

Szerves kémiai reakciók: típusok és példák

Az elemi reakciók típusa kevés:

- **Szubsztitúció:** helyettesítés



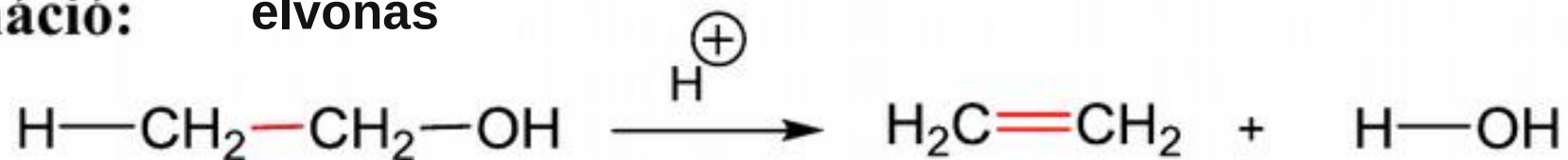
a brómatomot helyettesítjük a hidroxilcsoporttal.

- **Addíció:** hozzáadás



brómatomokat adunk telítetlen kötésű szénatompárra.

- **Elimináció:** elvonás



egy hidrogénatomot és egy hidroxilcsoportot elvonunk a molekulából.

A) Nukleofil

(lat, *nucleus* `mag`)

(gör, *filosz* `valamit kedvelő`)

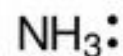
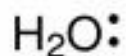
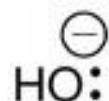
Reagens típusok

„esettanulmány”

1. Vegyünk egy viszonylagos elektronhiányos szénatomot pl.: $\overset{\delta+}{\text{C}}-\overset{\delta-}{\text{Br}}$

2. Ezt az atomot egy elektronban gazdag reagens fogja leginkább

megtámadni pl.:



Ezek a csoportok jellegzetesen bázisok és esetenként redukáló hatásukat egy elektrópár

„közösbeadásán” keresztül fejtik ki:

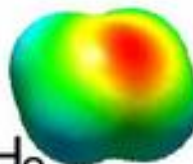


B) Elektrofil

„esettanulmány”

1. Vegyünk egy elektronban viszonylag

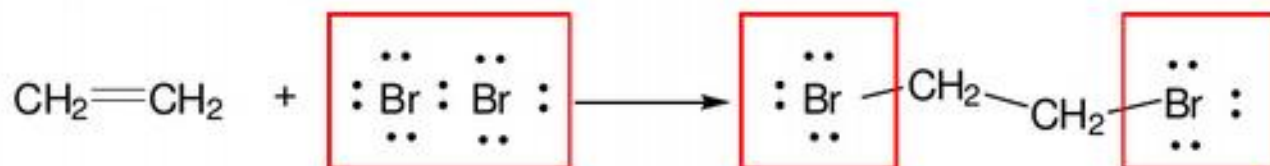
gazdag szénatomot pl.: $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$



2. továbbá egy elektronban szegény reagenst pl.:



Az utóbbi csoportok, jellegzetesen Lewis-savak és oxidáló hatásúak, tevékenységüket egy elektrópár „elszívásán” keresztül fejtik ki.



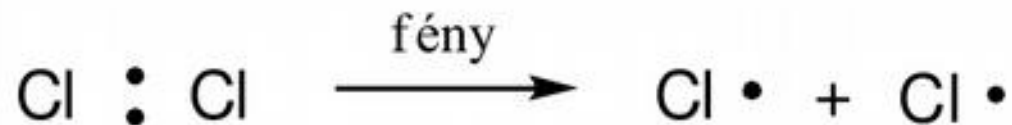
Megjegyzés :

míg a Br_2 molekula külső héján összesen 14 közös elektron van, addig az 1,2-dibrometánban ($2 \cdot 8 =$) 16 elektron van a 2 Br körül.

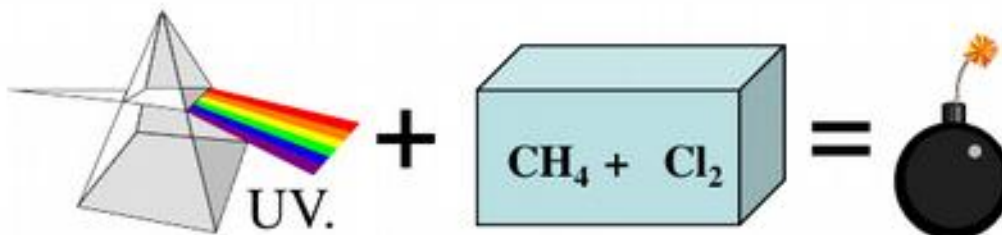
C) Gyök

„esettanulmány”

1. vegyünk egy elektronszerkezetében kiegyensúlyozott molekulát (pl.: CH₄), amellyel se egy nukleofil, se egy elektrofil nem tud eredményesen reagálni,
2. továbbá egy gyököt (pl.: Cl•)
a végbemenő reakció során a párosítatlan elektronnal rendelkező klóratom reagál:



Megjegyzés : ha nincs foton, akkor nincs gyökképződés és akkor nincs reakció (avagy sötétben nincs semmi, **de** UV. fény hatására robban a gázkeverék.)



Elektronos és sztérikus hatás

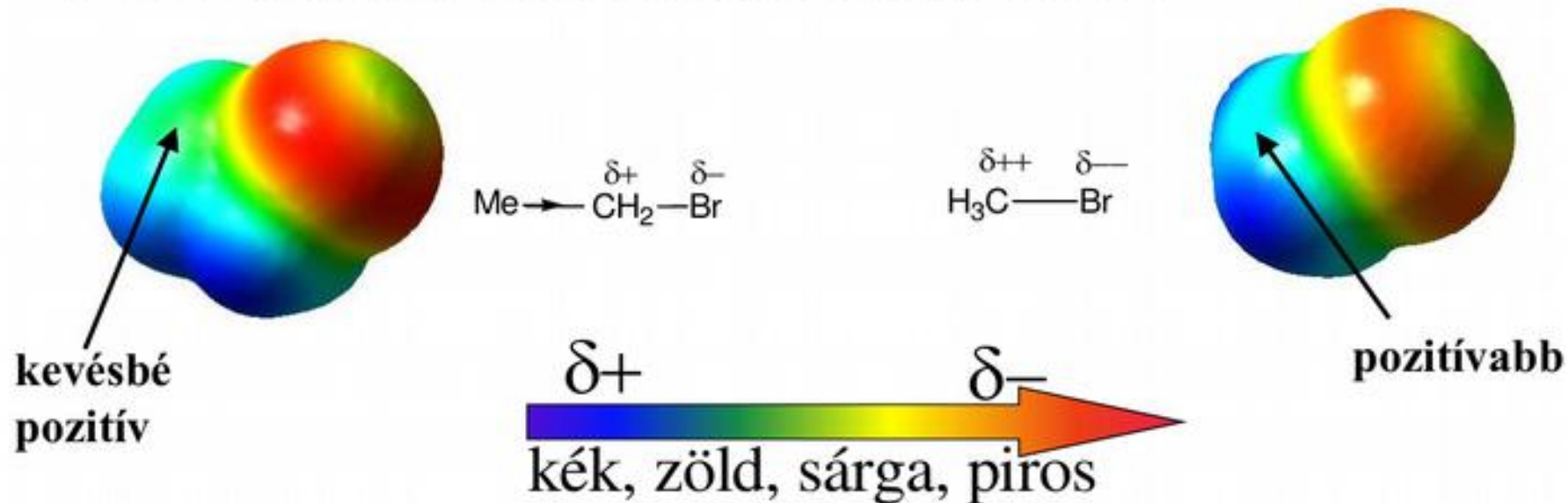
„esettanulmány”:



Megfigyelés : a második reakció **12 szer** lassúbban megy végbe mint az első, de **miért?**

elektronos hatás:

az etilcsoportban a metilcsoport elektronküldő hatása miatt a metilénecsoporthoz tartozó szén pozitív polarizáltsága csökken:



sztérikus hatás:

az etilcsoport nagyobb térigényű mint a metilcsoport

Induktív effektus

STATIKUS:

Eredete - Két különböző EN atom kovalens kötésben kötő elektronpár eltolódása.

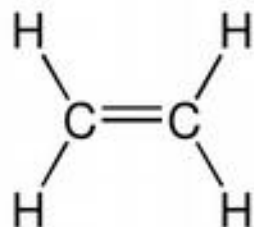
Mértéke - Dipólusmomentum (dipólusnyomaték) $\mu = e \cdot l$ [Debye]
ha 1\AA távolságban van egy elektronnyi negatív illetve pozitív töltés,
akkor $\mu = 4,8\text{ D}$

Mérése - Dielektromos állandó (ϵ)
(paraffin: 1,9-2, 2, víz: 81, EtOH: 24)

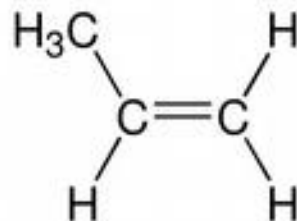


$\mu = 1,86\text{ D}$
(gázfázisú víz)

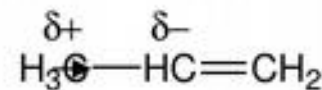
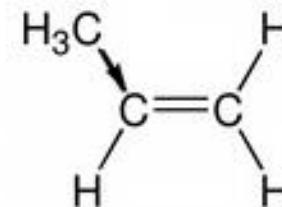
Példák:



$$\mu=0$$

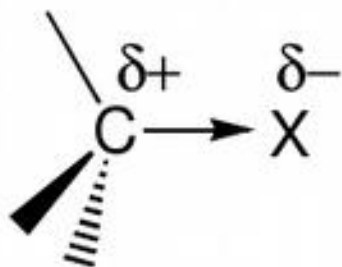


$$\mu=0,4\text{ D}$$



Induktív effektus

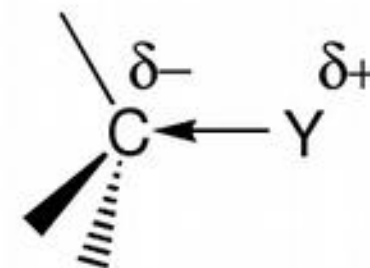
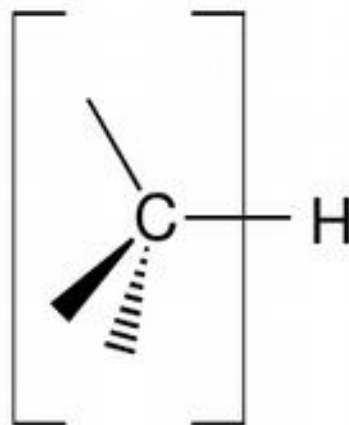
Az effektus előjele:



$$EN_X > EN_C$$

- I-effektus

X: "elektronvonzó"



$$EN_Y < EN_C$$

+ I-effektus

Y: "elektronküldő"

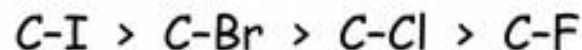
Induktív effektus

DINAMIKUS:

Eredete - Külső erőter hatására a kovalens kötés
(kötő elektronpár, σ kötés) polarizálódik.

Külső erőter - Ionok
- Dipólus

σ -kötések érzékenysége



Tapasztalat:

- Nagy statikus I effektus jelenléte esetén kicsi a dinamikus I effektus.

- Kis statikus I effektus jelenléte esetén a kötés érzékeny.

Nukleofil szubsztitúció telített szénatomon

kérdés: egyformán befolyásolja-e a reagens és a szubsztrátum koncentrációja az eredményes reakciót?

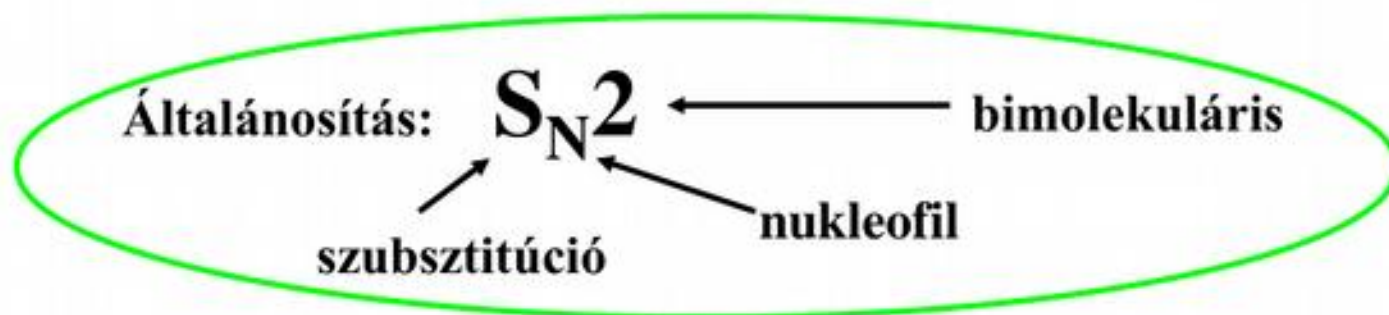


módszer: megfigyeljük a résztvevő molekulák koncentrációinak alakulását az idő függvényében.

tapasztalat: igen, mind a reagens (OH^-), mind a szubsztrátum (CH_3Br) moláris koncentrációja befolyásolja a reakciósebességet. Azaz :

$$d[\text{CH}_3\text{OH}]/dt = k[\text{CH}_3\text{Br}][\text{OH}^-]$$

másodrendű reakció sebességi egyenlete, ahol k a reakció sebességi együtthatója

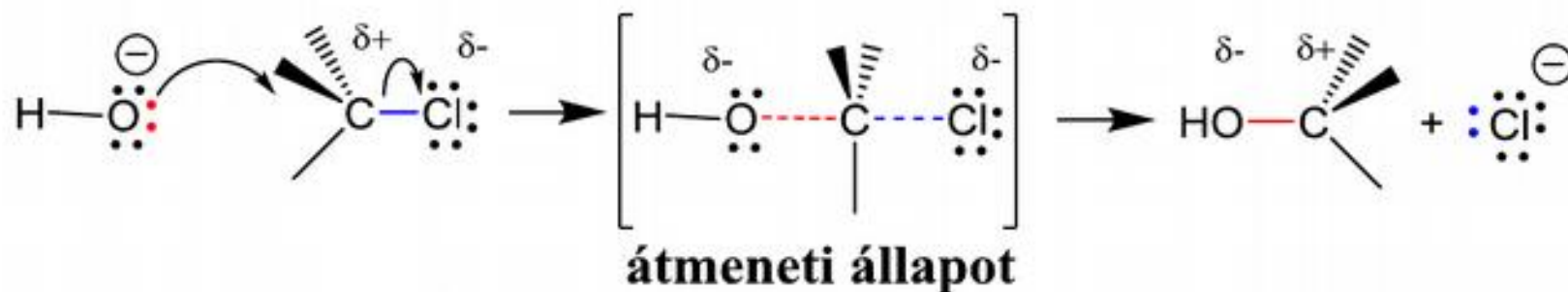


memo: a kémiai reakció előrehaladását annak sebességével (v) mérjük, ahol a jelen esetben

$v = -d[\text{A}]/dt = -d[\text{B}]/dt = +d[\text{X}]/dt$, azaz „ v ” a koncentrációk időegység alatti megváltozása.

(Azért van a „-” előjel az A és a B esetében, mert azok koncentrációja (mind A-nak, mind B-nek) csökken az időben (elfogynak), ám a sebesség definíciószerűen pozitív szám kell hogy legyen.)

Nukleofil szubsztitúció telített szénatomon: mechanizmus



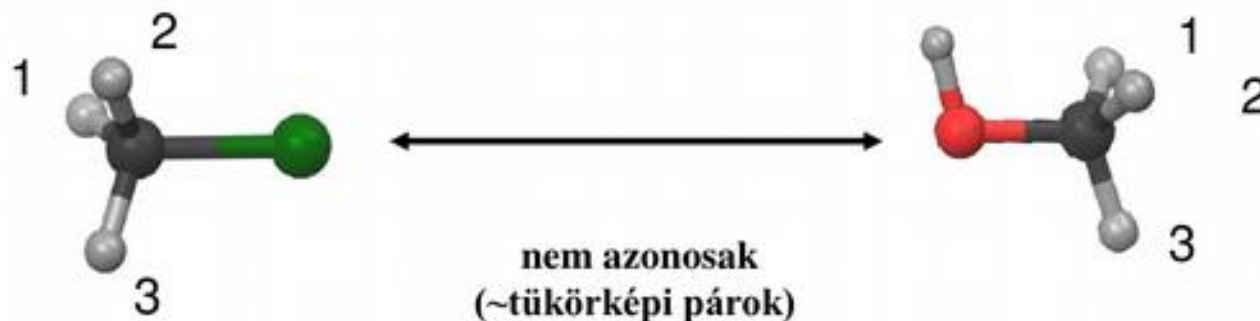
A hidroxidion egy elektronpárt „küld” a pozitívan polározott szénatom felé, amit az elektorsztatikának megfelelő orientáció kísér

Az átmeneti állapotban az O-C kötés részlegesen kialakult, míg a C-Cl kötés részlegesen elhasadt.
(A C konfigurációja az inverzió felé tart.)

Az O-C kötés kialakult, a C-Cl kötés megszűnt.
(A C invertálódott.)

Solomons 237

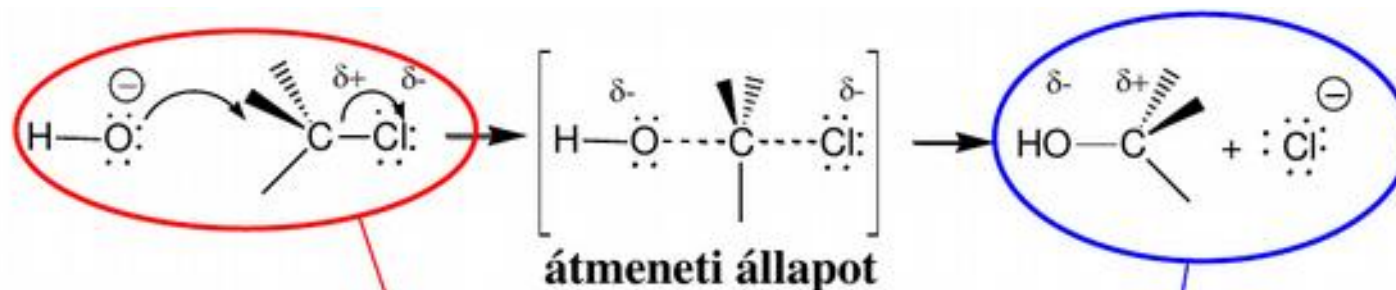
memo: ha a kiindulási anyag királis és optikailag tiszta, akkor az S_N2 reakció során **inverzió** történik.



Nukleofil szubsztitúció telített szénatomon: termodinamika

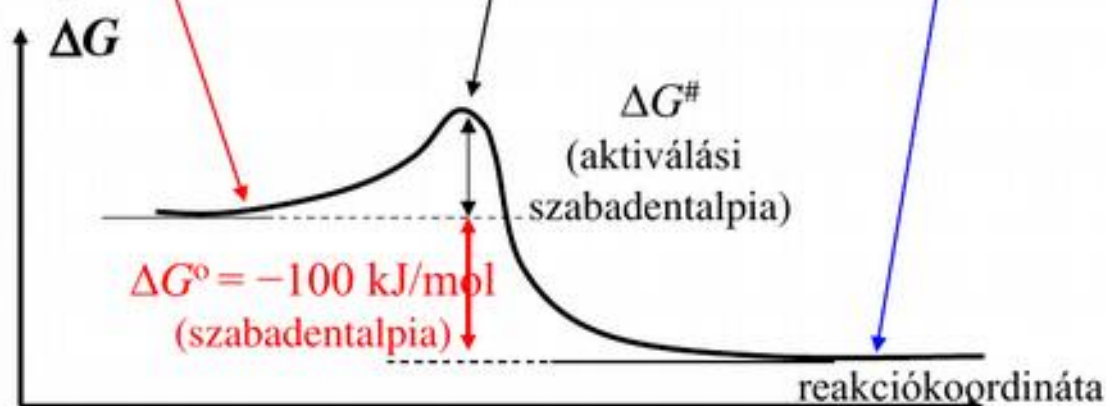
memo:

a S_N2 reakciómechanizmus részleteinek leírása:

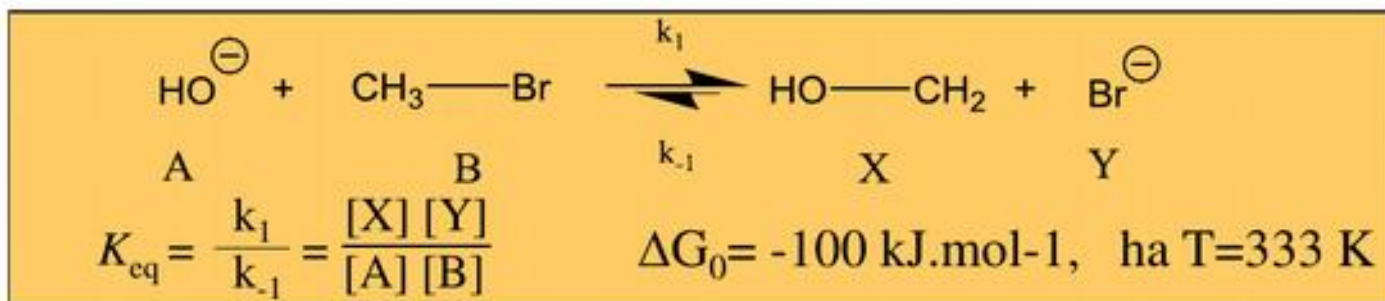


A szabadentalpia diagram:

Solomons 237



kérdés: végbe megy-e a reakció,
avagy mekkora a K_{eq} értéke az Arrhenius egyenlet alapján?



$$\Delta G^{\circ} = -2.303 RT \log K_{eq} \Rightarrow \log K_{eq} = -\Delta G^{\circ} / 2.303 RT = \frac{-(-100 \text{ kJ/mol})}{2.303 \times 0.00831 \text{ kJ/molK} \times 333 \text{ K}} = 15.7$$

$K=10^{15.7}$, a reakció teljesen végbemegy.

Nukleofil szubsztitúció telített szénatomon

kérdés: ugyanaz marad-e a mechanizmus, ha a metilcsoport egyik hidrogénjét egy metilcsoportra cseréljük?



módszer: megfigyeljük a résztvevő molekulák koncentrációinak alakulását az idő függvényében.

tapasztalat: bár lassul a reakció, de mind a reagens (OH^-) mind a szubsztrát ($\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$) moláris koncentrációja befolyásolja a **reakciósebességet**. Azaz továbbra is $d[\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}]/dt = k[\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}][\text{OH}^-]$

(másodrendű reakció sebességi egyenlete **egy másik k** sebességi együtthatóval)

válasz: igen, ez is $\text{S}_{\text{N}}2$ reakció.

további megfigyelés:

$k_{\text{relatív}}$	1	0.079	0.014
	$\text{H}_3\text{C—Br}$	$\text{MeCH}_2\text{—Br}$	$\text{Me}_2\text{CH—Br}$

Nukleofil szubsztitúció telített szénatomon

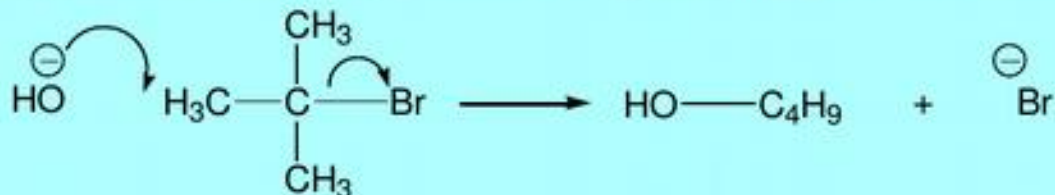
kérdés: ugyanez marad-e a mechanizmus, ha akár az összes hidrogént lecseréljük metilcsoportokra?

megfigyelés:

$k_{relatív}$	1	0.079	0.014	47.2 !
	H_3C-Br	$MeCH_2-Br$	Me_2CH-Br	Me_3C-Br

válasz: **nem** lehet ugyanaz a mechanizmus a ^tBu-Br esetében mint a korábban leírt S_N2 , noha marad a szubsztitúció és a nukleofil támadás.

kérdés: egyformán befolyásolja-e mind a reagens mind a szubsztrát koncentrációja az eredményes reakciót?



tapasztalat: míg a reaktáns (C_4H_9Br) moláris koncentrációja befolyásolja a reakciósebességet, az nem függ a reagens (OH^-) moláris koncentrációjától. Azaz :

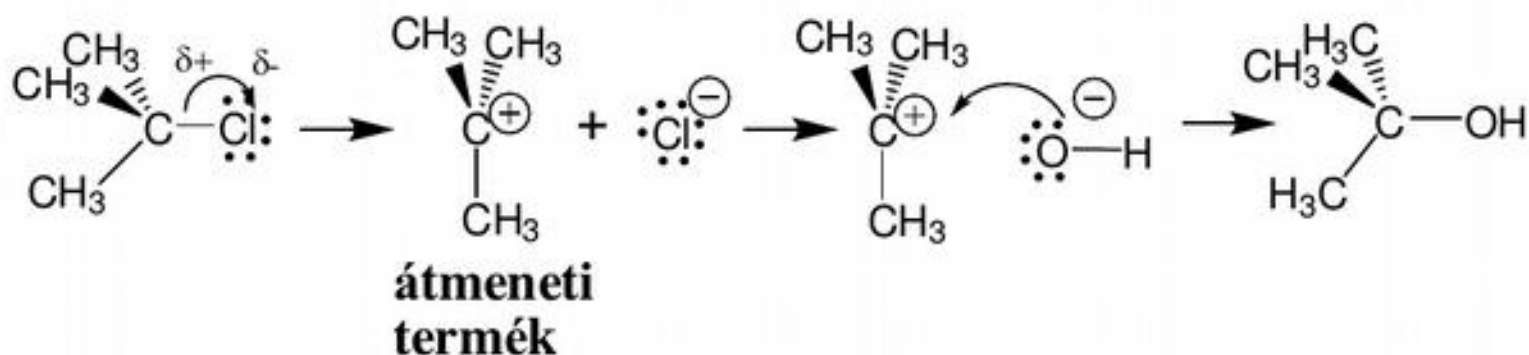
$$d[C_4H_9OH]/dt = k[C_4H_9Br]$$

elsőrendű reakció sebességi egyenlete, ahol k a sebességi együttható

válasz: **nem** a reakciósebesség csak a reaktáns (C_4H_9Br) koncentrációjától függ.

Altalánosítás: **S_N1** ← monomolekuláris
↑ szubsztitúció ↑ nukleofil

Az S_N1 reakció mechanizmusa



A poláris oldószer által segített klóratom eltávolodik a központi szénatomtól, a kovalens kötést heterolitikusan elhasítva.

Az átmeneti termék létrejötte, mely során a karbokation kialakul (sp²-es C-atom), ez a reakció lassú lépése.

A hidroxidion egy elektronpárt „küld” a karbokation felé.

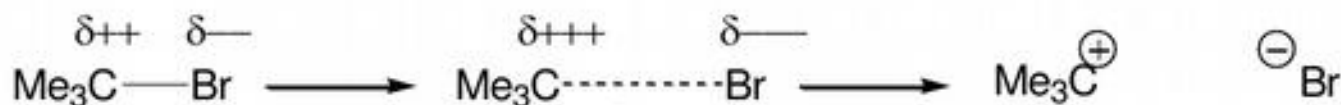
Az O-C kötés kialakult. (Ha a C-atom királis volt, akkor a termék racemát.)

Solomons 245

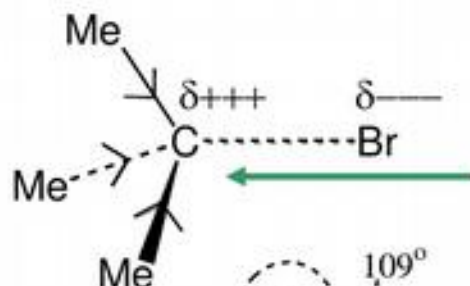
memo: ➔ a tisztán S_N2 mechanizmusú reakció ha királis szénen történik, akkor az **inverzióhoz** vezet.
➔ a tisztán S_N1 mechanizmusú reakció ha királis szénen történik, akkor az **racemátot** eredményez.

Az S_N1 reakció mechanizmusa

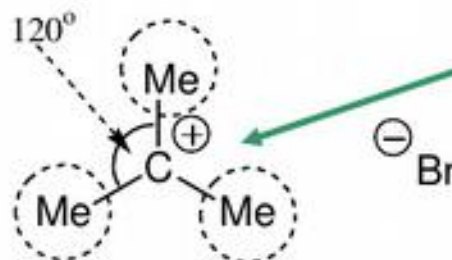
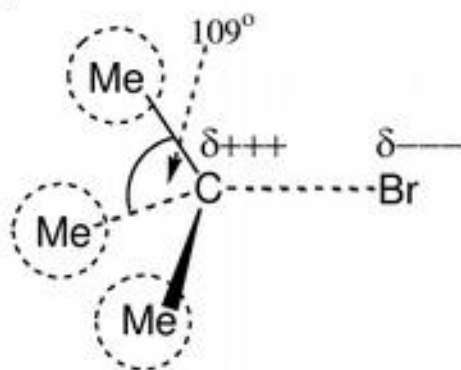
kérdés: hogyan képes a tBu-Br heterolitikusan bomlani és hogyan stabilizálódnak a visszamaradó ionok?



a megnövekedett kötéshossz növeli a részleges töltéseket,



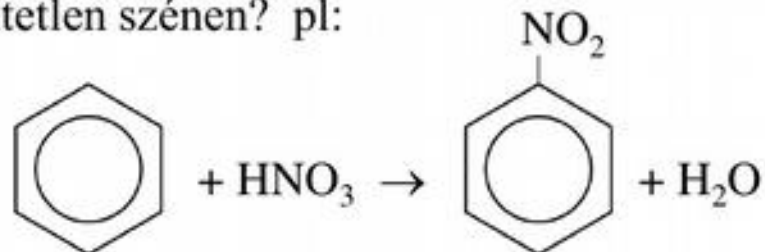
a kialakuló karbokationt stabilizálja a metilcsoportok elektronküldő (+I) effektusa



a síkalkatú karbokationban a metilcsoportok jobban elférnek mint a „tetraéderes” tBu-Br -ban, ahol a nagy térigényű -Br torzító hatása jelentős.

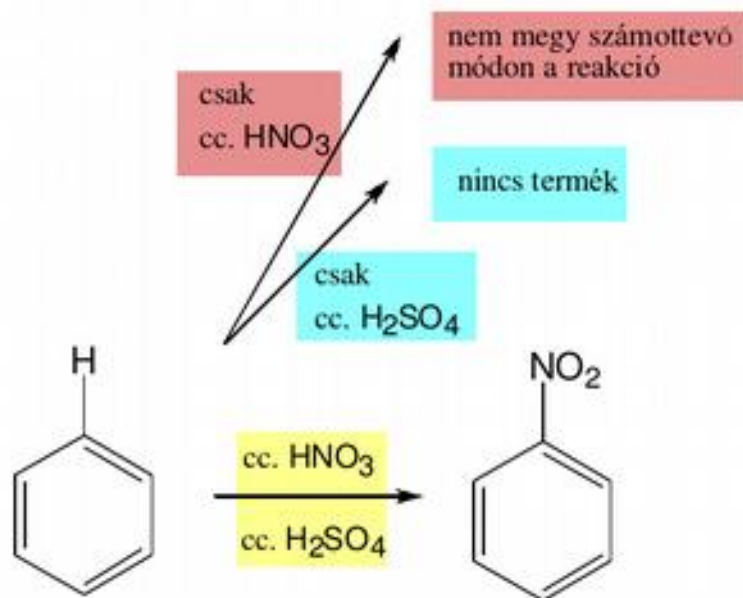
Elektrofil szubsztitúció telítetlen szénatomon

kérdés: megoldható-e egy S_E reakció telítetlen szénen? pl:

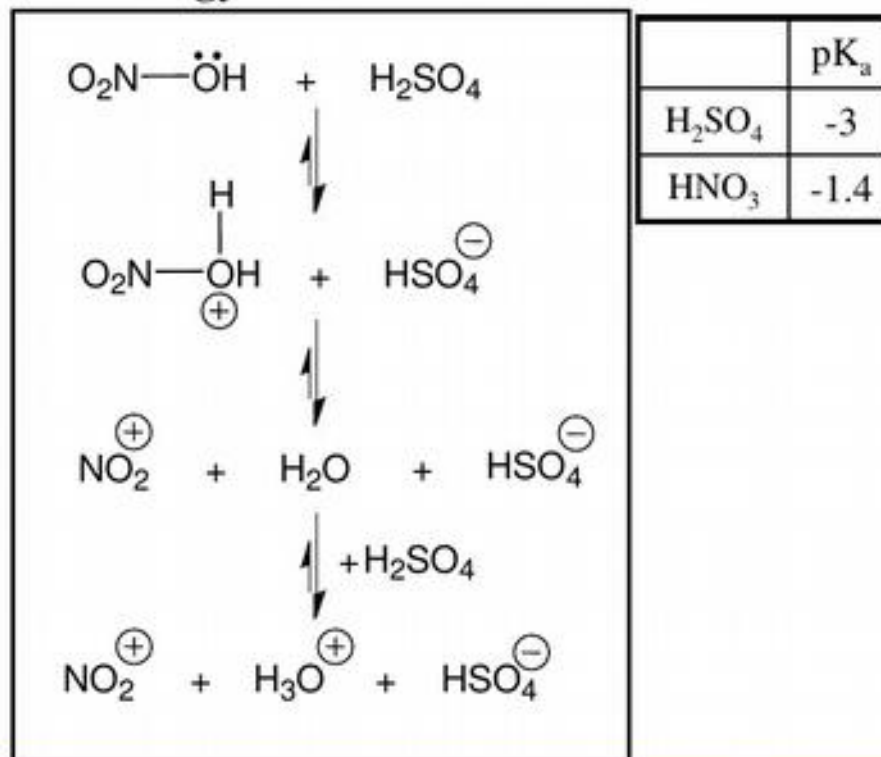


(H^+ -t cserélünk NO_2^+ -ra (nitrónium kation): S_E)

tapasztalat:



magyarázat:

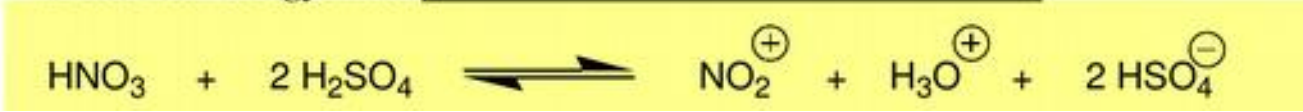


megjegyzés:



a nitrónium kation (NO_2^+) **kiváló elektrofil** amely pl. $\text{NO}_2^+\text{BF}_4^-$ só formájában is felhasználható.

bruttó reakcióegyenlet:



Elektrofil szubsztitúció telítetlen szénatomon

kérdés: mi lehet ennek az S_E reakciónak mechanizmusa ($\text{NO}_2^+\text{BF}_4^-$ -et használva NO_2^+ forrásként)?

módszer: megfigyeljük a résztvevő molekulák koncentrációinak alakulását az idő függvényében.

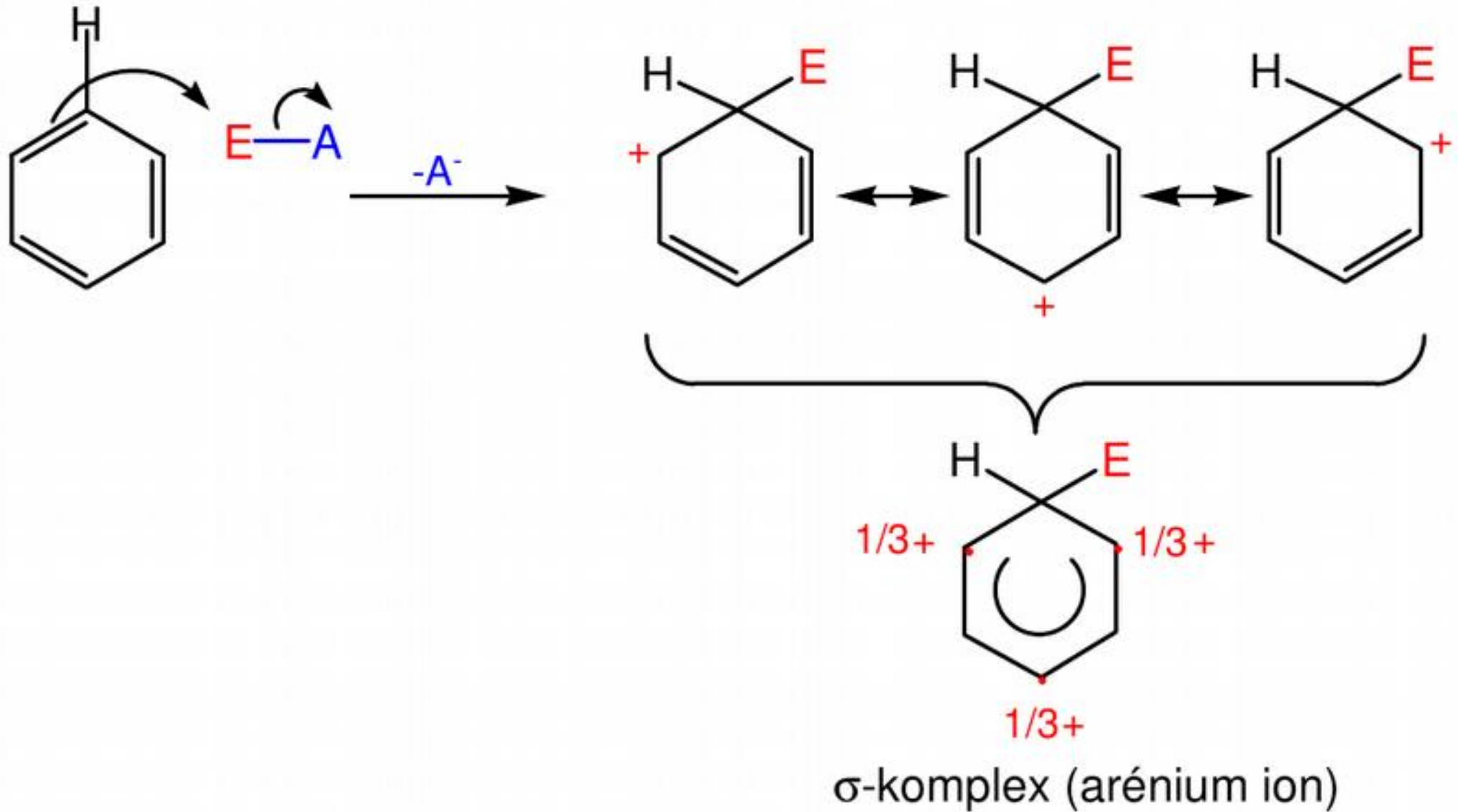
tapasztalat: mind a reagens (NO_2^+), mind a szubsztrát (Ar-H) moláris koncentrációja befolyásolja a reakciósebességet, azaz a reakciósebesség (a termék koncentrációjának időbeli változása):

$$d[\text{Ar-NO}_2]/dt = k[\text{NO}_2^+][\text{Ar-H}].$$

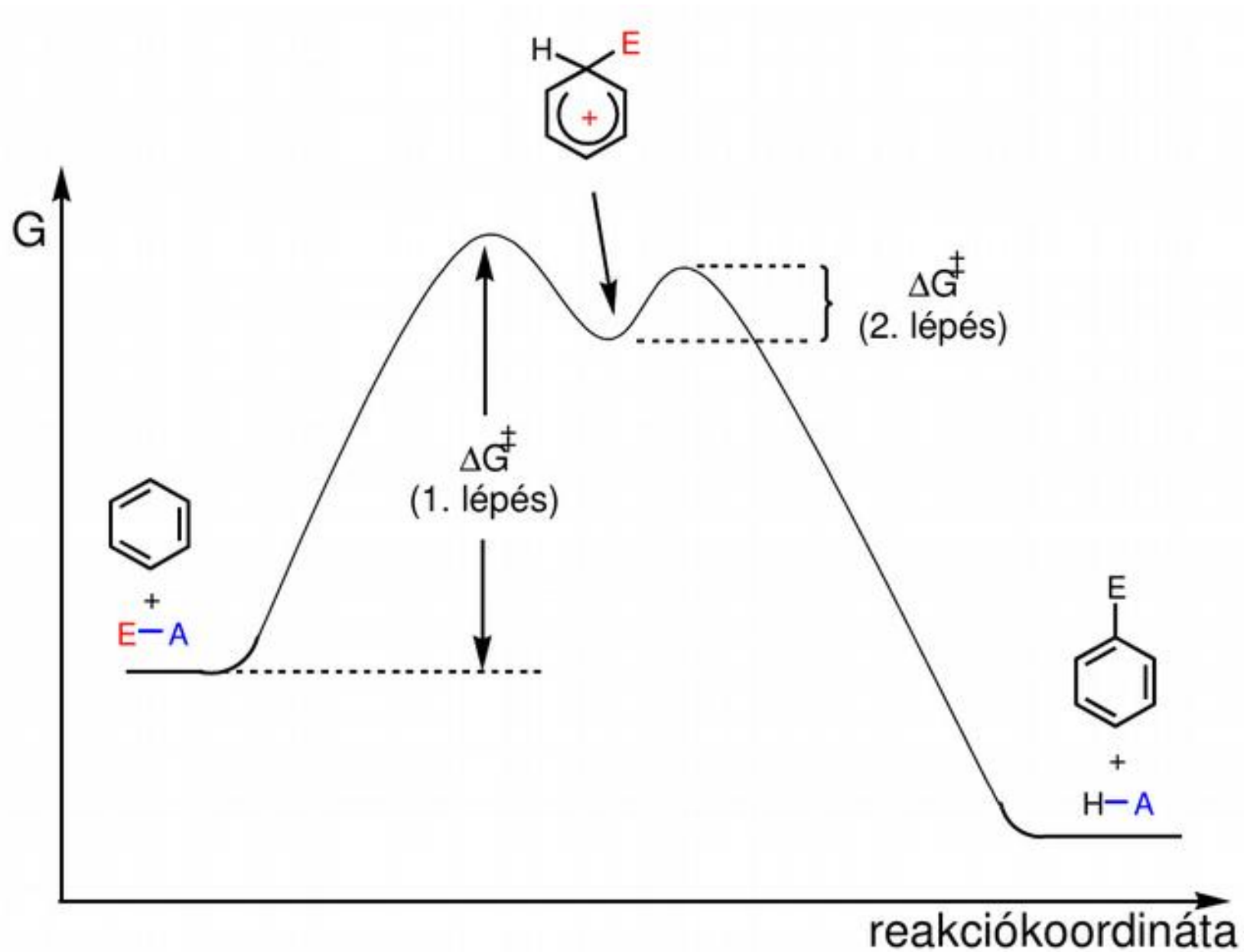
másodrendű reakció sebességi egyenlet, ahol k a sebességi együttható

válasz: bimolekulás azaz S_E2 .

Elektrofil szubsztitúció telítetlen szénatomon



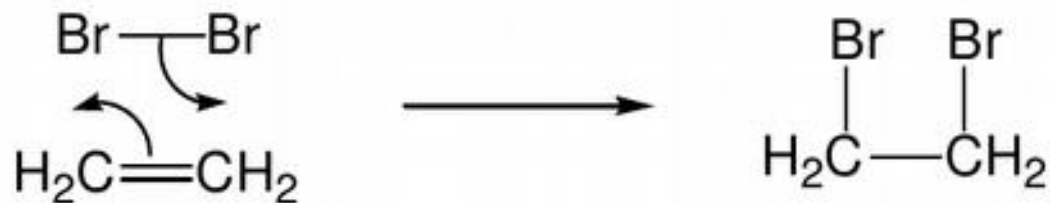
Elektrofil szubsztitúció telítetlen szénatomon



Elektrofil addíció C-C kettős kötésre

memo: Szerves molekulákban a kettős kötés kimutatására ismert analitikai módszer a Br_2 -os vagy a KMnO_4 -os reakció.

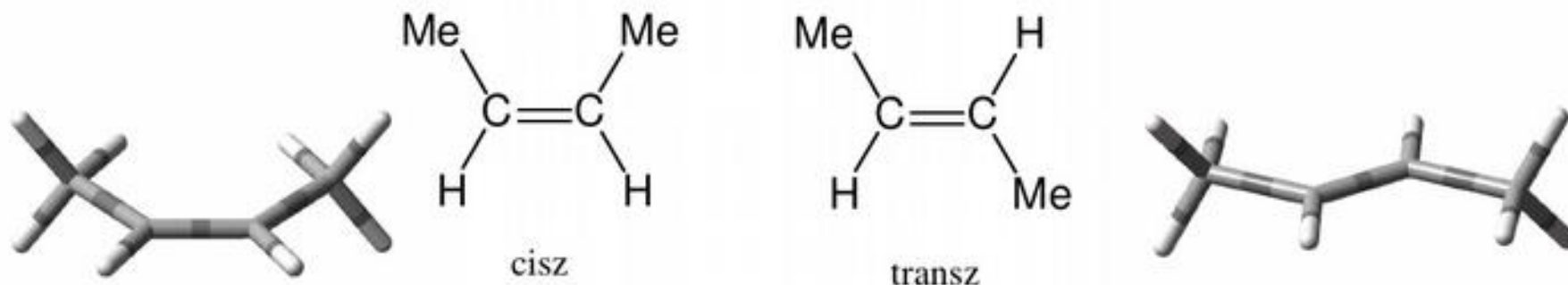
kérdés: Vajon a Br_2 addíciója az alábbi **egyszerű lépéssel** magyarázható-e?



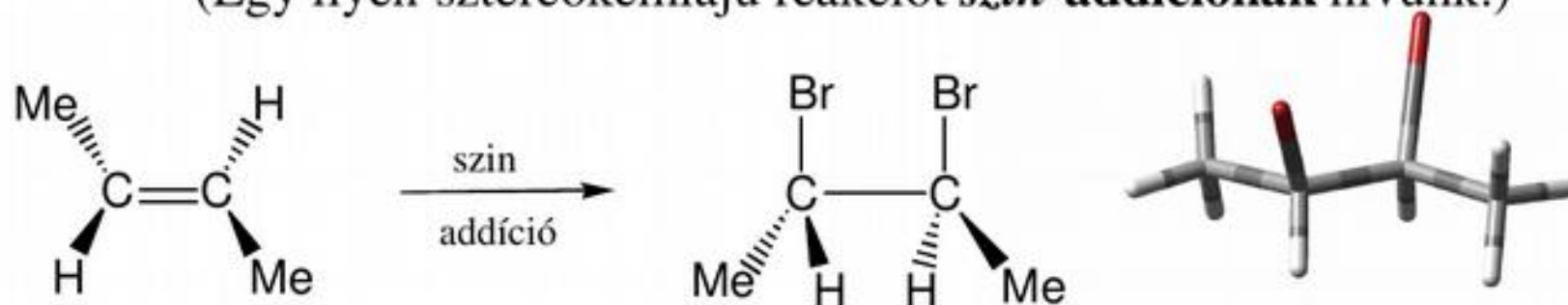
válasz: nem!

Elektrofil addíció C-C kettős kötésre

memo: A but-2-én molekulának két izomerje lehetséges:
a *cisz* és a *transz* formák.



Tekintsük a ***transz-but-2-ént***. Tegyük fel hogy a Br₂ **egy lépésben** addíciónálódik. Ha ezt a mechanizmust feltételezzük, akkor mindkét brómatom a szénhidrogén **egyazon oldalára** kell kerüljön.
(Egy ilyen sztereokémiájú reakciót ***szin-addíció***nak hívunk.)

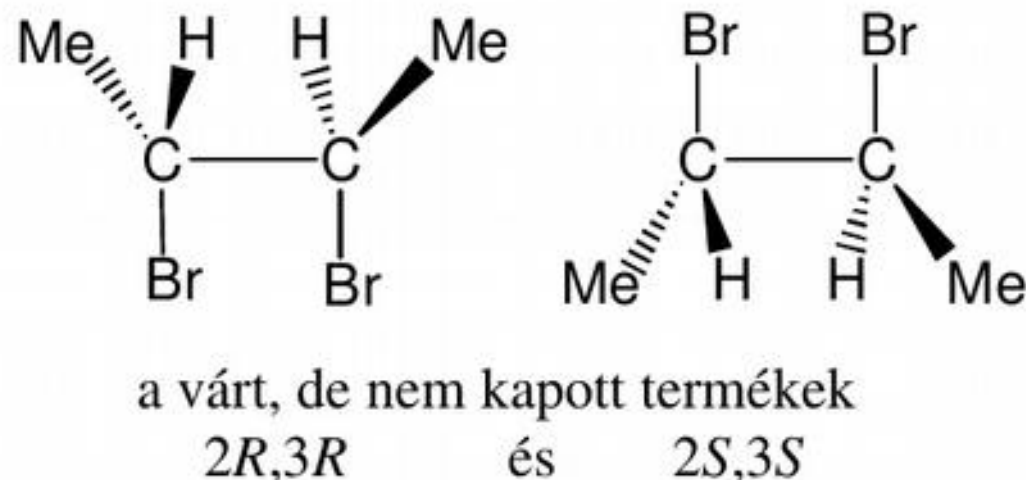
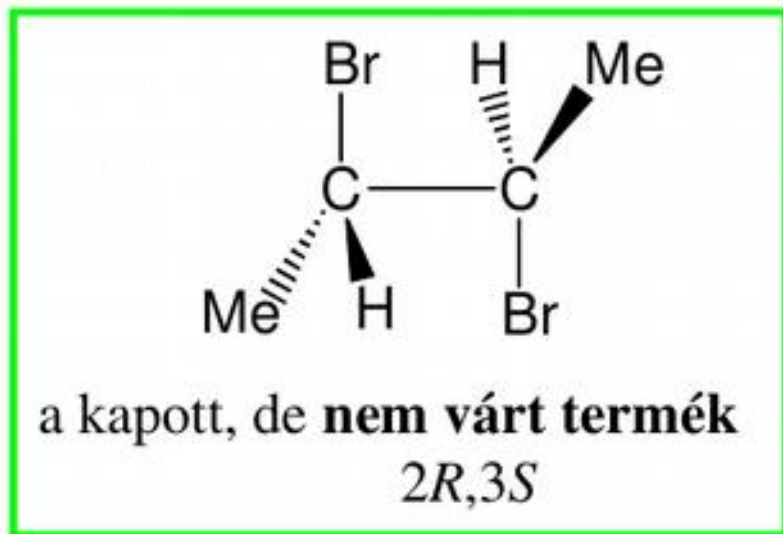


a várt termék konfigurációja: (2*S*,3*S*)-2,3-dibrómbután (vagy (2*R*,3*R*)-2,3-dibrómbután), ahol a két Me-csoport a molekula átéllenes felén található.

Elektrofil addíció C-C kettős kötésre

tapasztalat: Nem a várt ($2S,3S$) hanem a ($2R,3S$) terméket kapjuk!

A kapott termékben, ha a két brómatomot fedőállásba hozzuk, akkor a feltételezéstől eltérő a két Me-csoportot a molekula egyazon térfelén találjuk.

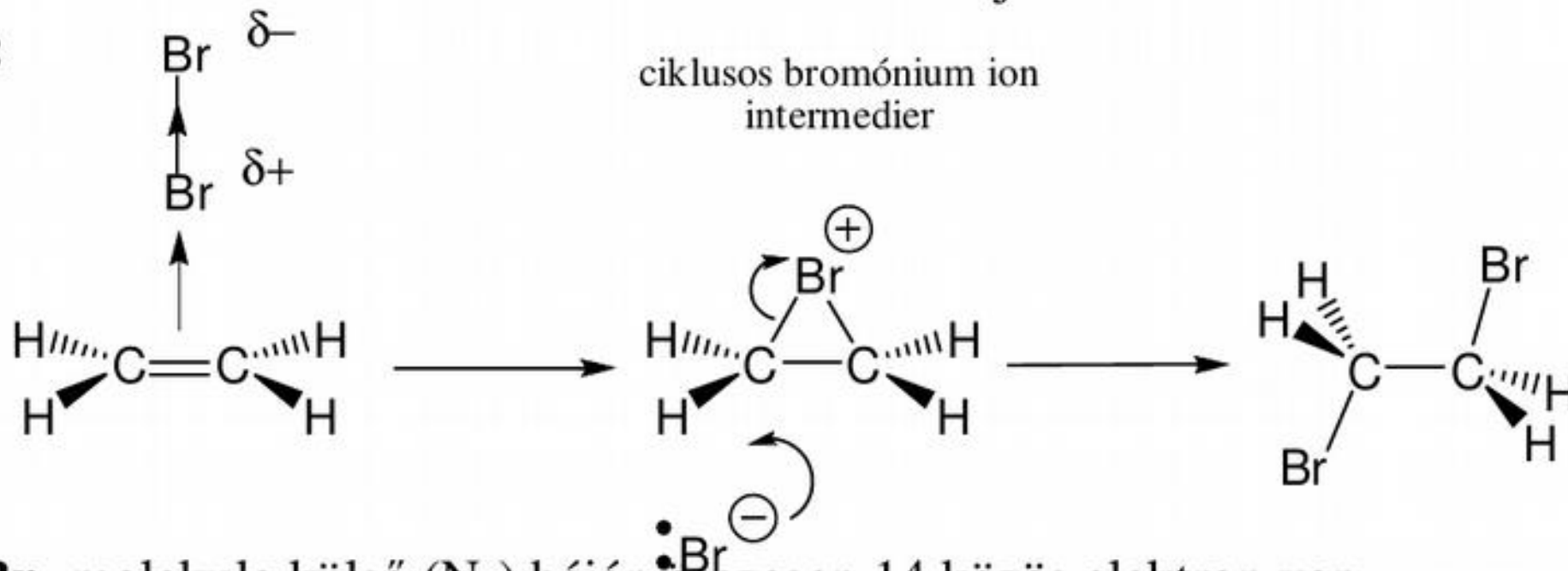


következtetés: Tehát **nem a feltételezett két lépésés *szin*-addíció** mechanizmus szerint megy a reakció!

Elektrofil addíció C-C kettős kötésre

kérdés: Mi történik tehát a brómmolekula addíciója során?

válasz:



1. A Br_2 molekula külső (N-) héján összesen 14 közös elektron van, ezért az **elektronhiányosnak** tekintendő.
2. Koordinálódik a π -elektronhoz, ami polarizálja a Br_2 molekulát.
3. A Br_2 **heterolitikusan hasad**, s így kialakul a bróm kation, amely mint elektrofil addíciónálódik a π -rendszerre, létrehozva a ciklusos bromónium köztterméket.

Ez a mechanizmus csak a brómra igaz, más halogénre nem!

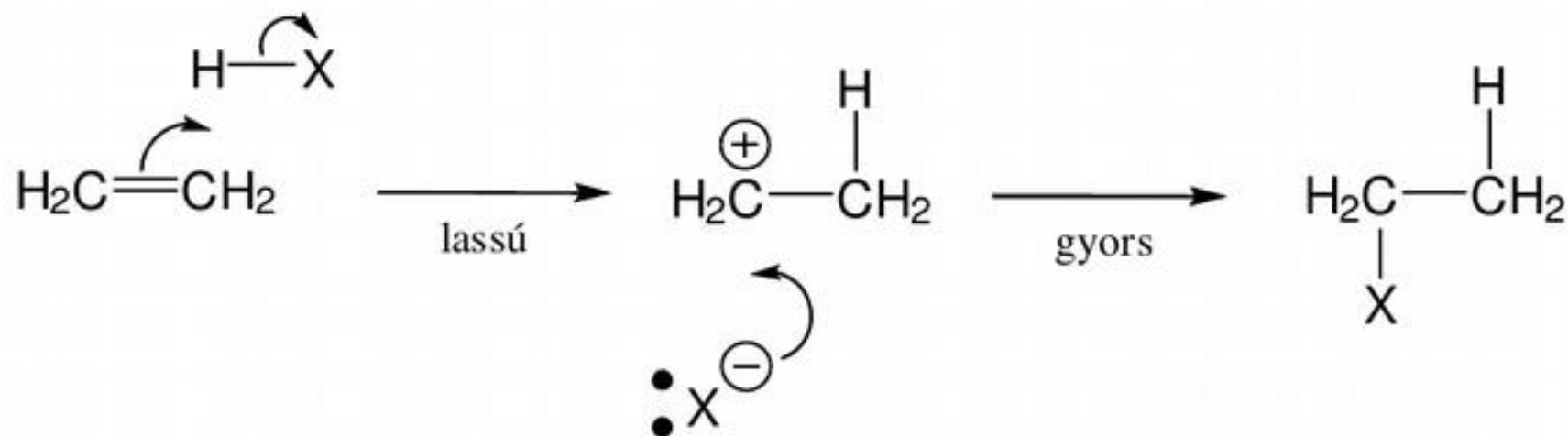
A példa jól mutatja a mechanizmus és a sztereokémia összefüggését!

Elektrofil addíció C-C kettős kötésre

kérdés: Lehet-e egy **szimmetrikus** alkénre pl egy hidrogén-halogenideket (H-X ahol X = F, Cl, Br és I) addicionálni?

válasz: igen

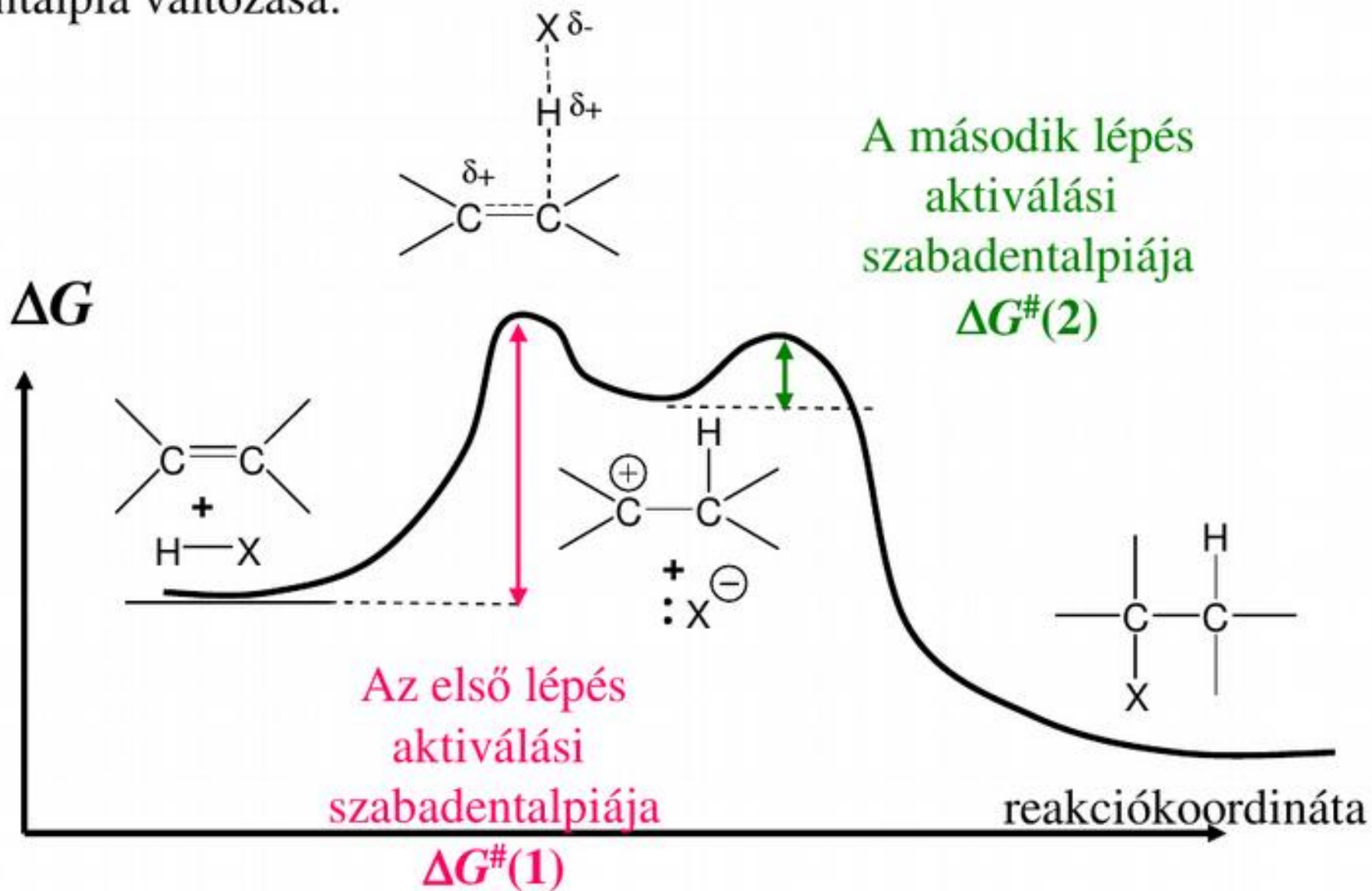
tapasztalat: A reagens savierőssége (HI > HBr > HCl > HF) határozza meg az addíció sebességét. Így vélhetőleg a **protonálási lépés** a sebesség-meghatározó.



memo: Mivel a hidrogénnek nincs elektronpárja így a köztitermék a „nyílt” és nem a ciklusos karbokation.

Elektrofil addíció C-C kettős kötésre

A **szimmetrikus** konstitúciójú szubsztrátra történő HX addíció szabadentalpia változása:



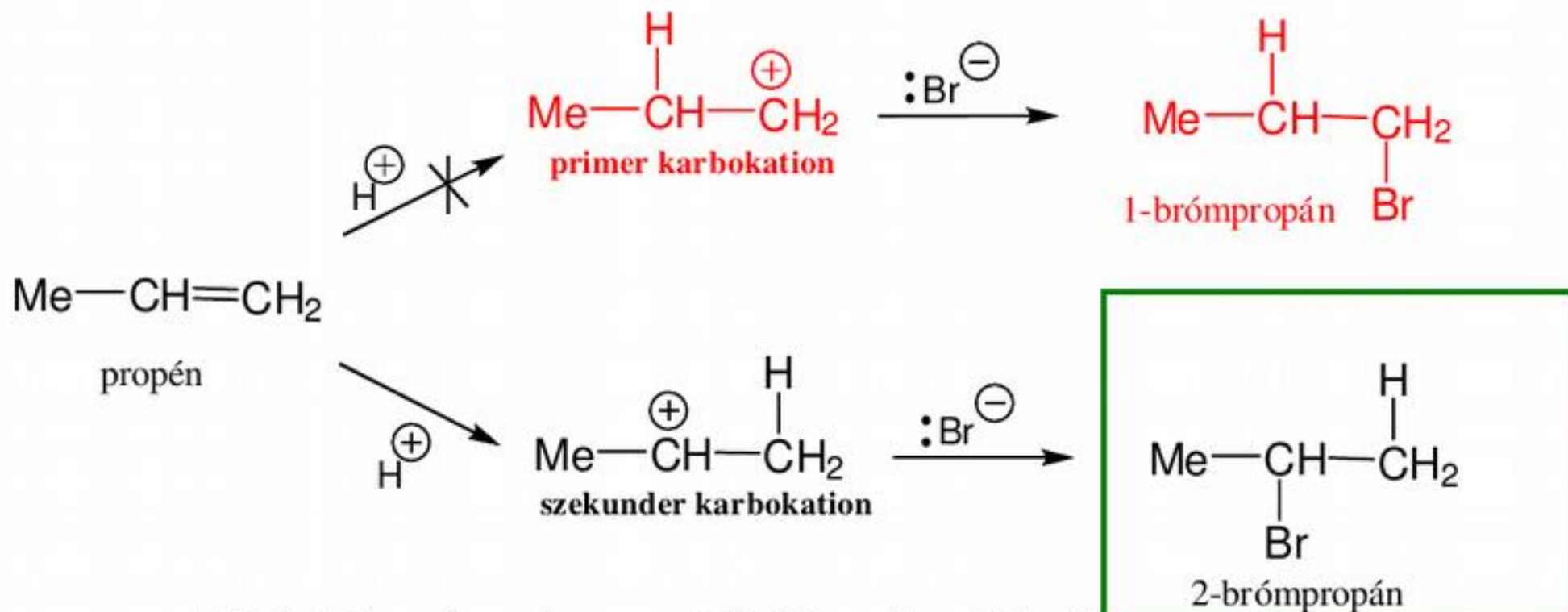
Elektrofil addíció C-C kettős kötésre

kérdés:

Hogyan addicionálódik a HX egy **nem szimmetrikus** konstitúciójú szubsztrátra?

tapasztalat:

tekintsük a propént mint szubsztrátot:

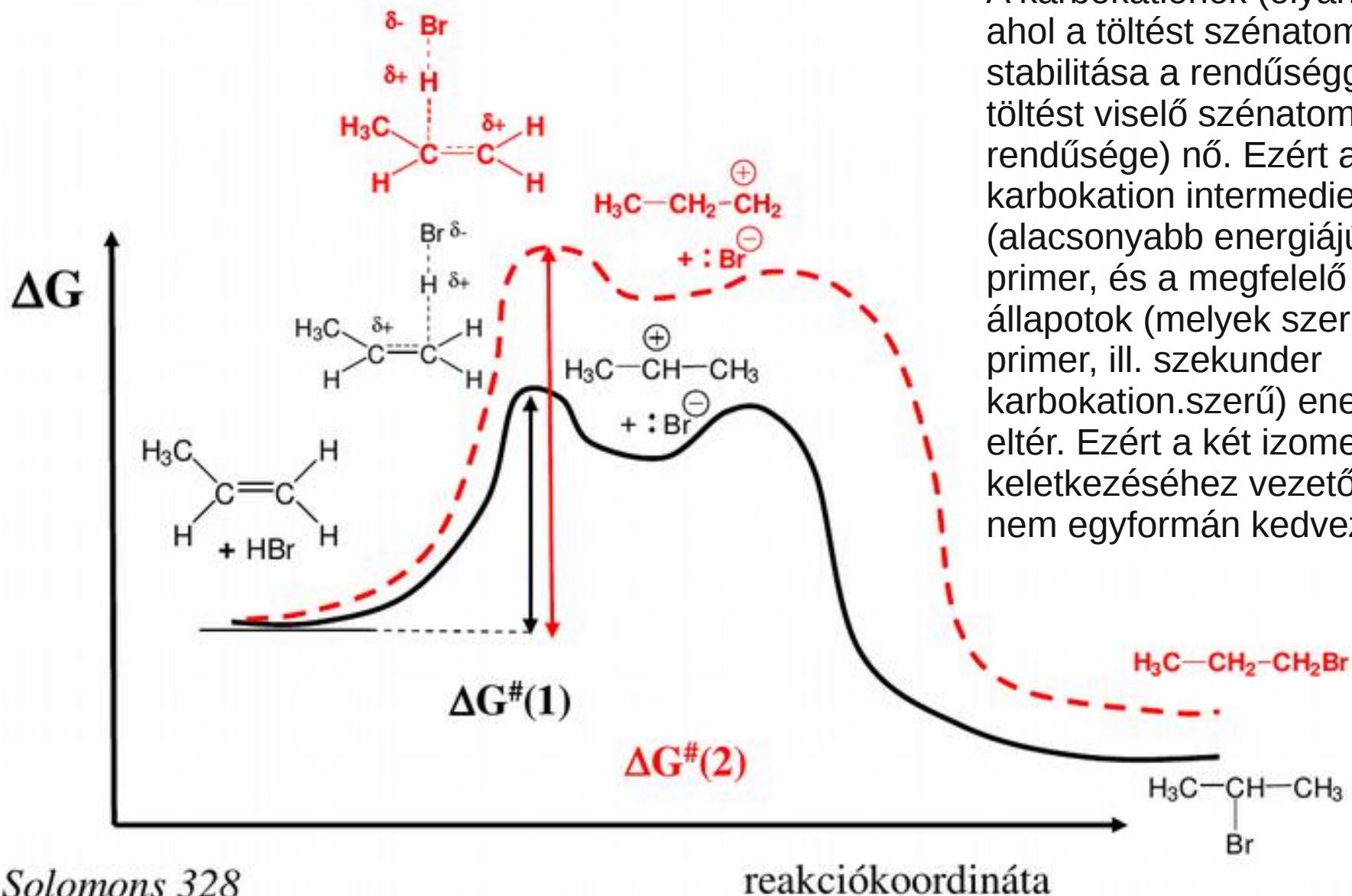


A két lehetséges izomer közül **csak a 2-brómpropán keletkezik.**

kérdés: mi lehet a szelektivitás molekuláris háttere?

Elektrofil addíció C-C kettős kötésre

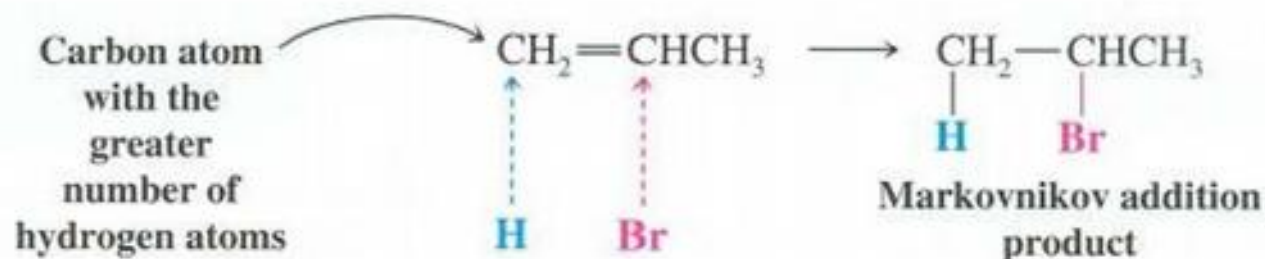
Aszimmetrikus konstitúciójú szubsztrátra történő HX addíció szabadentalpia változása:



A karbocationok (olyan kationok, ahol a töltést szénatom viseli) stabilitása a rendűséggel (= a töltést viselő szénatom rendűsége) nő. Ezért a szekunder karbocation intermedier stabilabb, (alacsonyabb energiájú), mint a primer, és a megfelelő átmeneti állapotok (melyek szerkezete primer, ill. szekunder karbocation.szerű) energiája is eltér. Ezért a két izomer keletkezéséhez vezető reakcióút nem egyformán kedvező.

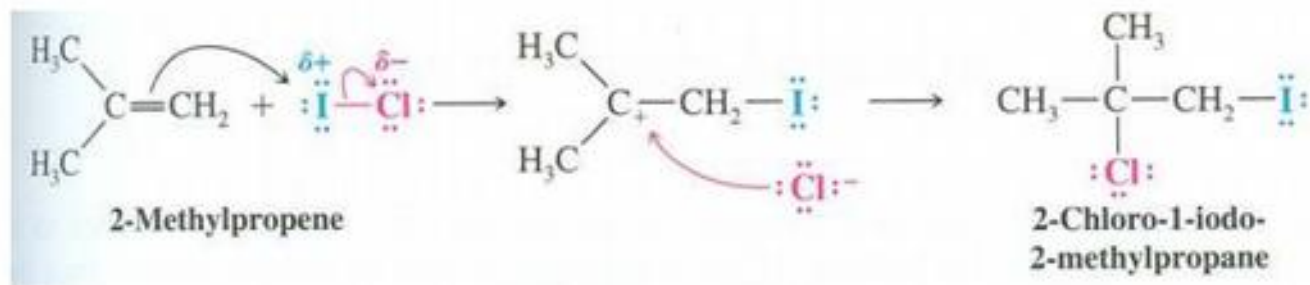
Elektrofil addíció C-C kettős kötésre

Markovnyikov szabály: A HX alkénre történő addíciója során, a hidrogén atom arra a szén atomra addicionál, amelyik már eleve több hidrogént hordoz.



Markovnyikov szabály: Egy nem szimmetrikus reagens kettős kötésre történő ionos mechanizmusú addíciója során a reagens elektrofil része a kettős kötés szén atomjához úgy kapcsolódik, hogy a keletkező karbokation intermedier minél alacsonyabb energiájú legyen.

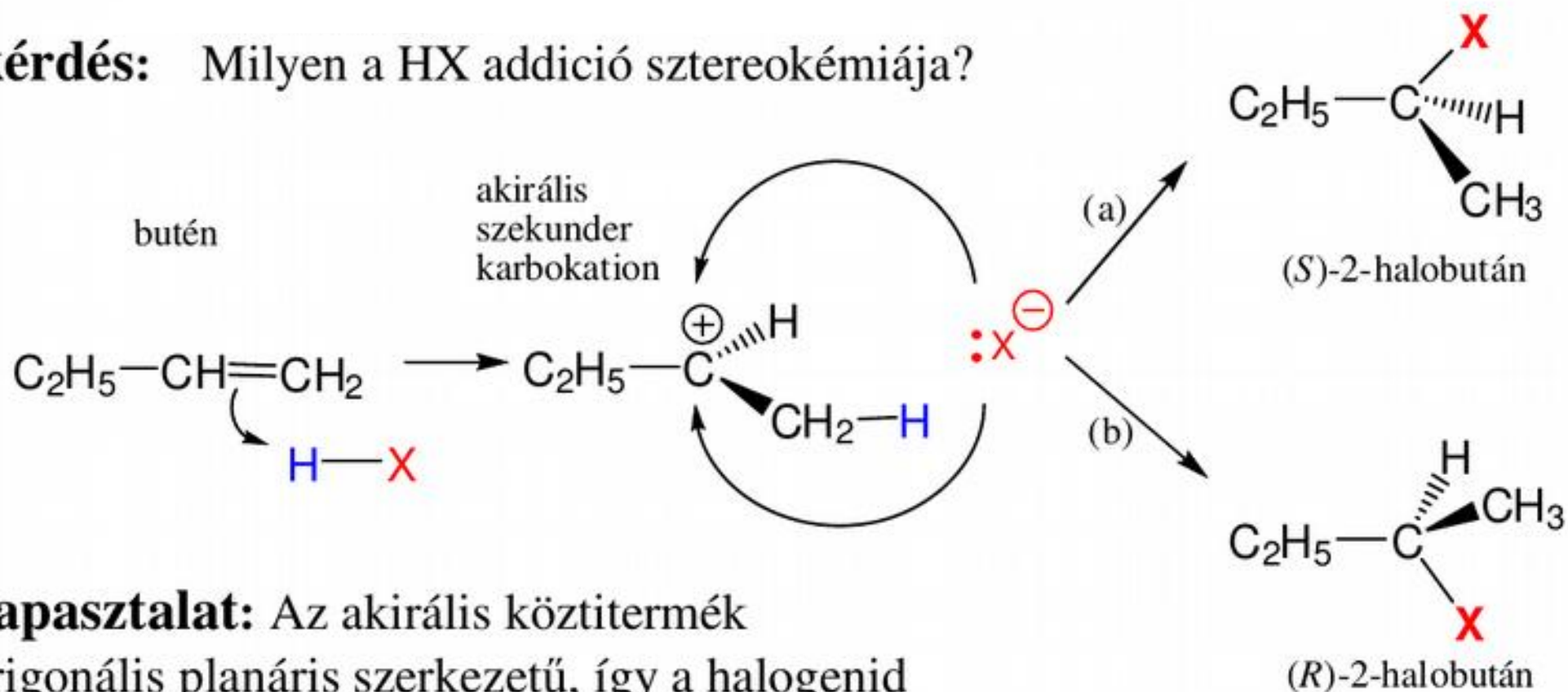
Az elektrofil addíció az első, sebesség meghatározó lépés, ami az egész reakció lefolyását meghatározza.



Regioszelektív reakció: Ha egy reakció potenciálisan két vagy több konstitúciós izomer terméket adhatna, de csak egy keletkezik (vagy túlnyomóan egy), a reakció regioszelektív. HX addíciója alkénre regioszelektív, ha több termék keletkezésére van lehetőség.

Elektrofil addíció C-C kettős kötésre

kérdés: Milyen a HX addíció sztereokémiája?



tapasztalat: Az akirális köztitermék trigonális planáris szerkezetű, így a halogenid egyenlő eséllyel lép be mind az (a) mind a (b) úton **racemátot** eredményezve.

válasz: az addíció **nem sztereoszelektív**.

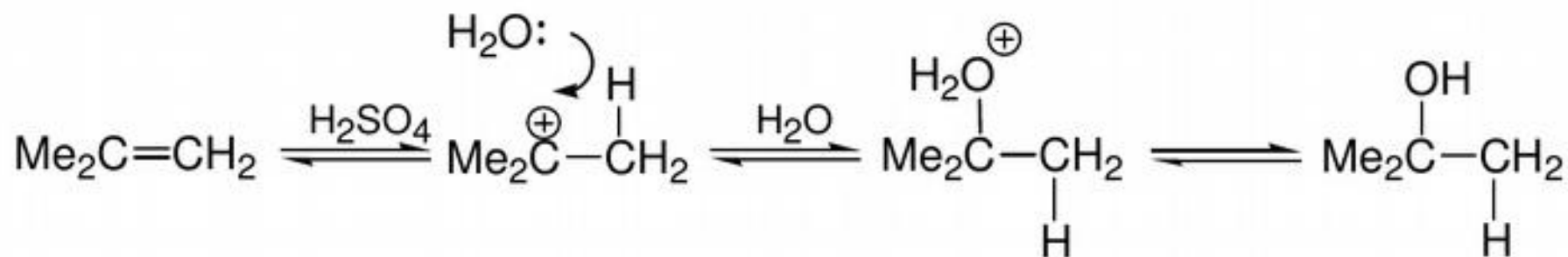
Elektrofil addíció C-C kettős kötésre

kérdés:

Lehet-e H₂O-t addicionálni?

tapasztalat:

ha olyan sav van jelen, amelynek **anionja gyenge nukleofil** (pl. H₂SO₄ ⇒ HSO₄⁻) akkor a vízaddíció eredményes és a következő módon megy:

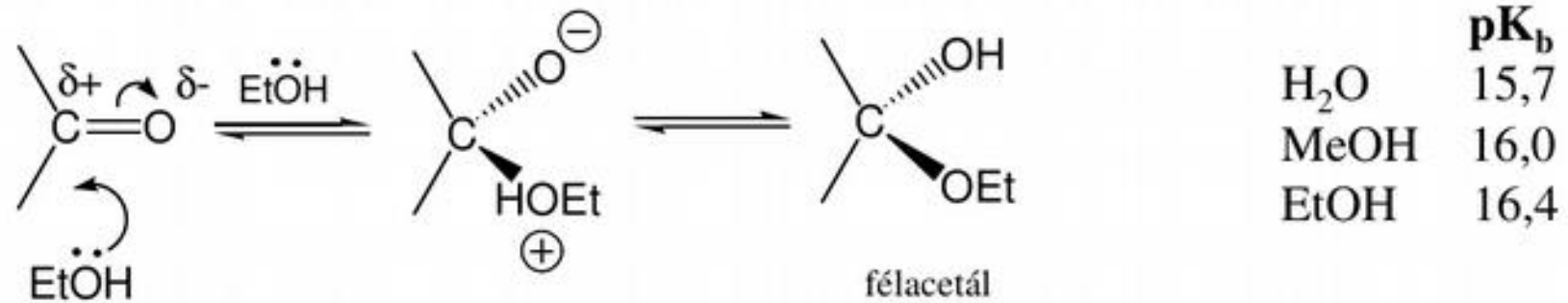


magyarázat:

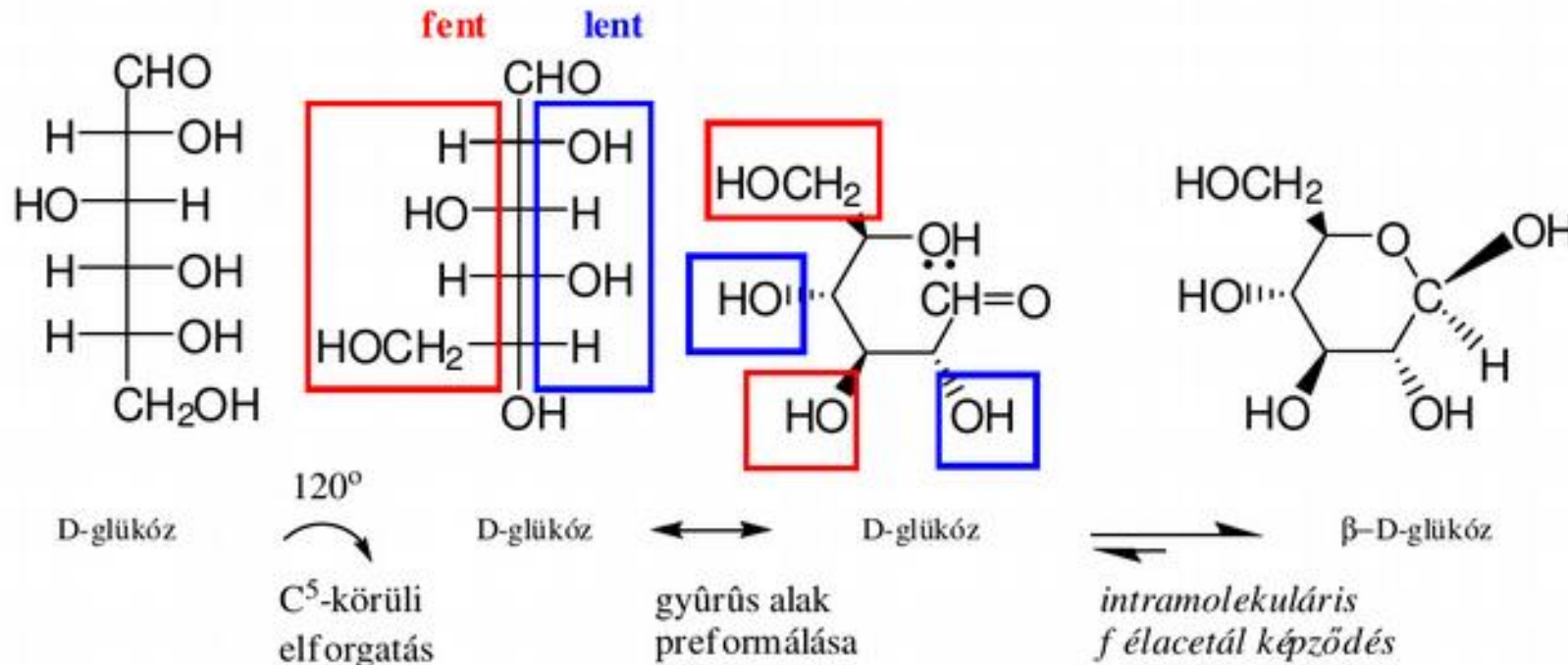
a víz a sav anionjánál **erősebb**, de legalább is **eredményesebb** nukleofil. Ez egy savkatalizált addíció.

Nukleofil addíció C=O kettős kötésre

A karbonilcsoportban a szénatom elektronhiányos, így nukleofilokkal képes reagálni



memo: gyűrűs félacetálok (aldózok és ketózok piranóz és furanóz gyűrűi)

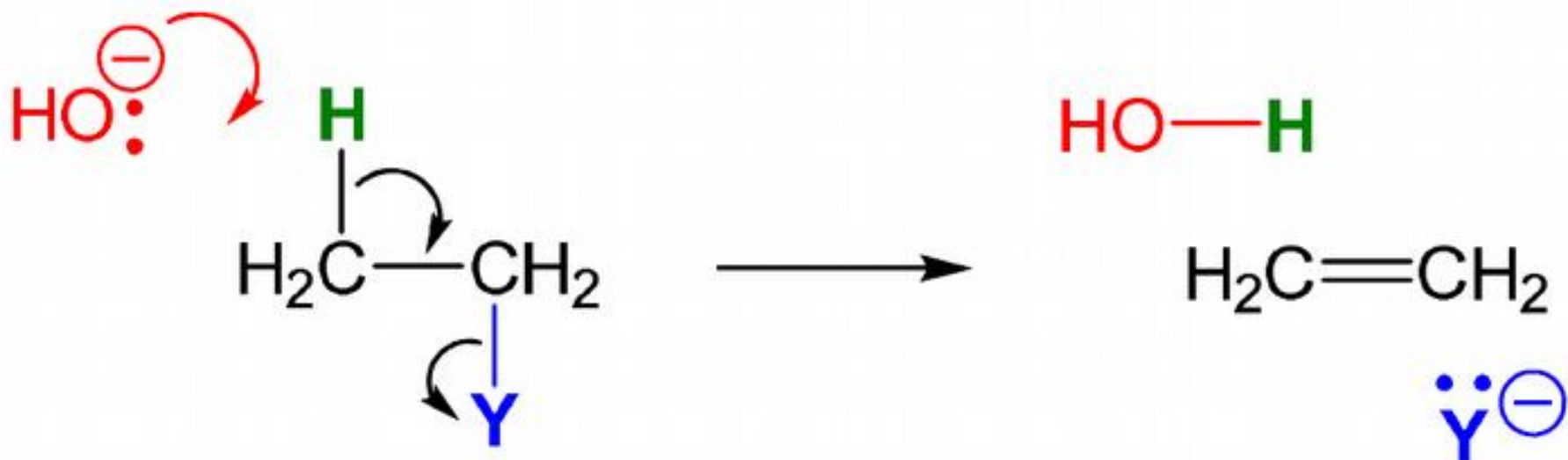


C-C kettős kötés kialakulását eredményező elimináció

Bázis által kiváltott (katalizált) reakció

kérdés: Tudunk-e szelektíven **eltávolítani** a szénláncról egy **H** és egy **Y** szubsztituenst, ha azok **vicinális** helyzetűek?

válasz: Igen, ha Y például halogén (mondjuk Br atom):



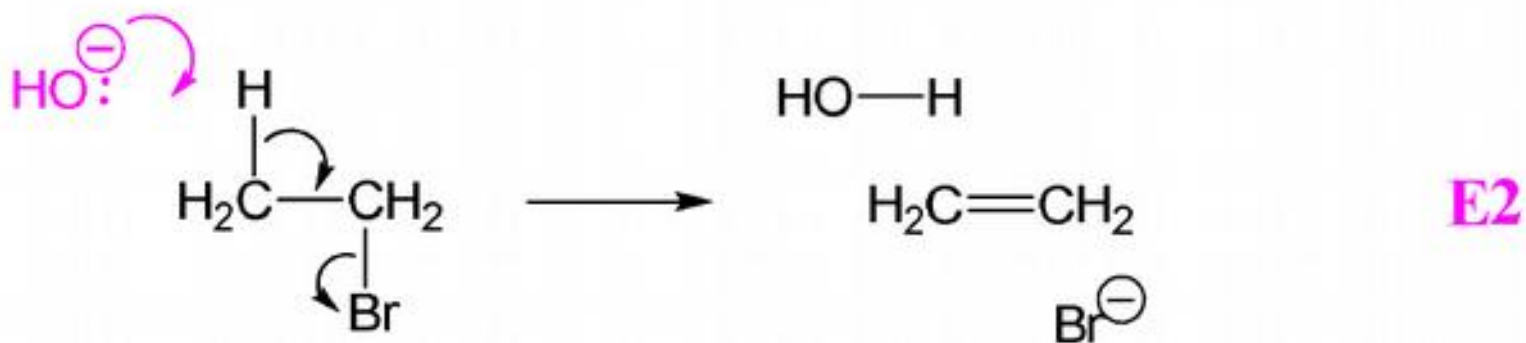
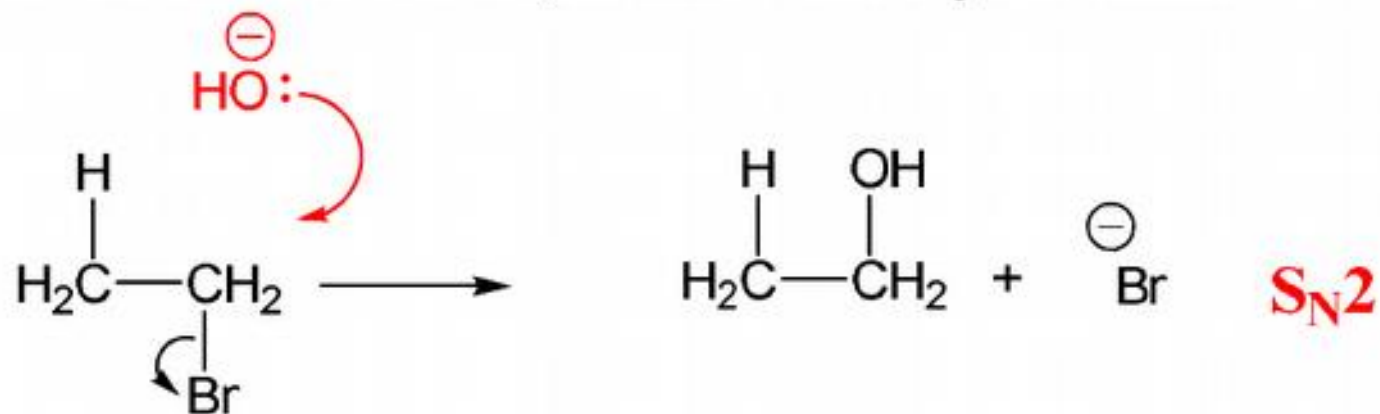
kísérlet: Tekintsük az etil-bromid (tehát $\text{Y} := \text{Br}$) viselkedését lúgban.

leírás: H és Y eltávolítása **vicinális** helyzetből történik.

Ezért 1,2- vagy α, β - (röviden β -) eliminációról beszélünk.

C-C kettős kötés kialakulását eredményező elimináció

memo: Már láttuk olyan reakciót, amikor az OH^- kölcsönhatásba lépett egy alkil-halogeniddel (pl. EtBr-dal egy $\text{S}_{\text{N}}2$ -reakció során). Ott az OH^- **mint nukleofil**, itt **mint bázis** fejt ki hatását:

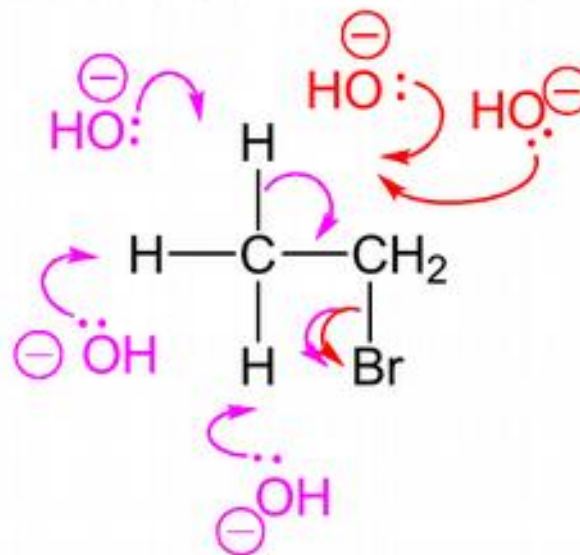


C-C kettős kötés kialakulását eredményező elimináció

kérdés: Honnan tudja az OH^- hogy mikor **nukleofil** és mikor **bázis**?

válasz: **Nem tudja!** A különbségtétel a **szubsztrátum** (EtBr) oldalán, illetve a **reakciók** kinetikai **paramétereiben** keresendő.

Az OH^- az EtBr-ot
„kerülgeti mint macska a forró kását”



példa: $\text{EtCl} + \text{OH}^-$ főleg EtOH (99%) és csak kevés (1%) $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ eredményez, a domináns reakció tehát az $\text{S}_{\text{N}}2$
 $^i\text{PrCl} + \text{OH}^-$ kevés $^i\text{Pr-OH}$ -t (20%) és főleg (80%) $\text{CH}_3\text{-CH}_2=\text{CH}_2$ eredményez, így itt a jellemző reakció az $\text{E}2$

C-C kettős kötés kialakulását eredményező elimináció az E2 reakcióút

kérdés: egyformán **befolyásolja-e** mind a reagens mind a szubsztrátum koncentrációja az eredményes reakciót?

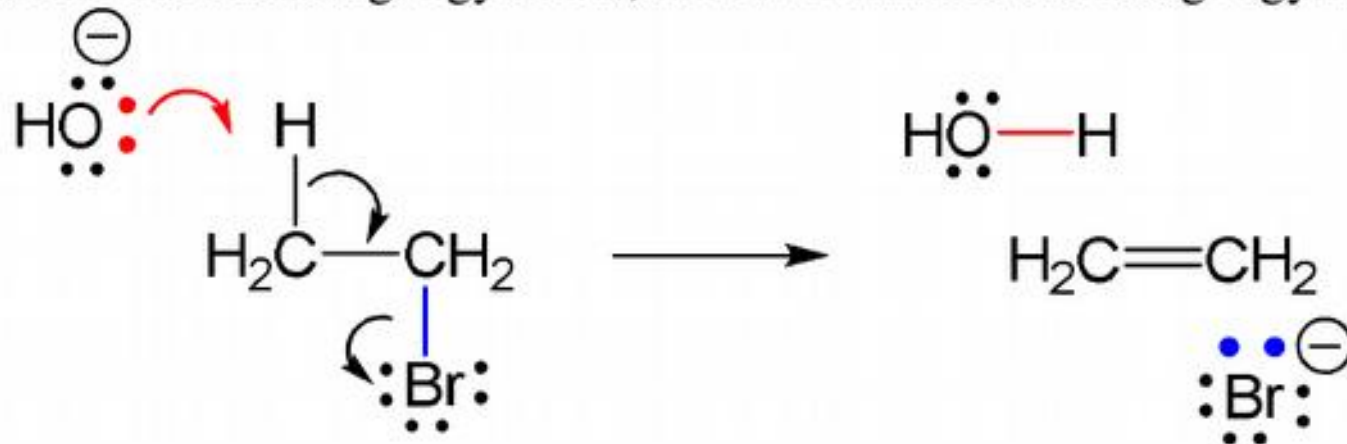
válasz: **igen**

módszer: mint az S_N reakció során, most is megfigyeljük a résztvevő molekulák koncentrációinak alakulását az **idő függvényében**.

tapasztalat: **mind a reagens (OH^-) mind a szubsztrátum ($\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$)** moláris koncentrációja befolyásolja a reakciósebességet, azaz

$$d[\text{CH}_2=\text{CH}_2]/dt = k[\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}][\text{OH}^-]$$

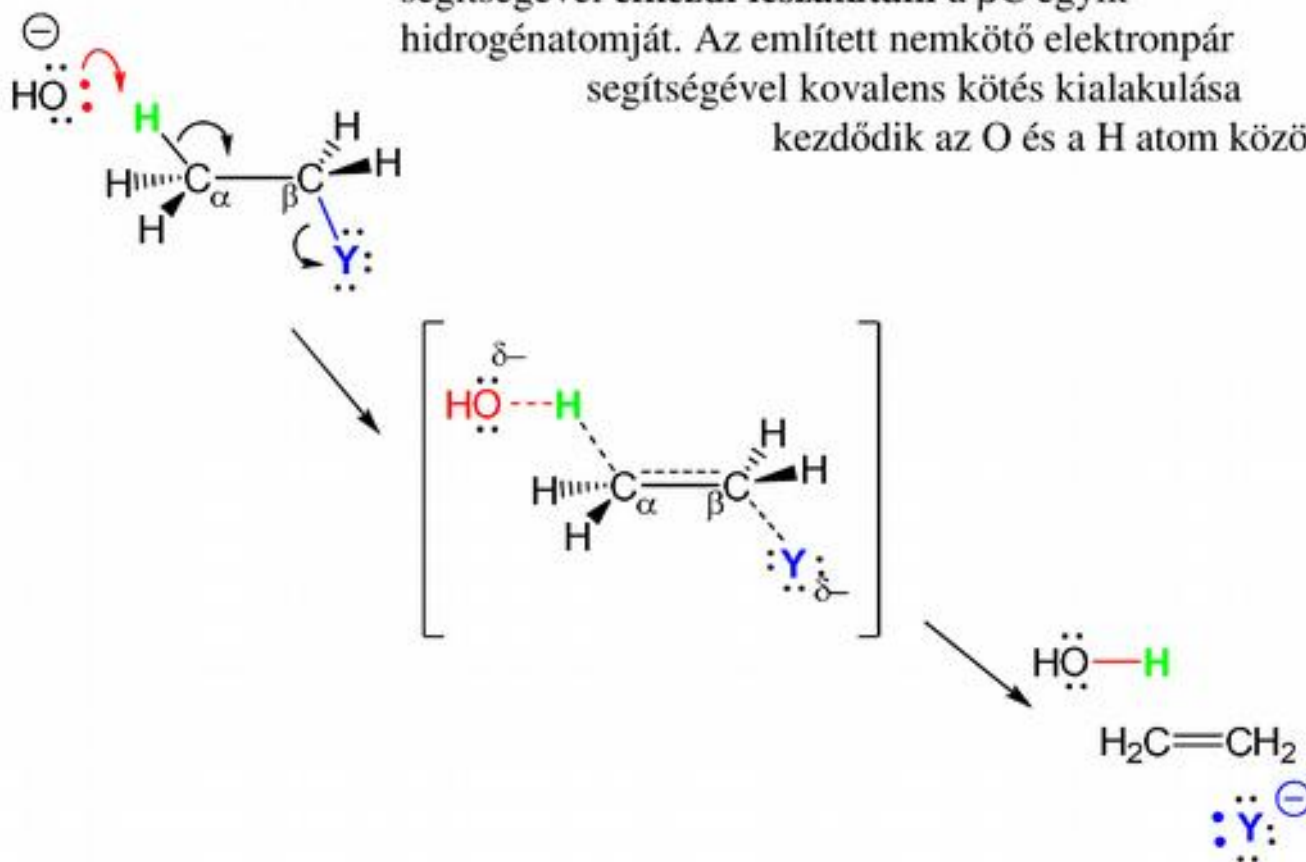
(másodrendű reakció sebességi egyenlete, ahol k a reakció sebességi együtthatója)



C-C kettős kötés kialakulását eredményező elimináció az E2 reakcióút

mechanizmus:

a folyamat bimolekuláris (szinkronizált) a hiroxidion egyik nemkötő elektronpárjának segítségével **elkezd** leszakítani a β C egyik hidrogénatomját. Az említett nemkötő elektronpár segítségével kovalens kötés kialakulása kezdődik az O és a H atom között.



Közben a szakadó H-C kötés során **felszabaduló elektronpár** megkezd a π kötés kialakítását. Minek hatására a távozó csoport „távozni kezd”.

C-C kettős kötés kialakulását eredményező elimináció az E1 reakcióút

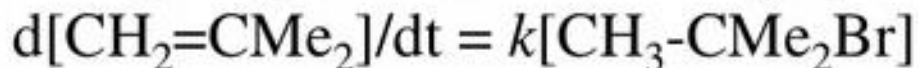
kérdés: ugyanazzal a mechanizmussal megy erős bázis jelenlétében az **etil-bromid** mint a **terc-butil-bromid**?

válasz: Nem kell hozzá OH⁻, már a vízzel önmagában is megy a reakció.

magyarázat: elimináció kapcsán nincs sztérikus gátlás, hiszen nem a szénatomon megy a reakció, mert akkor szubsztitúció volna-, **hanem „külső” protonon.**

módszer: mint az E2 reakció során, most is megfigyeljük a résztvevő molekulák koncentrációinak alakulását az idő függvényében.

tapasztalat: csak a szubsztrátum (tBuBr) moláris koncentrációja befolyásolja a reakciósebességet, azaz



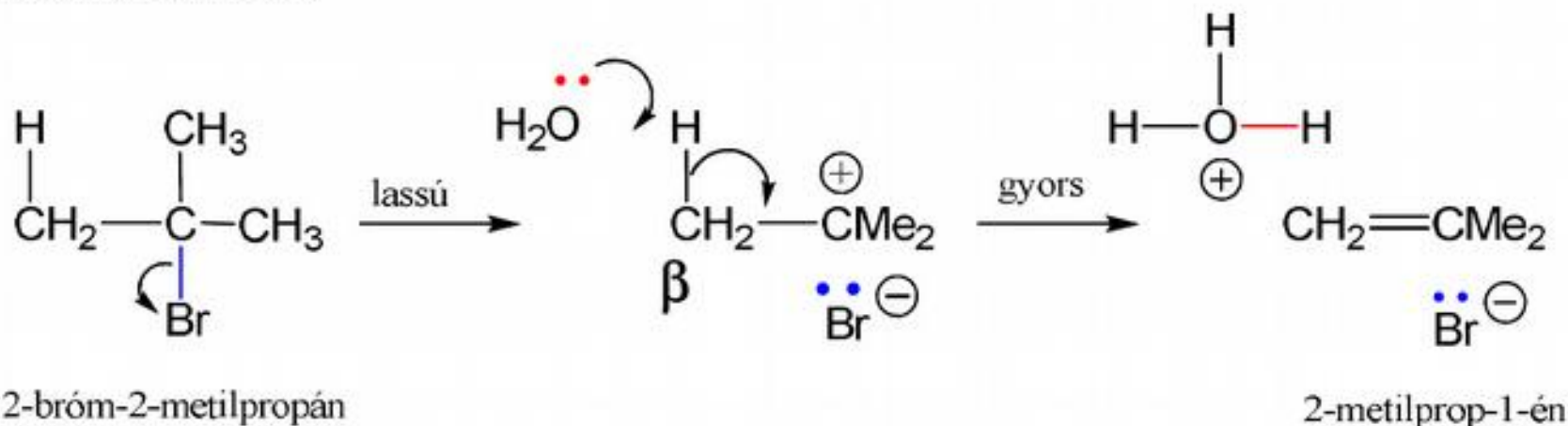
(elsőrendű reakció sebességi egyenlete, ahol k a reakció sebességi együtthatója)

(A sebességmeghatározó lépés az ionizáció (a karbokation képződése))

C-C kettős kötés kialakulását eredményező elimináció az E1 reakcióút

E1 „csináld magad” amit az oldószer (víz) vált ki. Miután lehasadt az anion, a karbokation úgy stabilizálódik hogy lead egy protont egy környezeti víznek.

mechanizmus:



következtetés: A víz koncentrációja irreleváns [H₂O] (mint az S_N1-nél)
A bróm lehasadása (1. lépés) és így a **karbokation képződése** a **sebességmeghatározó** lépés.

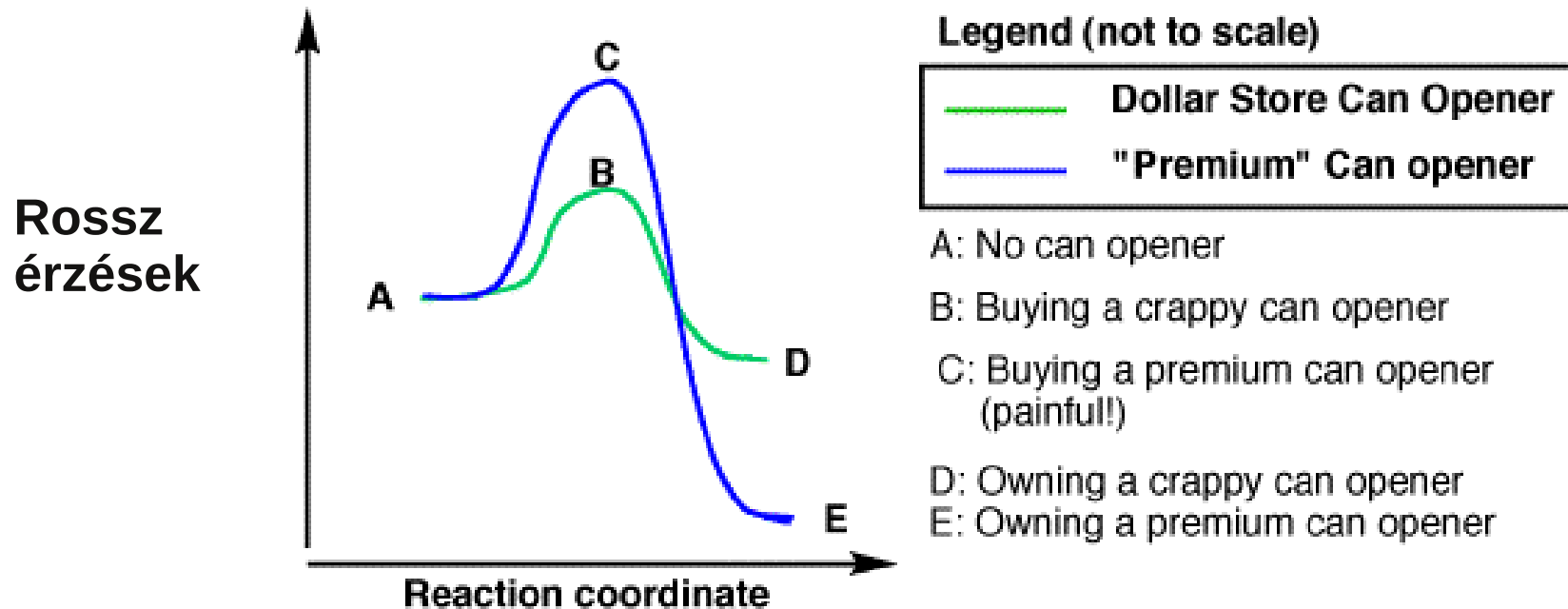
memo:

Megint itt a talány, hogy honnan tudja az H₂O hogy mikor **nukleofil** és hogy mikor a szerepe **csupán szolvólízis, mint most?**

Nem tudja, ezért is kapunk gyakran „vegyes” terméket.

Kinetikai vs. termodinamikai kontroll

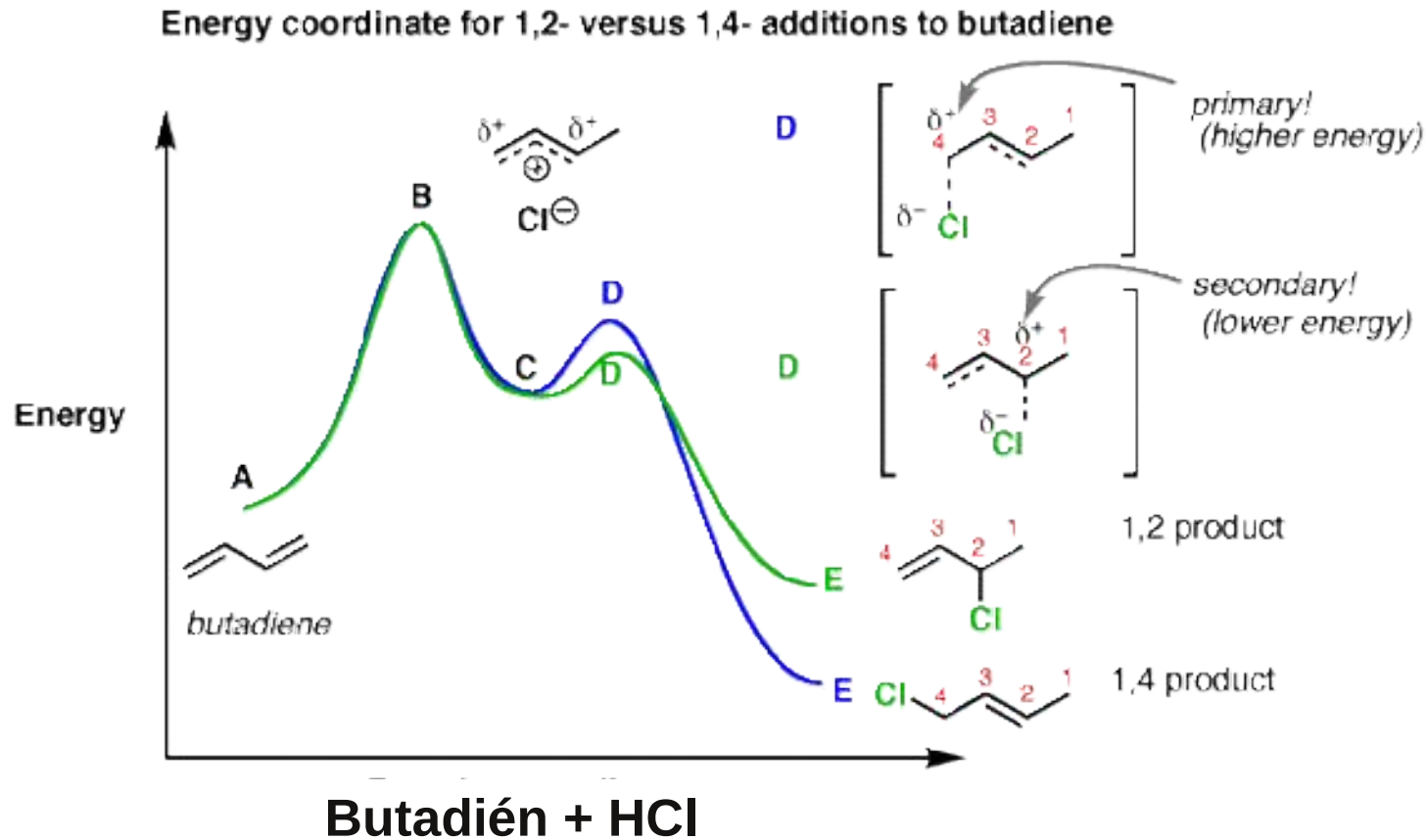
Reaction coordinate for can opener purchases



Az olcsó és a drága konzervnyitó esete

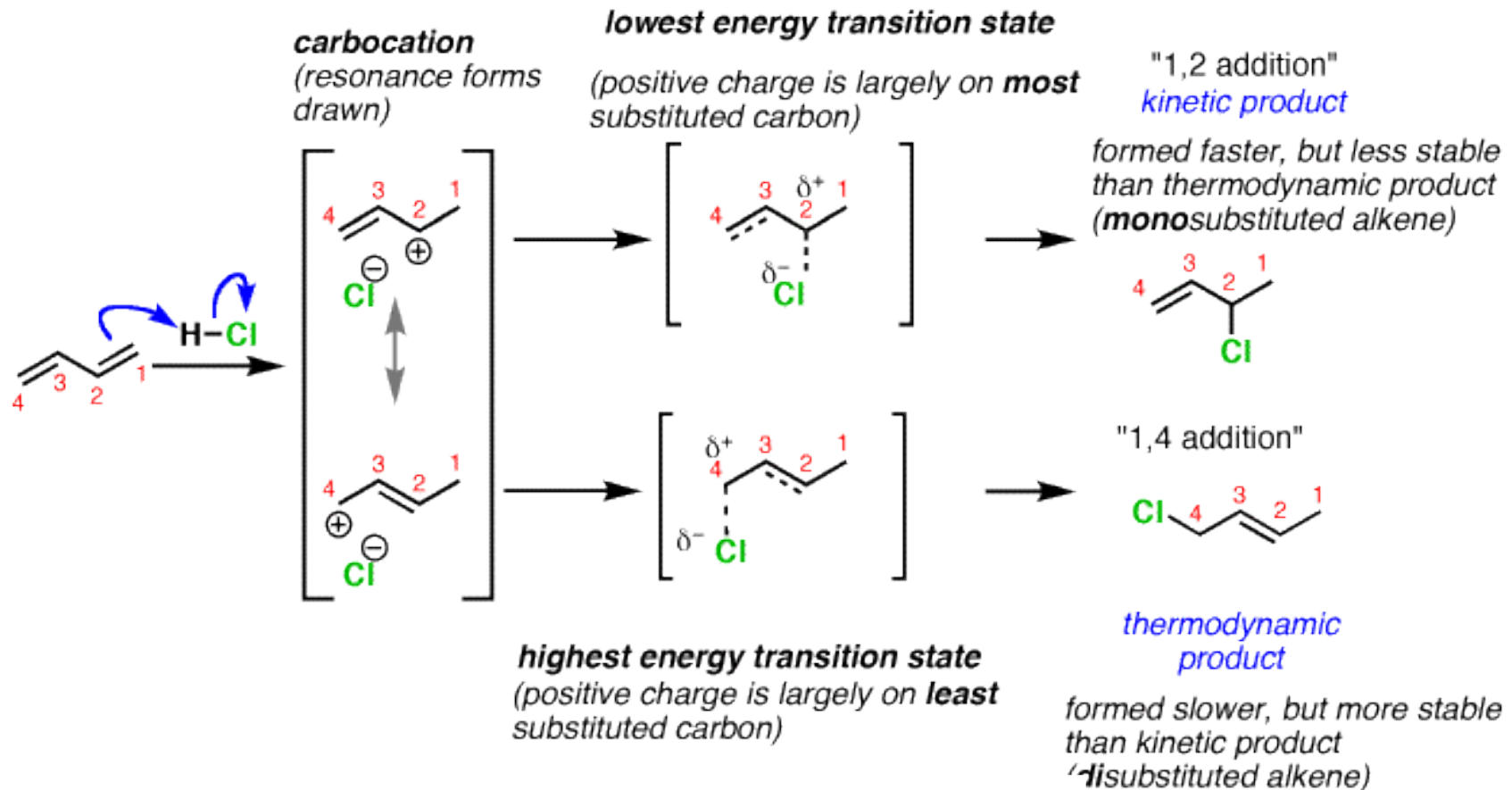
Feltétel, hogy a stabilabb termékhez vezető reakcióút aktiválási energiája magasabb legyen, mint a kevésbé stabil termékhez vezető. Ezen felül a termodinamikai kontroll feltétele, hogy a reakció egyensúlyi legyen, azaz a $D \rightarrow E$ átalakulás reálisan végbemehessen (visszaalakulással természetesen).

Kinetikai vs. termodinamikai kontroll



Két izomer keletkezhet, az 1,2-addíciós és az 1,4addíciós ternék.
 A kedvezőbb energiájú 1,4 ternék felé vezető aktiválási energia magasabb,
 mint a kedvezőtlenebb energiájú 1,2 ternék felé vezető.
 Ennek oka, hogy a megfelelő átmeneti állapotok első vagy másodrendű
 karbokationra is hasonlíthatnak.

Kinetikai vs. termodinamikai kontroll



1,2 termék: "kinetikus termék": gyorsabban kialakul (az alacsonyabb aktiválási energia miatt a reakciósebesség nagyobb ezen az úton), de kevésbé stabil

1,4 termék: "termodinamikai termék": stabilabb, magas hőmérsékleten (ahol az aktiválási energiagát magassága könnyebben leküzdhető) ez a domináns termék

dominant product at high temperature

Stryer
571.oldal
309. oldal