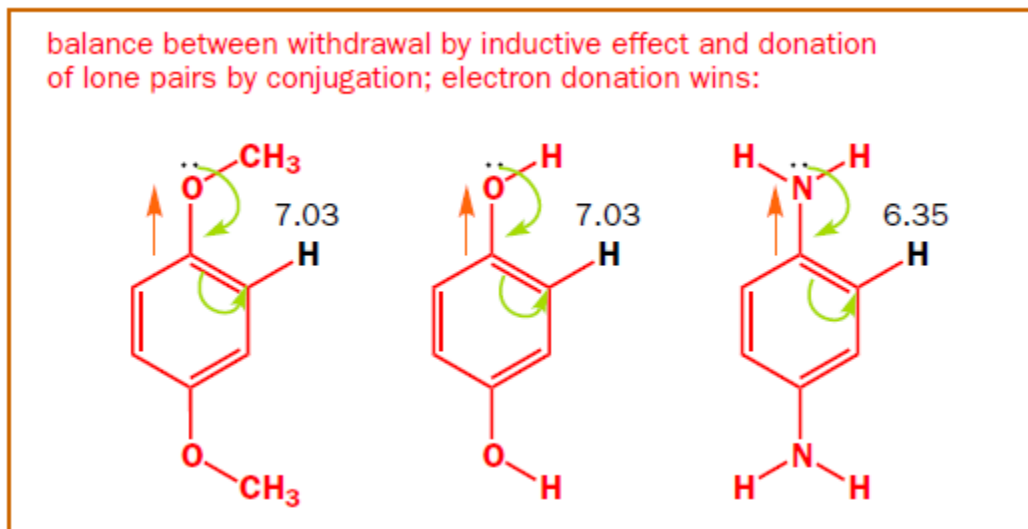
itt már elektronban gazdagabb a gyűrű, mint a benzolnál

az elektronszívó induktív hatás (-I) gyengébb, mint az elektronküldő konjugációs (mezomer) hatás [+M vagy +K] – **aktiváló szubsztituens**

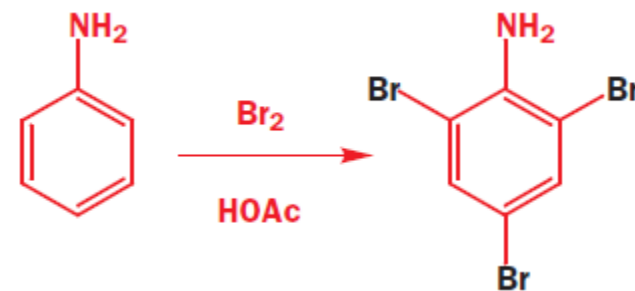
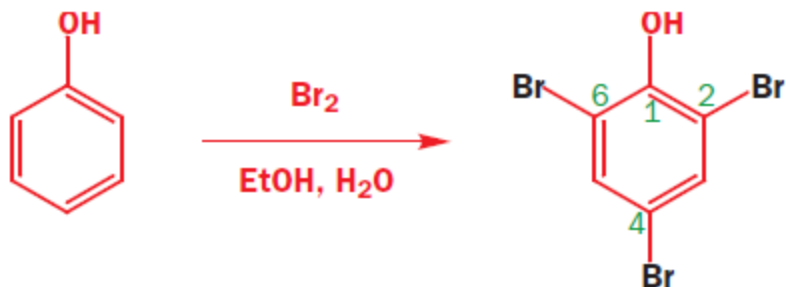


kvantitatív skála – ^1H NMR mérések alapján

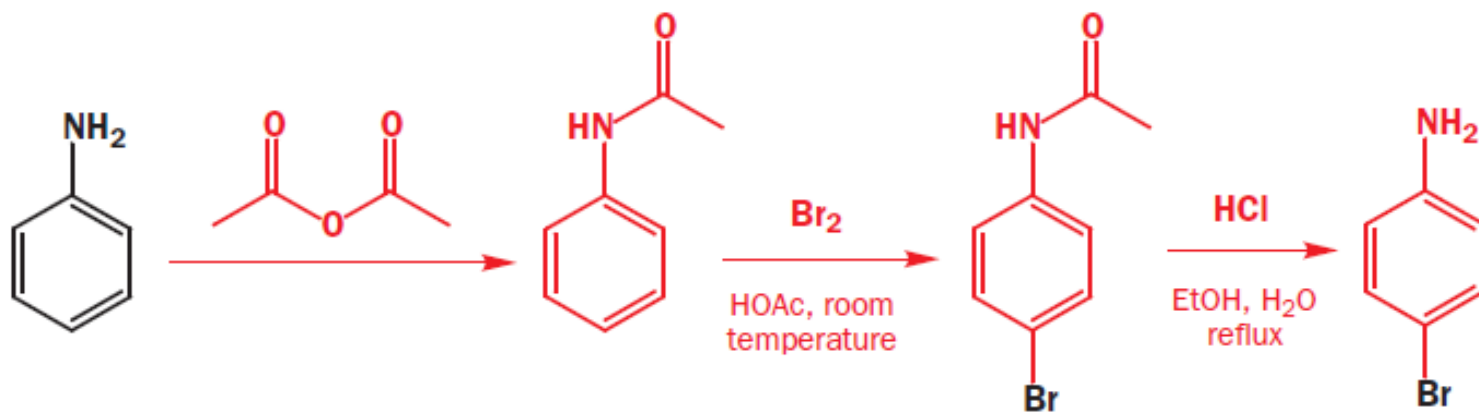
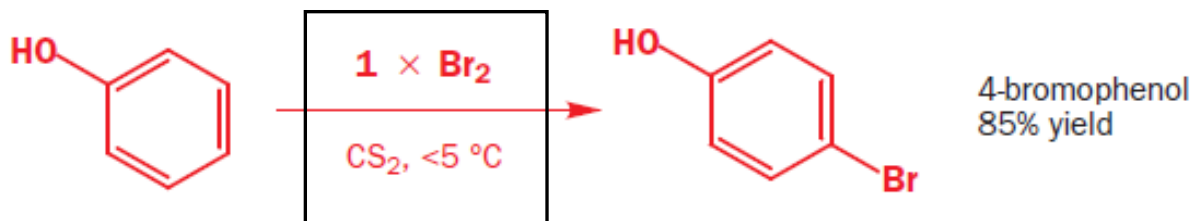
electron donating and electron-withdrawing groups



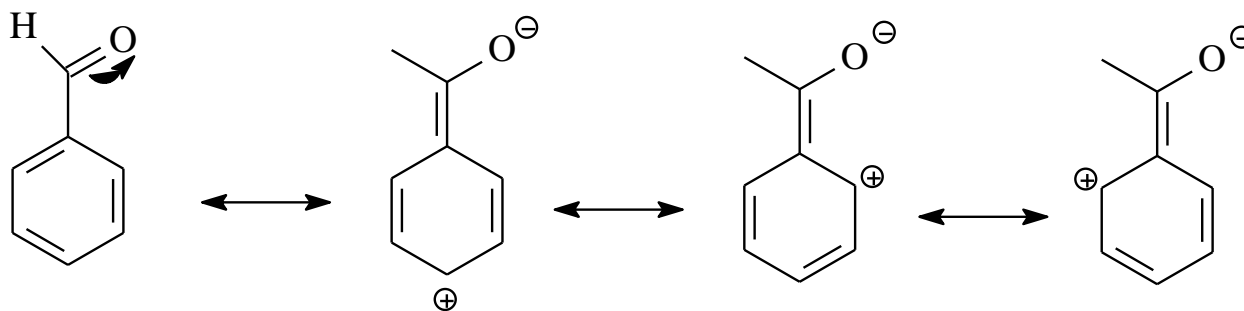
lehetnek eszméletlenül reaktívak – ez nem mindig jó



a reaktivitás moderálható

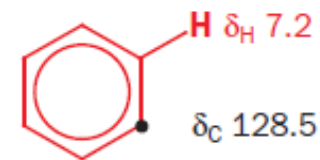
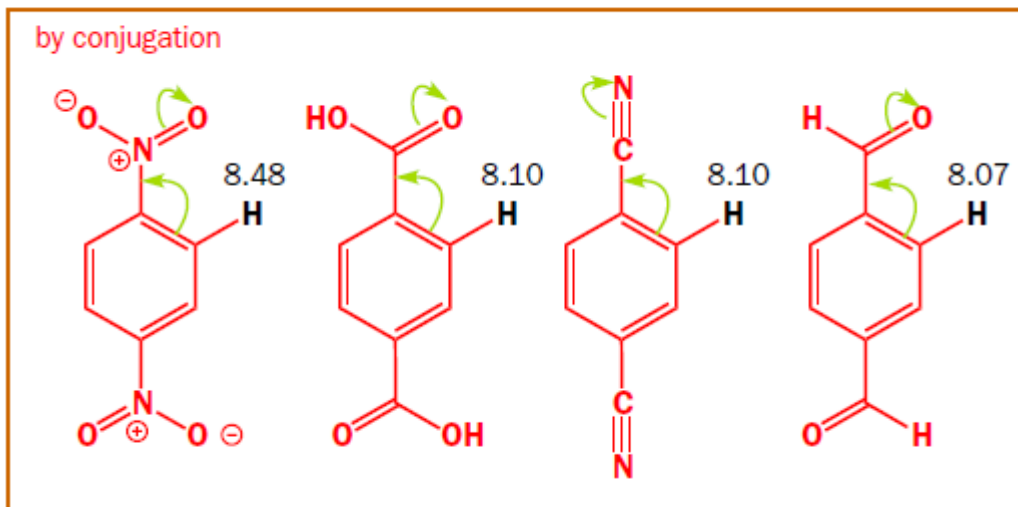


nincs inductív hatás, csak elektronszívó konjugációs (mezomer) hatás
[-M vagy -K] – **dezaktiváló szubsztituens**



kvantitatív skála – ¹H NMR mérések alapján

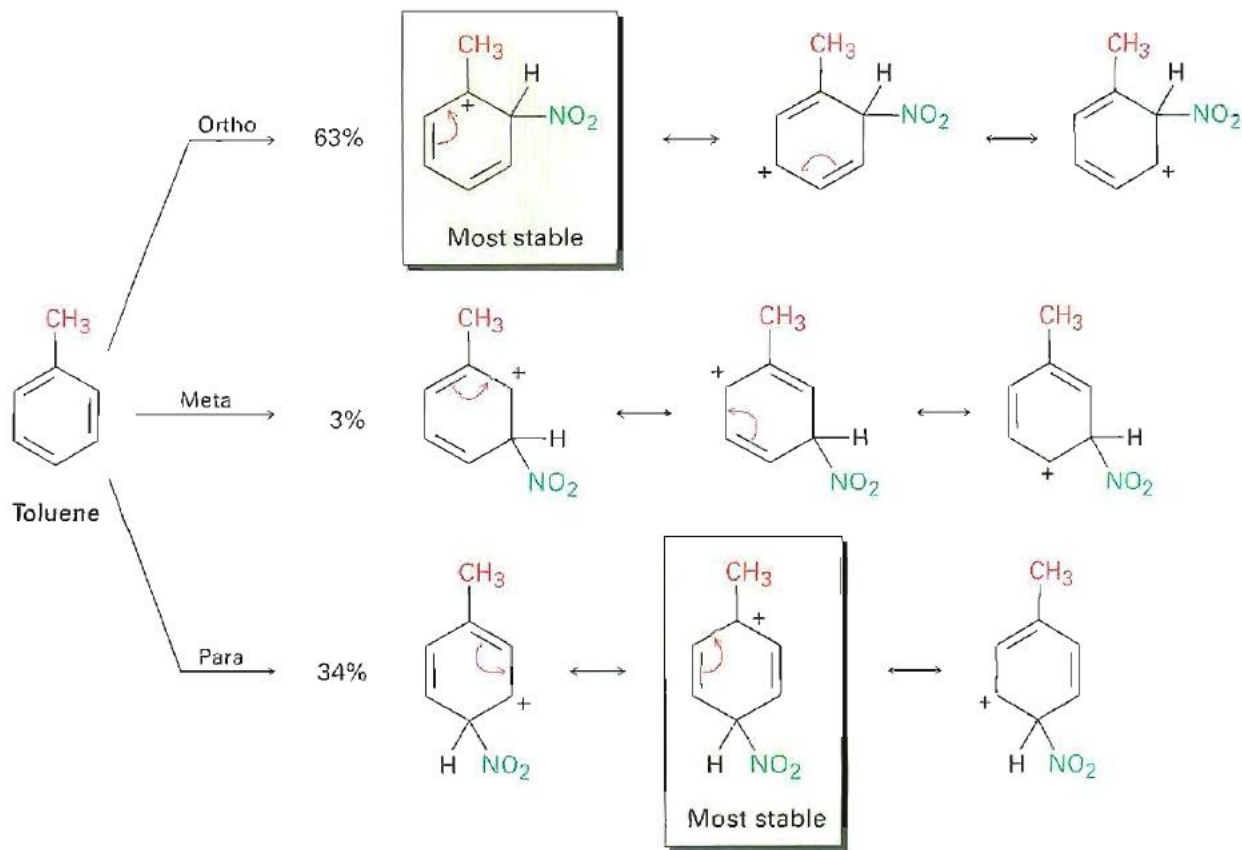
electron-withdrawing groups



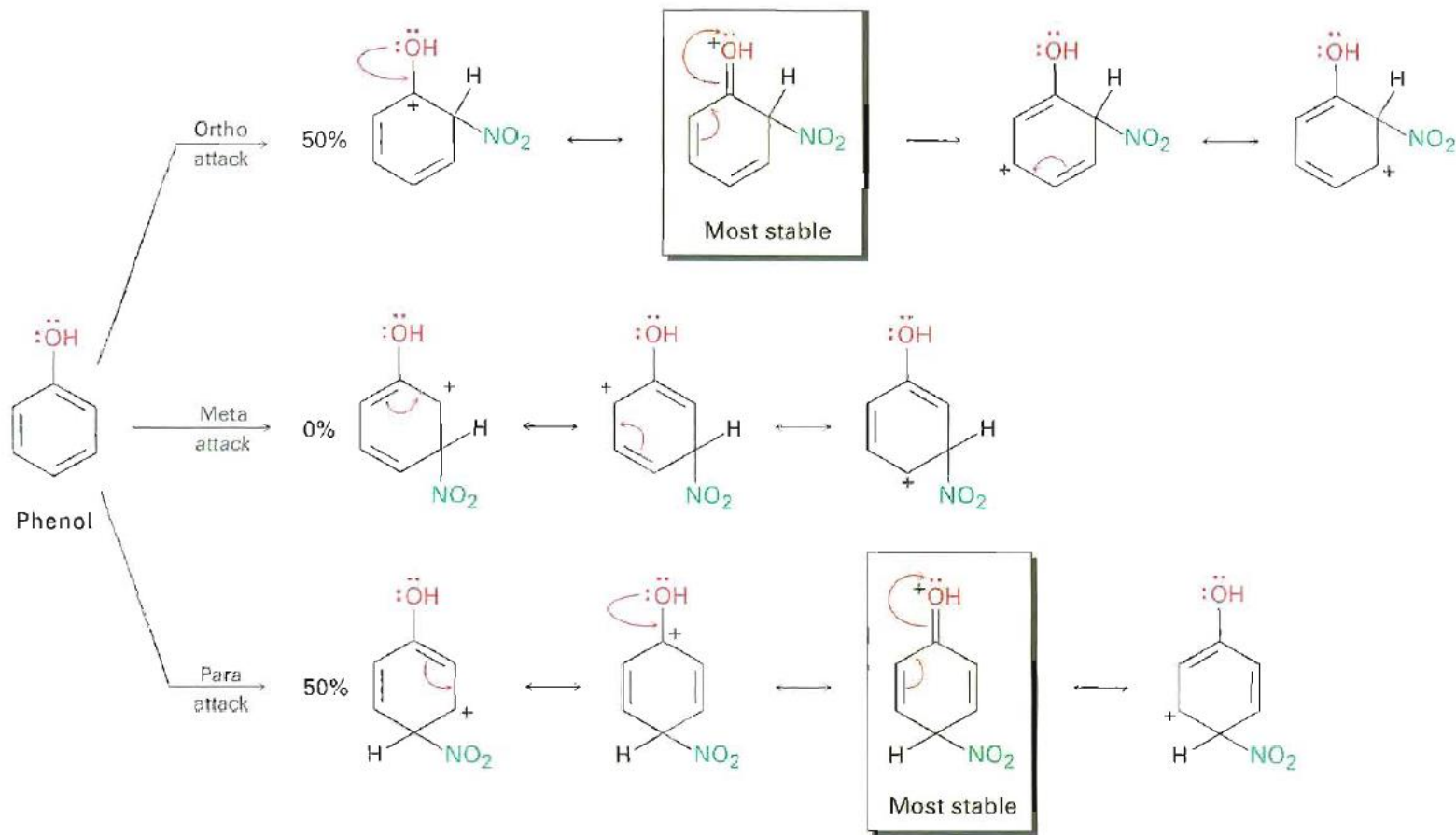
a bentl v  (mono)szubsztituens ir ny t  hat sa

a σ komplex stabilit s t vizsgáljuk, ez modellezi az  tmeneti komplexet (Hammond posztul tum)

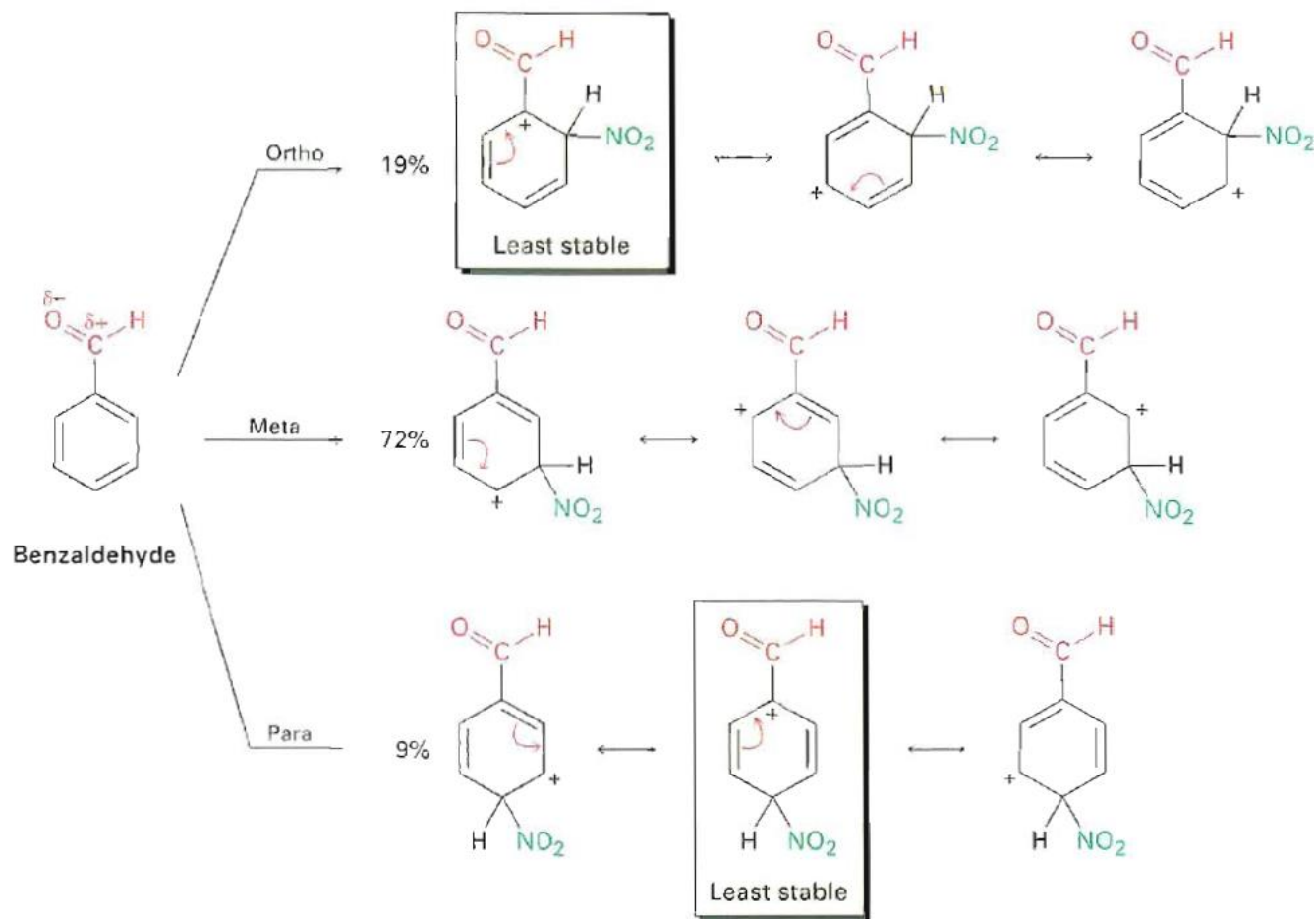
alkilcsoport a bentl v  szubsztituens



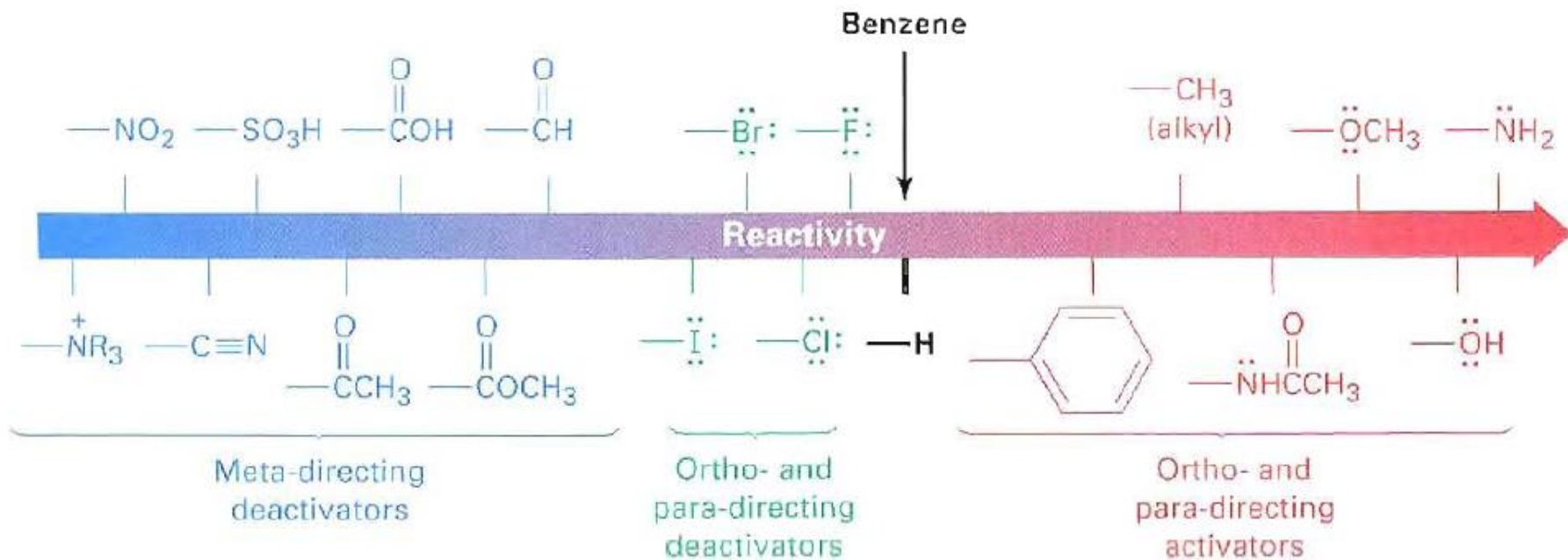
elektronszívó és elektronküldő hatású a bentlévő szubsztituens (-I, +M vagy +K)



elektronszívó hatású a bentlévő szubsztituens (I-O, -M vagy -K)



Összefoglalás



KÖSZÖNÖM A FIGYELMET!

SZÉCHENYI  2020



MAGYARORSZÁG
KORMÁNYA

Európai Unió
Európai Szociális
Alap



BEFEKTETÉS A JÖVŐBE