

① Izomeria típusai, stereokémiai alapszabályok, konfiguráció, konformáció

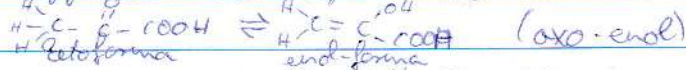
- izomeria: 2 v. több vegyületnek azonos az összegképlete, de eltérő a szerkezete

- molekula térszerk. meghatározói: konstitúció, konfiguráció, konformáció

- konstitúciós izomeria (szerkezeti):

• atomok kapcsolódási sorrendje eltér  $\text{CH}_3-\text{O}-\text{CH}_3$  dimetil-éter  $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$  etil-alkohol

• tautomeria: egy H és egy kétfős kötés helyreteleküléséről



• szénlánc:  $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{CH}_3-\underset{\text{CH}_3}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

- stereoizomeria:

• azonos konstitúció, de különböző térszerkezet

• konformáció: a molekulában az egymással közvetlenül nem kapcsolódó atomok viszonylagos térbeli elrendeződése

• konfiguráció: a molekulában egy adott C atom (párhoz kapcsolódó) atomok helyzete

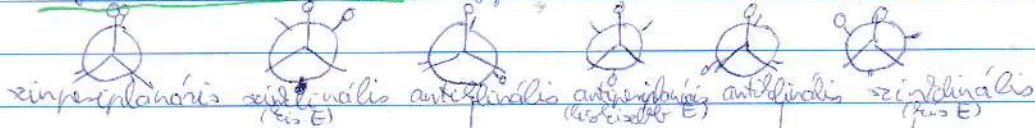
• enantiomerek: egymással fedésbe nem hozható féltükrégi párok

(azonos intermolekuláris térszerk., különböző konfiguráció)

• diasztereomerek: nem enantiomerek

(különböző intermolekuláris térszerk., azonos összekapcsoltság)

- konformációs izomeria: egyszeres kötéssel körüli rotációval egymásba alakítható



konformációs enantiomerek, a többi páros diasztereomerek



szél  $\rightleftharpoons$  felszél  $\rightleftharpoons$  szánt  $\rightleftharpoons$  led  $\rightleftharpoons$  szánt  $\rightleftharpoons$  felszél  $\rightleftharpoons$  szél

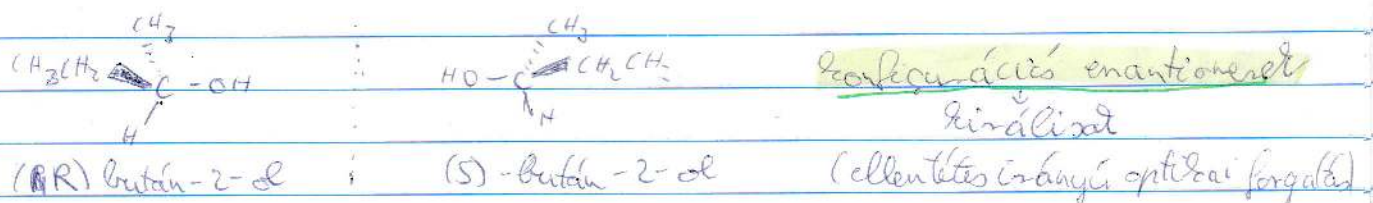
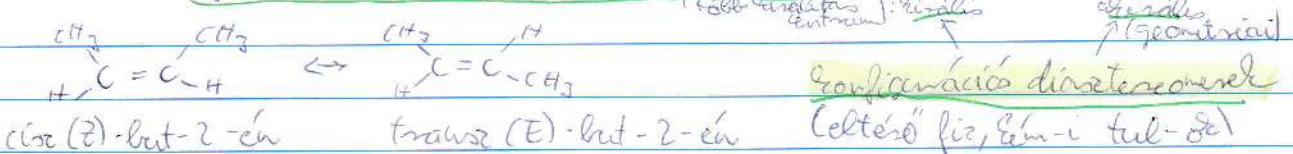
konformációs enantiomerek

- konfigurációs izomeria:

• kötés menti rotációval nem alakítható egymásba

• cis-transz izomeria = geometriai

• 2 ligandum viszonylagos térbeli elrendezése a kötés mentén





Chirális molekula:

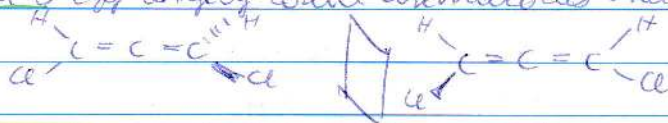
amely a tükröt képezével nem azonos

• 0 tükrözési szimmetriatengelye

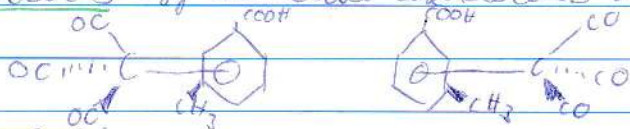
retenciósnak antitropus: 4 különböző substituált viceli C atom → centrális chiralitás

(nem szükséges, de nem elégítőse feltétel)

axiális chiralitás: egy tengely körüli elrendződés eredménye



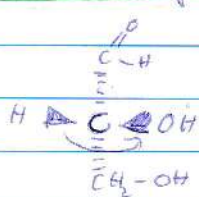
planáris chiralitás: egy sík körüli elrendződés eredménye



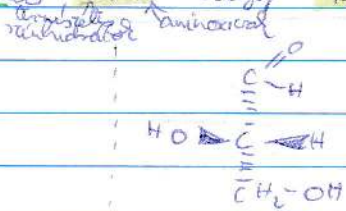
centrális chiralitás

helikális chiralitás: spirális szerkezetű

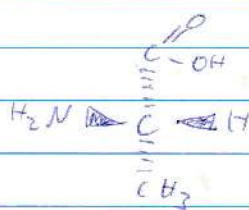
konfiguráció jelölés: D/L vagy R/S



D-glicerinaldehid



L-glicerinaldehid



L-alanin

izomer

konfigurációs  
tautomer

retenciósnak

dipolimer

enantiomer

konfigurációs

konformációs

konformációs

konfigurációs

diszkrét  
szimmetriai központos

axiális  
hálts retenciósnak  
centrum

retenciósnak  
alkohol-retenciósnak  
izomer

szabványt képez  
retenciósnak  
anti-klinalis

optikai központos

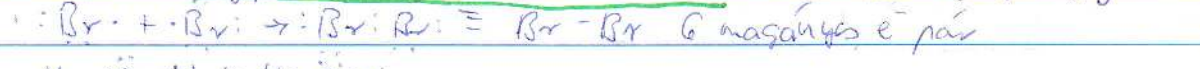


① Lewis Érintés, Hibridizáció, Molekulapálya-elmélet, VB-módszer, Mercehia, Meromer-hatás-szerkezet, Alkén és alkín

- Lewis elmélet: a kovalens kötéssel szembe fordított molekulákban a vegyérték e<sup>-</sup>-ok megszámlálásával az atomok kovalens konfigurációjára valószínűleg meg

- Lewis Érintés: 1 kovalens kötés = 1 vegyérték-pár = 2 pont  
 egy molekulában több is lehet

ionos töltés az alkotó atomok formális töltésének összege adja =  
 vegyérték e<sup>-</sup>-ok - 1/2 kötő e<sup>-</sup>-ok  $Li \cdot + \cdot \ddot{F} \cdot \rightarrow [Li^+][\ddot{F}]^-$

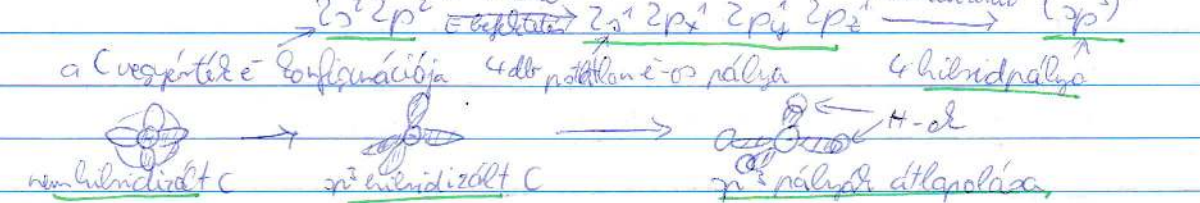


- Hibridizáció: pályakeverés (kötés ~ 2e<sup>-</sup> és, 2 centrum közre)

atompályák pálya fúzió kombinálva új pályafüzet kapunk (hibrid pályák)

Pauli-elv alapján: az e<sup>-</sup>-ok ellentétes spinnel töltik fel → 1 pályán max 2 e<sup>-</sup>

metán szerkezeti: sp<sup>3</sup> hibridizáció

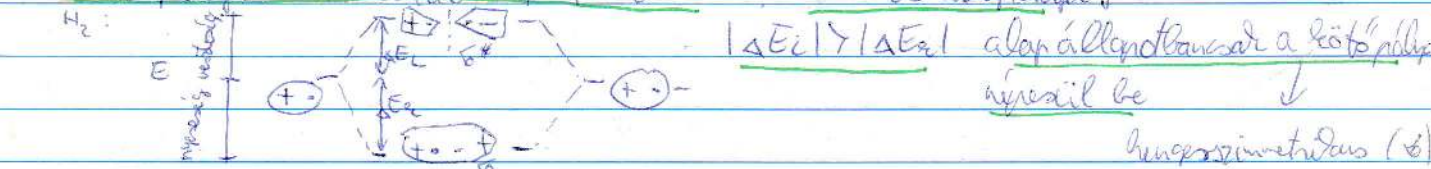


- Molekulapálya elmélet:

egy kémiai kötés létesítésében a molekula atomjainak pályái (AO) részt vesznek

de lokalizált kötésre jöhetnek létre, diszkrét E-ju molekulapályák képződnek  
 atompályák lineáris kombinációi

$\psi_{\text{kötő}} = c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2$        $\phi$ : atompálya } hullámfüggvény  
 $\psi_{\text{antikötő}} = c_1 \phi_1 - c_2 \phi_2$        $\psi$ : molekulapálya

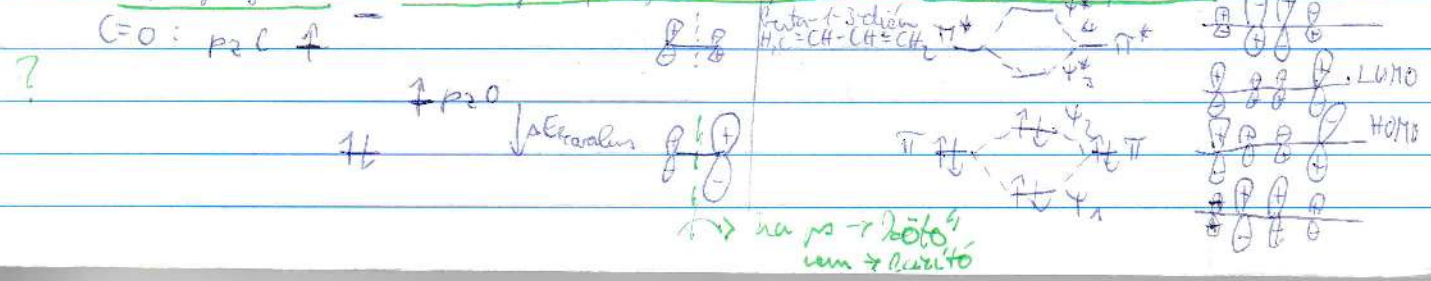


$\psi^2_{\text{kötő}} > \psi^2_{\text{antikötő}}$

stabil a molekula, ha a kötéspályák betöltöttsége nagyobb

többszörös kötésnél a nagyobb E-ju kötés a p<sub>z</sub> AO-k kovalens kötére

Kötőpálya feltétele: azonos előjeli pályák átlapolása → ellentétes előjelűek





vegyéti kötés módszer (VB):

- a kötések lokalizáltak, mivel egyik 10 a másik 10-val létezik közt
- a hullámfüggést a lehetőleges hatáskeresztmetszeli fu-érel súlyozott átlaga ( $c_i$ )  
(Rauvikenus formula)

a  $c_i$ -ket úgy választják, hogy a rendszer E-ján minimális legyen

rezonancia:

ha egy molekulának több Lewis képlet létezik  $\rightarrow$  rezonancia elvvel  
a hipotetikus képlet, rezonáns hatáskeresztmetszeli-el kombinációját adja a valóságot

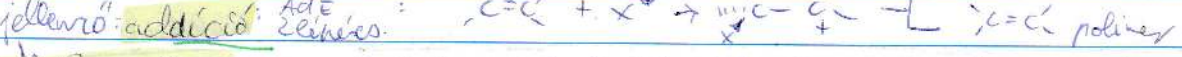
a tényleges E bármely hatáskeresztmetszeli-el jánál kisebb



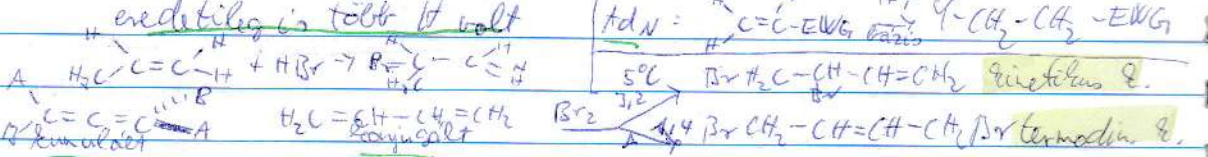
- rezonáns rdsz = hatáskeresztmetszeli-el lehetséges rdsz
- H képlet megfelelően a Lewis képletének elvételével
- atommagok helyzeti aronosa
- rezonanciában "aktív" atomok aronosa állnak
- h. sz. el aronosa a pozitívabb  $\delta^-$ -de száma
- a tényleges mol-a E-ján kisebb, mint a hatáskeresztmetszeli-el
- az egyes h. sz. el rezonancia módoiban járulnak hozzá a valós rdsz-hez
- a több köv. kötéssel bent: az erősebbek stabilabbak
- töltés szeparálódás csökkenti a stabilitást
- a h. sz. el közt az a stabilabb, amelyben a  $\ominus$  közt a nagyobb EN-jú atom viseli
- a természetből lágyabban eltérő kötésesség/ hossz instabil

Alkin (olefin): C<sub>n</sub>H<sub>2n-2</sub>

TI kötés  $\approx 60$  kcal/mol



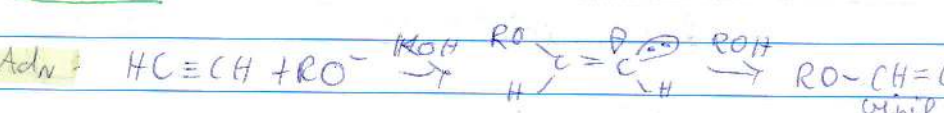
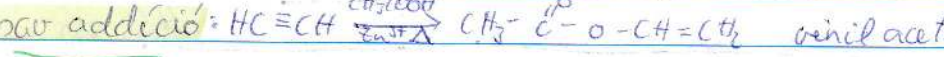
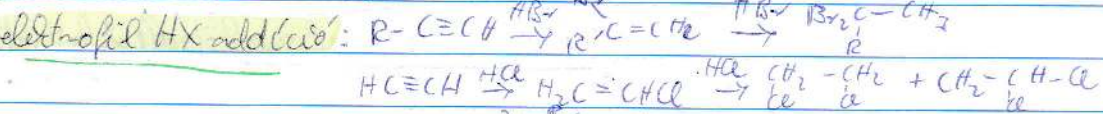
Markovnikov sz: aszimmetrikus olefinel HX addíciója során a H arra a C-re lép, amelyen eredetileg is több H volt



diolfinel:



alkin (acetilén): C<sub>n</sub>H<sub>2n-2</sub>

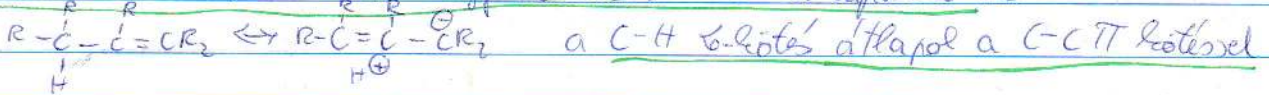




③ Konjugáció, aromás-antiaromás vegyületek: szerkezeti feltételük és konvenciók (nmr, típusfontos reakciók, stb), Alap szabály- és heteronómás vegyületek (szubsztitúció)

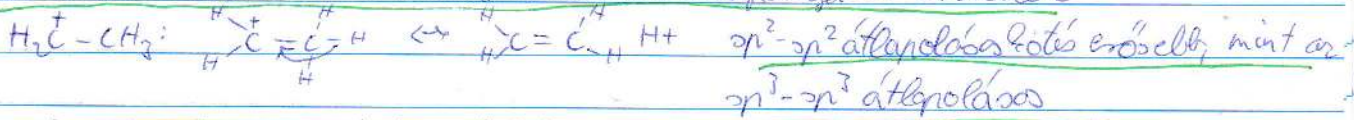
- Konjugáció:  $\sigma$ -konjugáció (lípens)

legalább 1 H-t tartalmazó C egy tiltetlen rdsz-hoz kapcsolódik



ha egy lánc / gyűrűs molekulában  $\pi$  kötés kötés  $\rightarrow$  konjugált kötés

a  $\pi$  kötés alkotó e<sup>-</sup>-re főbbentrumú molekulapályára kerülnek



- aromás rdsz kialakulásának feltétele:

• folyamatosan konjugált gyűrűs rdsz ( $p_z$  atompályás)

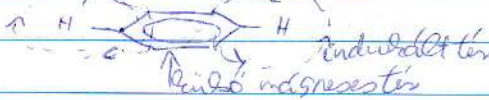
•  $4n+2e^-$  részvétel a delokalizációban (Hückel-szabály)

• a gyűrűs rdsz-t alkotó atomok (közel) koplánáris legyenek

• aromaticitás: az e<sup>-</sup> kördíram stabilizálja a rdsz-t

paramágneses gyűrűáram: a külső H atomok kémiai eltolódása magasabb

benzol:  a  $\pi e^-$  szett egyenletesen oszlik el



\* HMR:  $\delta_{\text{aromás H}} \sim 7-8 \text{ ppm}$   
 $\delta_{\text{defines H}} \sim 5-6 \text{ ppm}$

- antiaromás rdsz kialakulásának feltétele:

• folyamatosan konjugált gyűrűs rdsz



•  $4n e^-$  részvétel a delokalizációban

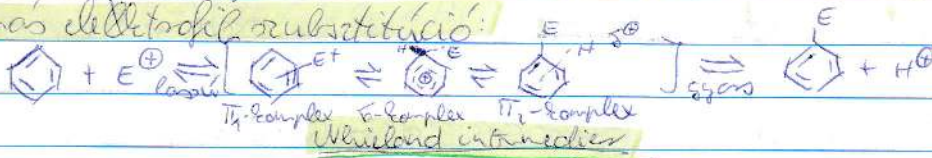
• koplánáris atomok



• antiaromaticitás: az e<sup>-</sup> kördíram destabilizálja a rdsz-t

diamágneses gyűrűáram: a külső H atomok kémiai eltolódása alacsonyabb

- Aromás elektrofil szubsztitúció:



- Átmeneti szabályok: SET<sub>N</sub> reakcióban (monoszubsztitált benzolszármazék)

•  $\sigma$  olyan kötés, ami az intermediést stabilizálja: az ar átmeneti áll-ot stabilizálja gyorsítja a reakciót

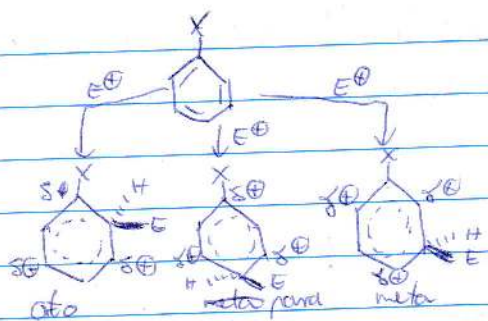
• a szubsztituens elektronos tul-a és híriége hat az átmeneti áll-ra  
 hipotézis

• a stabilabb Wheland intermediés képződik ahol a  $\oplus$  töltés jobban delokalizálódik



a) ha X e<sup>-</sup> húzó (-O<sup>-</sup>, -NR<sub>2</sub>, -NH<sub>2</sub>, -OH, OR, -R, -F, -Cl)

• a hetero  $\sigma$  komplex a benzolnál kétféleképpen stabilabb  $\rightarrow$  mind 3 izomer aktiváló (gyorsabb)  
• orto, para irányítás

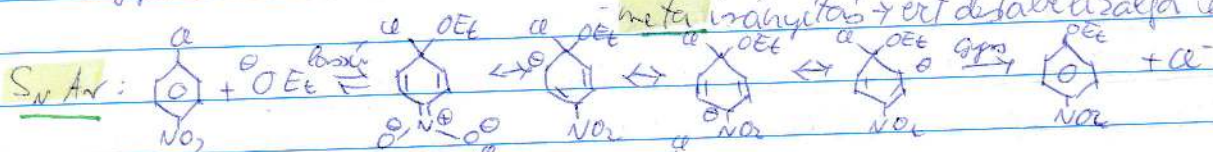


a gyűrűn  $\oplus$  töltés!

b) ha X e<sup>-</sup> szelő (-NO<sub>2</sub>, -CN, -CHO, -COR, -COOH)

• mind 3-at destabilizálja  
• deaktiváló (lassabb)

• meta irányítás  $\rightarrow$  ezt destabilizálja legkevésbé

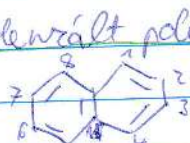


Wheland intermediár

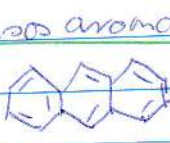


Meisenheimer intermediár

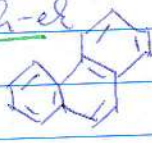
- Kondenzált policiklusos aromás szh-ek



nafthalin



antracén



fenantren

- Monociklusos aromás szh-ek:



piridin



pirázol



pirimidin



piról



furán



tiofen



imidazol

$\pi$  e<sup>-</sup> húzó

addícióra hajlamos

$\pi$  e<sup>-</sup> szelő



oxidiazol



pirazol

- NMR: elektromágneses sugárzás + atommagok kölcsönhatása

-a



④ Szerves vegyületek aciditása, bázicitása, sav- és bázis-erőssége és kapcsolata

- aciditás-bázicitás: termodinamikai sajátosság

a) Bronsted-Lowry elmélet:

• sav =  $p^+$  donor

• bázis =  $p^+$  akceptor



sav<sub>1</sub>    bázis<sub>2</sub>    bázis<sub>1</sub>    sav<sub>2</sub> → a HA konjugált bázisa

• A-H kötés könnyen hasad

• A B-~~re~~ nem kötő (vagy π) e-párral rendelkezővel

• erősséget a vízben oldhatóan névt  $K_a$ ,  $K_b$  disszociációs áll. (vagy  $pK = -\lg K$ ) (vagy  $pK_b$ )

• a víz sav is és bázis is lehet:  $HA + H_2O \rightleftharpoons A^- + H_3O^+$

$$K_a = \frac{[H_3O^+][A^-]}{[HA]}$$

$$K_b = \frac{[OH^-][BH^+]}{[B]}$$

• a víz koncentrációja állandó

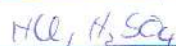
•  $K_a \cdot K_b = [H_3O^+][OH^-] = 10^{-14} \Rightarrow pK_a = 14 - pK_b$  (erős sav gyenge bázis, gyenge sav erős bázis)

↑ konjugált sav    ↑ bázis

• gyenge sav:  $K_b \ll 1 \Rightarrow K_a \ll [H_3O^+] \Rightarrow pK_a \gg -1,75$



• erős sav:  $K_b \gg 1 \Rightarrow pK_a \ll -1,75$

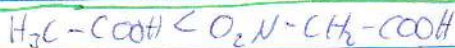


- A kémiai szerkezet befolyásolja az aciditást

a szerkezetváltás is



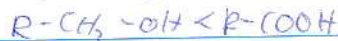
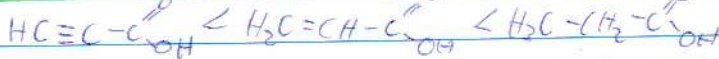
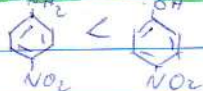
- I. effektusos substitúens növeli az aciditást:



• konjugált bázis  $\ominus$  töltését delokalizálja → az aniont stabilizálja

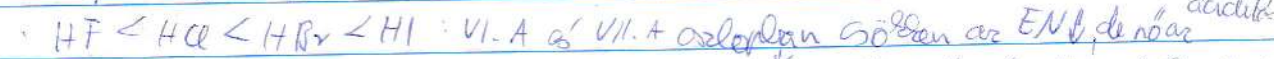
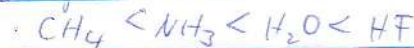
• savból elősegíti a  $p^+$  leválást

- M. effektusú substitúens növeli az aciditást →  $\ominus$  töltés diszpergálása révén



• karbonsavak >> alkoholok, mert a karboxilát aniont delokalizáció stabilizálja

• halból jobbra nő az E.N. → a H vegyület aciditása is nő



hiszen kisebb a töltés-sűrűség, F erősebben köti a  $p^+$ -t

• intramolekuláris H kötés stabilizálja a karboxilát csoportot

→ nő az aciditás



b) Lewis elmélet:

• bázis = e-pár donor (reaktív e-párja van)

• nem kötő / π e-párossal rendelkező molekula

• sav = e-pár akceptor (Lewis bázissal reagálni képesek) - AlCl3, BF3, ZnCl2, H+

• sav erőssége recessus- (bázis)-függő

• elektrofilok





- Oláh György → szerves savak: Lewis savak klenőzített protonokkal (HF, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>...) még az alkanókat is protonálja

- gyengébb savak: R-H (alkánok) (CH<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>-H ⇌ CH<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub><sup>-</sup> + H<sup>+</sup> pKa ~50

- az oldószer hatása:

gáz fázisban: csak a szerkezet függvénye, bázicitás: <sup>aminok</sup> NH<sub>3</sub> < <sup>primár</sup> CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> < <sup>szekunder</sup> (H<sub>2</sub>C)NH < <sup>tercier</sup> NH(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>

víz oldatban: solvatációs kölcsönhatások is

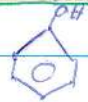
célben a H<sup>+</sup>-et szármával → NH<sub>3</sub> < <sup>aminok</sup> (H<sub>2</sub>C)N < <sup>aminok</sup> H<sub>2</sub>CNH<sub>2</sub> < <sup>aminok</sup> (H<sub>2</sub>C)<sub>2</sub>NH

alkil csoport → e<sup>-</sup> "küldő" → aciditást csökkentő

↓ - nehéíti a solvatációt

töltésdiszpergáló hatás

- fend savak az alkoholtól

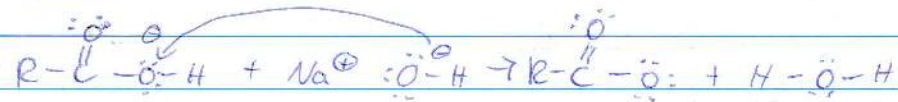


itt a <sup>-</sup> töltés tud stabilizálódni, ha leadja a H<sup>+</sup>-t (delokalizálódni)

Az A sav valyon bármivel reagál, amely bázisnak konjugált savja gyengébb az A-nál: CH<sub>3</sub>O<sup>-</sup> + N≡C-CH<sub>2</sub>-C≡N → CH<sub>3</sub>OH + N≡C-CH<sup>-</sup>-C≡N

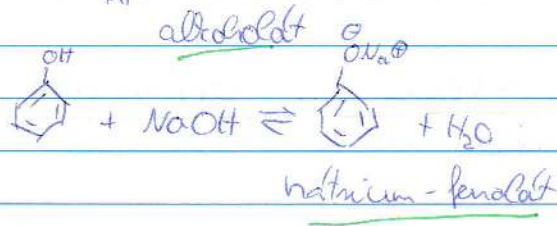
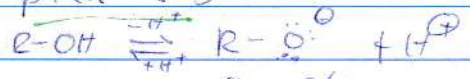
- Sav-bázis egyensúly

gyengébb sav és gyengébb bázis inányára



pKa = 3-5

pKa = 15,7



sav	pKa
R-OH	16-17
Ar-OH	8-11
HNO <sub>3</sub>	-1,6
H <sub>2</sub> O	15,7
HCl	-7
R-COOH	4-5



⑤ Kémiai reaktivitás, reakció mechanizmus, elektron (induktív, konjugatív) és rezonancia effektusok, átmeneti állapot, molekularitás, Hammond posztulátum, kinetika és termodinamikai kontroll, katalízis

- reakció mechanizmus: egy kémiai átalakulás részletes leírása, kémiai vonatkozású története
- formális e áramlást görbe nyíl jelzi
- egy lépéses / több lépéses (egy / több átmeneti áll.)  $R \rightarrow M$
- heterolitikus: a felcsúszó A-B kötés 2 kötés e-ja az egyik fragmentumra  $\rightarrow$  teljesítmény  
 ↑  
 közigazgató
- homolitikus: egyik az A-hoz, másik a B-hoz  $\rightarrow$  egyenlő fragmentumok  $\rightarrow$  közös reakció  
 ↑  
 közigazgató
- regens: amelyre reakcióban résztvevő centruma van
- substrát: amelynek C atomján a reakció végterméke

- reakciókinetika

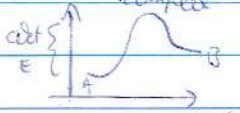
$$m_A A + m_B B \rightarrow m_C C + m_D D$$

$$v = -\frac{1}{m_A} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{m_B} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{m_C} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{m_D} \frac{d[D]}{dt}$$

↑  
 reagens all  
 ↓  
 termék rendszere  
 ↑  
 elemi lépés  
 ↓  
 elemi lépés  
 ↓  
 elemi lépés

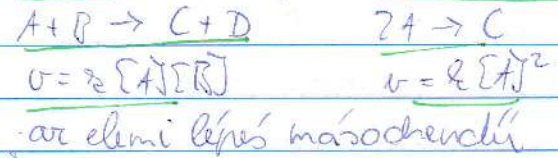
$[A]^a [B]^b$  ← elemi lépés egyenlet  
 (a+b = n reakciórend)

- uni/monomolekuláris: 1 vegyület más anyag közreműködése nélkül egy másik vegyületté alakul



- molekularitás: 1 (átmeneti komplex 1 molekulából áll)

- bimolekuláris: az átmeneti komplexben 2 molekula vesz részt (A és B, 2A)



- több lépéses:  $A \xrightarrow{k_1} B + C \quad B + D \xrightarrow{k_2} E$   
 $k_2 \gg k_1$  a leggyorsabb lépés a sebesség meghatározó

- termodinamika:  $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$  entropia változás  
 ↑  
 képződési entalpia változás  
 ↓  
 szabad entalpia változás

entropia ↑ } reakció termodinamikai feltétele  
 szabad entalpia ↓

$\Delta H < 0$ : exoterm       $\Delta G < 0$ : magától véglemegy - exergonikus  
 $\Delta H > 0$ : endoterm       $\Delta G > 0$ : endergonikus  
 $\Delta G^\circ = -RT \cdot \ln K$  → termel képződéshet kétszer, ha  $K > 1$

- kinetikai feltétel: aktiválási E csökkentése  
 - Hammond-elv: ha a reakció koordinátán 2 állapotot (pld: egy átmeneti áll és egy reakció kötés törés) egymást követi, akkor egymásba alakulásuknál azonos molekula szerkezet és megváltozásával jár együtt



5) Kémiai reaktivitás, reakció mechanizmus, elektron (induktív, mező) és rezonancia effektusok, átmeneti állapot, molekularitás, Hammond posztulátum, kinetikai és termodinamikai kontroll, katalízis

- reakció mechanizmus: egy kémiai átalakulás részletekre bontva, kémiai vonatkozású története

- formális e áramlást görbe nyíl jelöl

- egy lépéses / több lépéses (egy / több átmeneti áll)  $R \rightarrow M$

- heterolízis: a felhaszoló A-B kötés közötti e-ja az egyik fragmentumra  $\rightarrow$  <sup>(konjugált)</sup> jellemző kovalencia  
↑  
kovalencia

- homolízis: egyik az A-hoz, másik a B-hez  $\rightarrow$  gyökös fragmentumok  $\rightarrow$  <sup>(konjugált)</sup> szabadradikális reakció  
↑  
kovalencia

- reagens: amelynek reakcióban résztvevő centruma nem C

- substrát: amelynek C atomján a reakció végrehajtódik

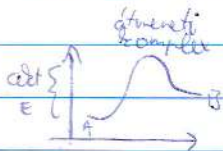
- reakciókinetika



$$v = -\frac{1}{m_A} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{m_B} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{m_C} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{m_D} \frac{d[D]}{dt}$$

↑  
reakció sebesség  
↑  
reakció rend  
↑  
stokességi egyenlet  
(a+b=n reakció rendűség)

• uni/monomolekuláris: 1 vegyület más anyag közreműködése nélkül egy másik vegyületté alakul



• molekularitás: 1 (átmeneti komplex 1 molekulaból áll)

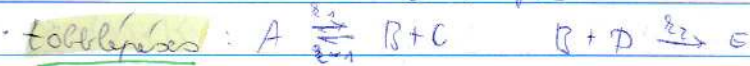
• bimolekuláris: az átmeneti komplexben 2 molekula vesz részt (A és B, 2A)



$v = k[A][B]$

$v = k[A]^2$

• az elemi lépés másodrendű



$k_2 \gg k_1$  a leggyorsabb lépés a sebesség meghatározó

- termodinamika:  $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$  entropia változás

↑  $\Delta H^\circ$ : képződési entalpia változás  
↑  $\Delta S^\circ$ : szabad entalpia változás

• entropia ↑ } reakció termodinamikai feltétele  
• szabadentalpia ↓ }

•  $\Delta H < 0$ : exoterm       $\Delta G < 0$ : magától végbemegy - exergonikus

•  $\Delta H > 0$ : endoterm       $\Delta G > 0$ : endergonikus

•  $\Delta G^\circ = -R \cdot T \cdot \ln K$   $\rightarrow$  termékek képződésének valószínűsége, ha  $K > 1$

- kinetikai feltétel: aktiválási E lecsúszása

- Hammond-elv: ha a reakció koordinátán 2 állapotot (pl.: egy átmeneti áll és egy reakció kötés törése) egymást követi, akkor egymáshoz a közelebbi van a molekula szerkezet és megváltozásával jár együtt



átmeneti állapot:



aktívalási E:  $E_{akt}$  = edzésadódás / lebontás energiája E

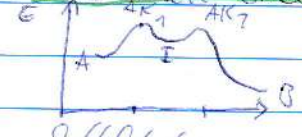
AK: aktívált komplex: a pot E\_max -hoz tartozó sz. (valós)

reakció koordináta (0-1)

reagábi és rotációs E-ja van

egylépes reakció: katalízissal 2 lépésből is végezhető

TS: átmeneti állapot: az AK mozgámentes Emin-jában megfelelő  $\delta$  értékű sz. 2AE és 2 AK



1 intermediér: köztes termék

minél kisebb a pot E-je, annál nagyobb a kinetikai stabilitás

Arrhenius:  $k = A \cdot e^{-\frac{E_{pot}}{RT}}$   
max. eü. hótó

Egység:  $k = \frac{RT}{N \cdot h} \cdot e^{-\frac{\Delta G}{RT}}$  ← aktívalási szabad entalpia  
Rande áll

Hammond elv: átmeneti áll. hasonlít az intermedie-re

ami az I-t stabilizálja, az a TS-t is stabilizálja

Termodinamizai és kinetizai kontroll:

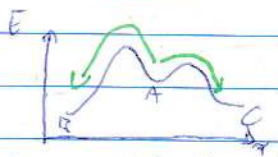
egy molekulából → többféle termék (A → B és C is)

termodinamizai kontroll (stabilabb B és a):

horizontális reakcióidő, magas hő → leggyorsabb az E-sát, függetlenül a stabilabb sz.

kinetizai kontroll (C és a):

régebbi reakcióidő, alacsony hő → nagyobb U-val reprodukció (B és a)



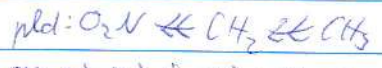
sterikus reaktivitás

elektromos effektus: a szubsztituumok polariz. jellege (a szubsztituumok elektronos effektusa miatt)

a) induktív eff: egy szubsztituum helyére polarizáció (σ szubsztitum), additív  
(A) szubsztitum → H<sub>2</sub>C → CH<sub>2</sub> → C ← I eff EN: Cl = 1,5 AEN → dipól

b) téreff: a térf. hat. következik az induktív effektusból

a molekula geometriájától függ



H-hoz kapcsolódó (-): NR<sub>2</sub> > NO<sub>2</sub> > SO<sub>2</sub>R > CN > COOH > F > Cl > Br > I > OR > OH > R

e-kiadó (+): O<sup>-</sup> > COO<sup>-</sup> > CR<sub>2</sub> > CHR<sub>2</sub> > CH<sub>2</sub>R > CH<sub>3</sub>

c) mesomer effektus: e-párt viselő heteroatomot tartalmazó sz. közvetlenül vagy egy tétlen szubsztitum → az e-eloszlást befolyásolja

+M: π e-robot sűrűsítést növeli (-O<sup>-</sup>, OH, OR, NH<sub>2</sub>, SH, F, Cl, Br, I)

-M: π e-robot sűrűsítést csökkenti (COR, CNL, NO<sub>2</sub>, COOH, COOR, NR<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, NR<sub>2</sub>)

sterikus effektus:

gátolás: ha a reagens a reakcióhelyet reakciócentrumhoz hozzáférést tiltó szubsztitumok sz. gátolja

gyorsítás: az e-reakcióidő gyorsabb, amelynek tétlen szubsztitumok sz. gátolja

katalízis:

- a katalízis reakció sebességét növeli és olyan vegyületet alkot, ami hatékonyabban reagál a tétlen reakciópartnerrel → csökkenti a ΔE → nő a sebesség
- a katalízis során kémiai közb. az átmeneti formában is jelen



① Kovalens kötés létesülése, Nucleofilitás - elektrofilitás, Radikálcsoport, Nem-kovalens, kötés típusai, számítógépes kémiai alapismertetek

- emlékező - ionos: ionegyenleget stabilizál (nagy  $\Delta EN \rightarrow e^-$  átmenet)
  - kovalens: a szomszédos atomok EN-ja nagy és a  $\Delta EN$  kicsi  $\rightarrow e^-$  megosztás
  - a kötésben résztvevő atomok EN (és vonzó erőssége) határozza meg, h melyik oldalon
  - lokalizált: a kötő  $e^-$ -ek csak 2 atomhoz rendelhetők / delokalizált:  $> 2$

- Lewis elmélet: dublett ( $s^2$ ), értékt ( $s^2 p^6$ ) - szabály (1.2. sor)
 

	<u>kötésmend</u>
$:\ddot{Br} \cdot + \cdot \ddot{Br}:$ $\rightarrow$ $:\ddot{Br} : \ddot{Br}:$ $\in$ 6 máságyas $e^-$ pár	1
$4 H \cdot + 2 \cdot \ddot{C} \cdot \rightarrow H : \overset{H}{\underset{H}{\text{C}}} : : \overset{H}{\underset{H}{\text{C}}} : H$	2
$2 H \cdot + 2 \cdot \ddot{C} \cdot \rightarrow H : C \equiv C : H$	3

- $e^-$  hiányos:  $BF_3$   $:\ddot{F} \cdot + \cdot \ddot{B} \rightarrow \begin{matrix} :\ddot{F} : \\ | \\ :\ddot{B} : \\ | \\ :\ddot{F} : \end{matrix}$ 
  - $e^-$  pár donálásra képes molekulával datív kötés (pim. töltés db)
  - aronos atomokból felépülő homonullelésis molekulák tisztán kovalens kötés / kovalens kötés
  - heteronullelésis molekulák kötés polaris kötés ( $\overset{\delta+}{H} - \overset{\delta-}{F} \equiv \overset{+}{H} - \overset{-}{F}$ )
  - nagy  $\Delta EN$  esetén tisztán ionos kötés:

$e^-$  affinitás (EA):  $1 e^-$  felvitelével képződő anion elektronikus felrakóduló E aronud nagy, ahol  $e^-$  felvitelével konvergencia konfiguráció (F)

ionizációs potenciál (IP):  $1 e^-$  leadással képződő kation elektronikus felrakóduló E

- kötés polaritását a töltésszétválasztással ( $\delta$ ) jellemezhetjük  $\leftarrow \Delta EN$ -al arányos
- dipólismomentum ( $\mu$ ): a  $\ominus$  töltés súlypontja felel meg a dipólus
- dipólus polaris kötéssel és a polaritásvektorok egymással szembe fordítottak  $\leftarrow \overset{+}{C} - \overset{-}{Cl}$
- apolaris: aronos atomokból / polaris vektorok kiolt/ell egymást ( $CH_4, CCl_4$ )
- 1 molekulában több Lewis képlet lehet  $\rightarrow$  rezonancia elmélet

- Kovalens kötés kvantummechanikai elmélete

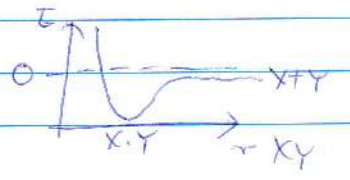
- Schrodinger-egyenlet:  $e^-$  mozgását leíró differenciálegyenlet (de csak  $1 e^-$ -osa oldható meg)
  - megoldásai: hullám  $\psi$ -ek - az  $e^-$  előfordulási visz - t adja
  - ahol előjelét vált:  $\psi = 0$  = csomópont
  - $AO$ : ahol az  $e^-$  90% -os eséllyel van

- $e^-$  konfiguráció: pályák + betöltöttség
  - az alacsonyabb E-jű pályák töltődnek be először
  - 1 pályán max 2 (ellentétes spinű)  $e^-$  - Pauli-elv
  - aronos E-jű pályák betöltése először potáltlan  $e^-$ -szed - elv relatív

több  $e^-$ -os molekulákba közelítő módszer: molekulapályák elmélet  
VR módszer

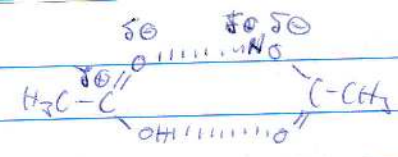
- Kötési E: 160 - 500  $kJ/mol$ 
  - homolitikus hasadáshoz szükséges E (száraz homolitikus diszociációs energiája)
  - minél rövidebb a kötés, annál erősebb  $\rightarrow$  erősebb radikál
  - $\sigma$  erősebb, mint a  $\pi$

- Intramolekuláris kölcsönhatások:
  - KE: max 40  $kJ/mol$





- H-kötés: ha a H E.N. atomhoz kötődik  $\rightarrow$  H-kidál
- H-donor és H-acceptor tul-ú atom között
- DNS, fehérjék szerkezete



- dipól-dipól kölcsönhatás
- 4-8 kJ/mol, poláris mol.:-ál egyenlőtlenség miatt permanens dipólusoként lehet megemlíteni

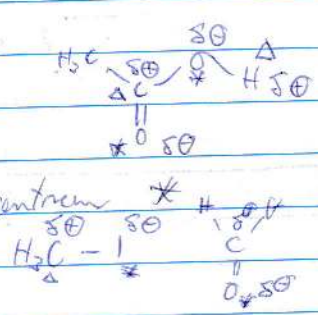
- van der Waals kölcsönhatás
- $\pi$ -elektronrendszerrel átmenetileg dipólusok  $\rightarrow$  szomszédosan is dipólusok general
- töltéshelyek között stabilizálják
- pld: membrán foszfolipidjeinek szelvényét összetartja

- Sémítógépes kémiai alapismeretek:

- SMILES: kétféleképpen a molekulát ASCII-karakterekkel történő kódolására
- InChI (nemzetközi kémiai azonosító) kétféleképpen a molekulát ASCII-val
- InChI Key: 25 karakteres digitális kód
- Chem Sketch: szerkezet alapján SMILES és InChI megadása
- Marvin Sketch: szerkezet alapján IUPAC név
- adatbázisok:
  - SCINA: Sellenyi Tudományok Nemzeti Központja
  - EPO: European Patent Office
  - Chemical Abstracts: Sci Finder kereső motor
  - Reaxys: reakció szerkezetek
  - EISZ: Elektronikus Információ szolgáltatás
  - Pubmed, Pubchem
  - Uniprot, POB kérés

- Wittkopff - Elektrophil reagensek

- nukleofil:  $e^-$  gazdag (anionok), a  $\ominus$  töltésű atom a nukleofil centrum
- + megkönnyíti  $e^-$  páros kötés képzését
- $OH^-, Br^-, H_2O, NH_3$
- elektrophil:  $e^-$  hiányos (kationok), a  $\oplus$  töltésű atom az elektrophil centrum
- $H^+, NO_2^+, AlCl_3$

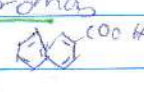



- reakció típusok

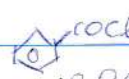

- szubsztitúció:  $A-B + C \rightarrow A-C + B$
- addíció:  $A + B - C \rightarrow A-B-C$
- elimináció:  $A-B-C \rightarrow A + B-C$
- izomerizáció:  $A-B-C \rightarrow A-C-B$
- egy/féleképpes
- mono/bimolekuláris
- (exoterm/endoterm?)



① Karbonsavak és Karbonsav származékok Acilozási reakciói (biokémiai szemp.)

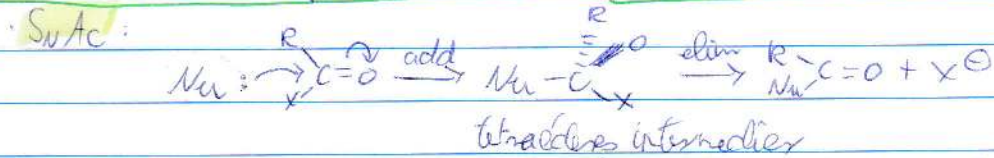
- Karbonsav: karboxil csoportot tartalmazó vegyület  $R-C(=O)OH$
- Karbonsav származékok: ha az OH-t egy heteroatomra cseréljük
- Karbonsavak:
  - karboxil csoportok száma/helyzete szerint: mono/di karbonsav ( $(CH_2)_n(COOH)_1$  /  $(COOH)_2$ )
  - karboxil csoport kapcsolódó CH csoport szerint: telített / telítetlen / aromás  
 $H_2C-CH_2-COOH$      $H_2C=CH-COOH$       $COOH$
  - telített monokarbonsavak: magas f.p. (H-édes)
    - $HCOOH$ : hangyasav     $CH_3(CH_2)_{14}COOH$ : palmitinsav
    - $CH_3COOH$ : ecetsav     $CH_3(CH_2)_{16}COOH$ : stearinsav
  - telített dikarbonsavak:  $HOOC-COOH$ : oxálsav  
 (o.p. párosnál noszható)  $HOOC-CH_2-COOH$ : malonsav  
 $HOOC-CH_2-CH_2-COOH$ : sztentán-dioxsav  adipinsav
  - telítetlen:  $(CH_3-(CH_2)_7-CH=CH-(CH_2)_7-COOH$ : olejzsav

- származékok:

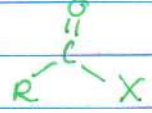
- ester:  $R-C(=O)-OR'$  acil-észter  benzoeszter legalkalmasabb f.p.
- acetil:  $CH_3-C(=O)-OCH_3$  acetilacetát alkalmasabb f.p.
- amidok:  $R-C(=O)-NH-R'$ 
  - 1. rendű  $R-C(=O)-NH_2$  hexámsavamid
  - 2. rendű  $R-C(=O)-NH-R'$  megalsabb f.p. pKa > savak
  - 3. rendű  $R-C(=O)-N(R')_2$  alkalis  $<< NH_3$
- nitril:  $R-C \equiv N$ :  $CH_3-(CH_2)_4-C \equiv N$  hexámnitril  ciklohexán-karbonitril magas f.p.

- aciditás:

- ásványi savak >> karbonsavak >> alkoholok
- Reaktivitás nukleofillal szemben: acilozási reakció



- acilozás: egy savas mol. H atomját acilcsoporthal helyettesítjük ( $R-C(=O)$ )



- acilozás:  $H-Z \rightarrow R-C(=O)-Z$
- acilcsoporthal helyettesítés típusok: karbonsav származékok
- ketén > szulfonid > szavanhidrid > észter (> nitril / amid / sav)
- $H_2C=O \rightarrow H_2C-C(=O)-Cl$      $H_3C-C(=O)-O$      $H_3C-C(=O)-O-CH_3$
- $H_2C-OH \rightarrow H_2C-C(=O)-O-CH_3$
- $H_2C-NH_2 \rightarrow H_2C-C(=O)-NH_2$      $H_2C-C(=O)-NH-CH_3$



- A reaktivitást befolyásolja:

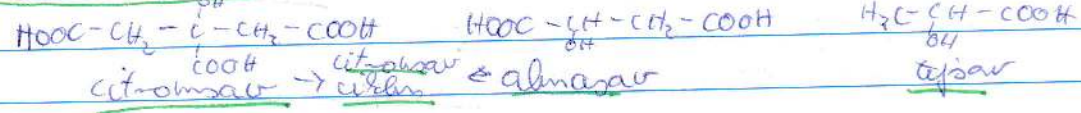
1. az X-1 effektus  $\delta^-$  minél nagyobb, annál nagyobb a karbonil C atom elektrofilitása:  $\begin{matrix} \delta^+ & \delta^- \\ \text{C}=\text{O} \\ \delta^- & \delta^+ \end{matrix}$   $\delta^-$  az aciló rész (szahalogenidek)

2. X nem köti e pánya és a C=O  $\pi$  kötés között delokalizáció  $-\text{C}=\overset{\delta^-}{\text{O}}$   
 + X effektus stabilizálja az alváll-ot  $\rightarrow$  csökkenti a reaktivitást (savak, észterek, amidok)

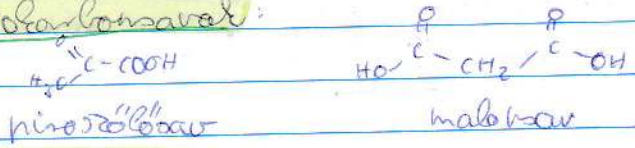
- Helyettesített karbonsavak

halogénált savak: R-COOH (R halogént tart)  
 Br-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-COOH:  $\gamma$ -brom-propionsav

- hidroxilkarbonsavak:



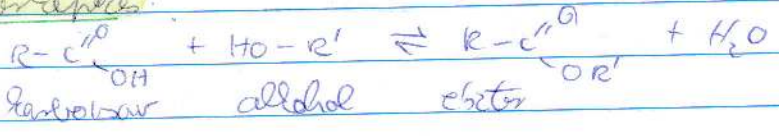
- oxokarbonsavak:



- biokémiai szerepek

a hisztidin amin oldalán aminos acil része tömöríti a kromofort, hisztidin red

- Esterképzés:



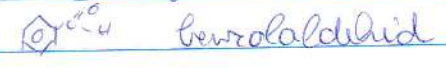
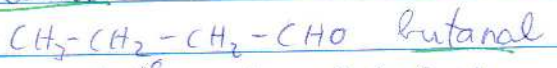


② Oxogegyűjtés. Típusok, elnevezés / reaktivitásuk - szeret (biogénai anyagok)

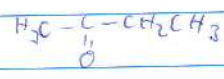
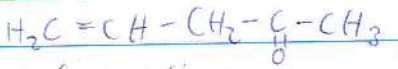
$\gamma = 0$  karboxil csoportot tartalmazó



- aldehydek:



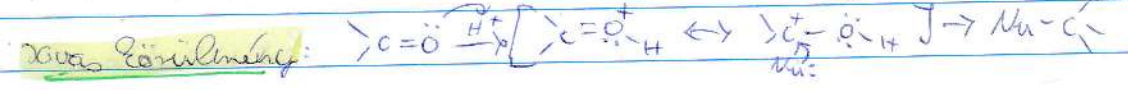
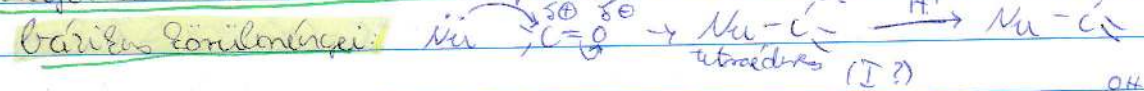
- ketonok:



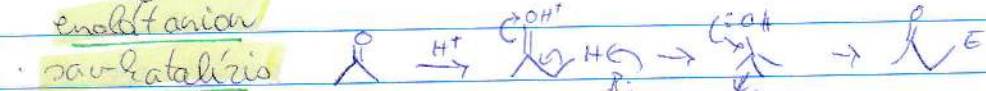
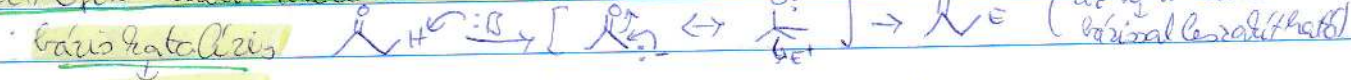
4-pentán-2-on      ciklopentanon      etil-metil keton

steroid hormonok, illátanyagok, antipszichotikumok

- nukleofil addíció a karbonil csoportra:



- Elektrofil substitúció az  $\alpha$  szénatomon:

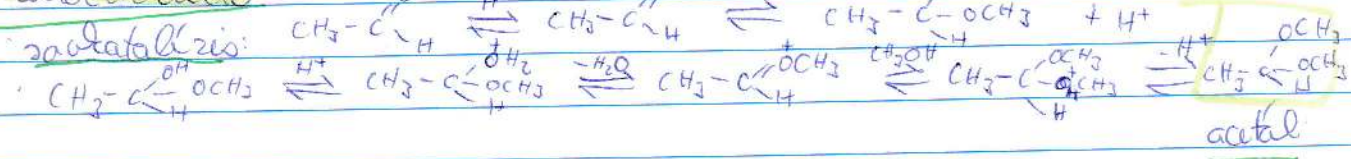


enol (aldehyd hidroxisoporttal:  $C=C-OH$ )

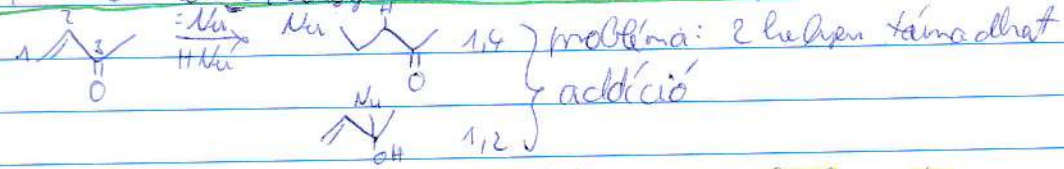
- Vízaddíció:



- Alkoholaddíció:



-  $\alpha, \beta$  tiltott oxogegyűjtés reakció nukleofilakkal:

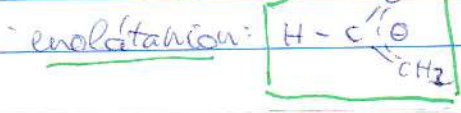
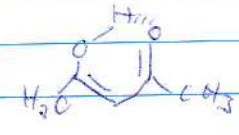
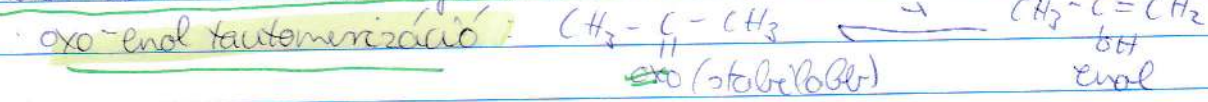


regionalitás: erős bázis nukleofil  $\rightarrow$  1,2

gyenge bázis nukleofil  $\rightarrow$  1,4



- Enolatánon keresztül lejátszódó reakciók:



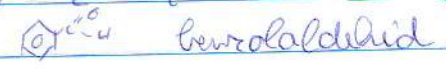
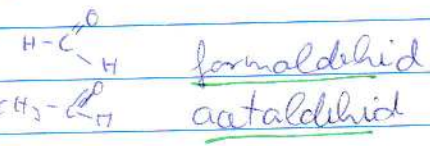
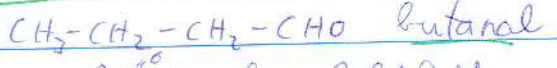


2 Oxocyclopentanon: 1. típusú, 2. típusú / aktivitásuk - szeret (biológiai anyag)

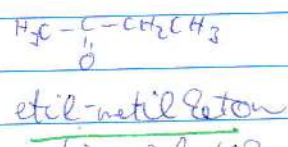
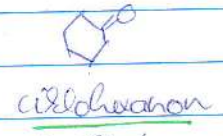
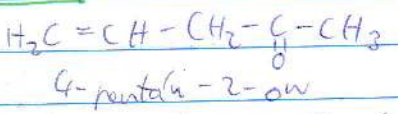
$\gamma = 0$  karboxil csoportot tartalmazó



- aldehid:

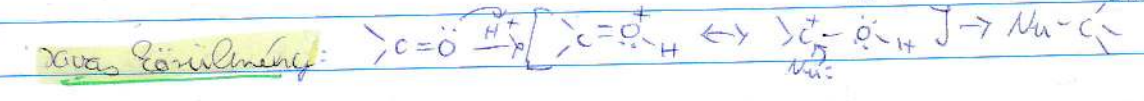
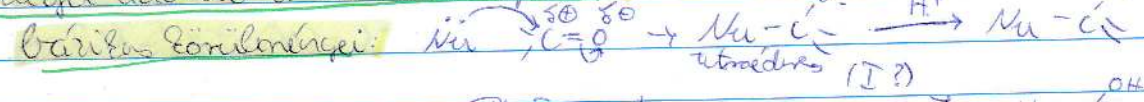


- ketonok:

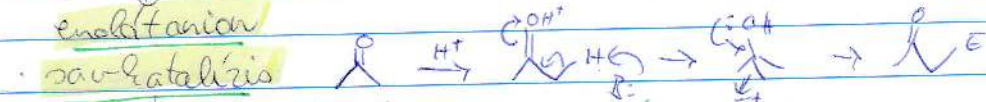


steroid hormonok, 12-es illatanyagok, antipszichotikumok

- nukleofil addíció a karbonil csoportra:

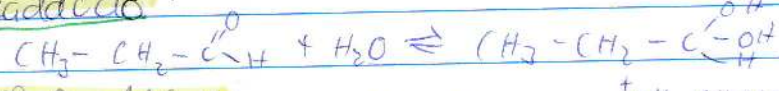


- Elektrofil substitúció az  $\alpha$  szénatomon.

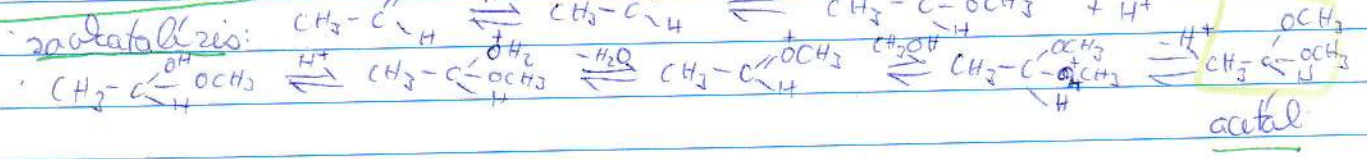


enol (aldehyd hidroxisopantál):  $C=C-OH$

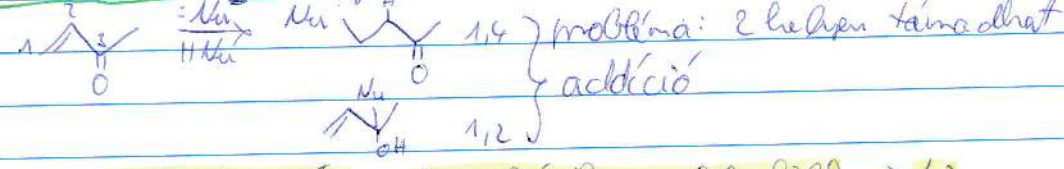
- Vízaddíció:



- Alkohol addíció:

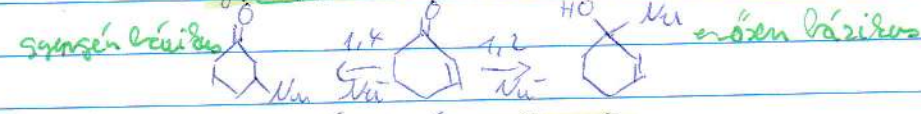


-  $\alpha, \beta$  tiltott oxocyclopentanon reakció nukleofilakkal:

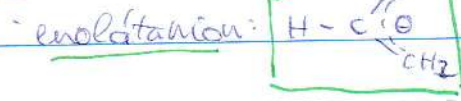
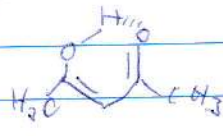
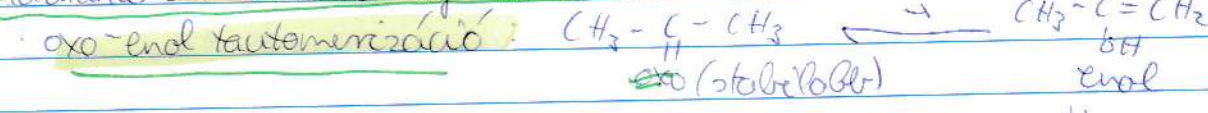


regionalitás: erősen bázikus nukleofil  $\rightarrow 1,2$

gyengén bázikus nukleofil  $\rightarrow 1,4$

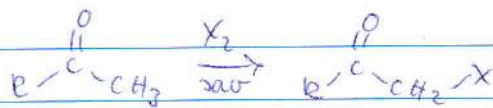


- Enolatánionon keresztül lejátszódó reakciók:

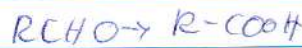
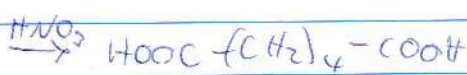




halogénezés:

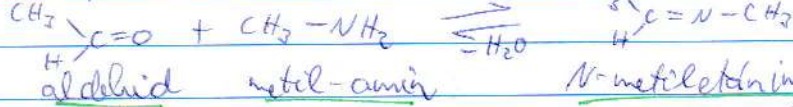


Oxidáció-redukció:



Biokémiai kapcsolatok

- reakció primer aminoszállal:  $\xrightarrow{+H^+}$



aldehid

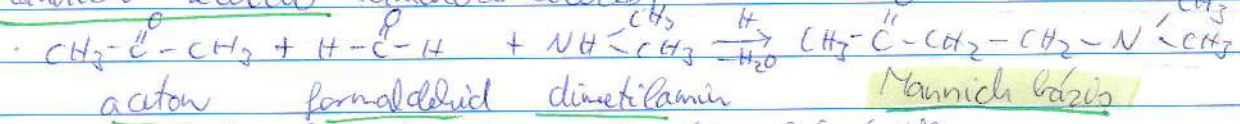
etil-amin

N-metiletilamin

~~Schiff~~ Schiff-bázis

iminez fontosak a természetes anyagok bioszintézisében, transz aminoszállalban

- Mannich-reakció (aminoalkilálás)



aceton

formaldehid

dimetilamin

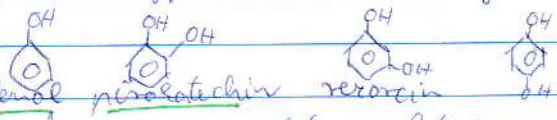
Mannich bázis

alkaloidok alapváza ilyen reakcióban képződik

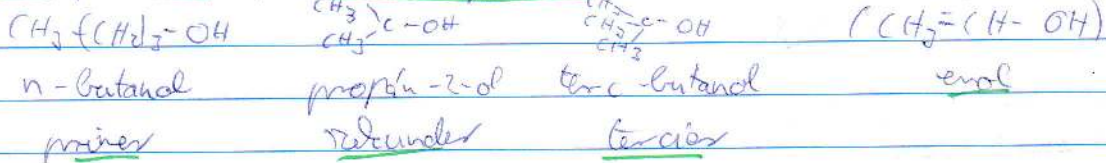
(larított H-t tartalmazó vegyületet aldehidet és aminoszt. jelenlétében Mannich bázisok alakulnak)



9) OH/NH<sub>2</sub> csoportok tartalmazó vegyületek kémiai tulajdonságai; szerkezeti reaktivitás

- alcoholok és fenolok:  fenol pirocatechin resorcin hidrokinon

alk. csoportok tása: higboxi csoportok viselő C rendszámára szerint



- savérősség

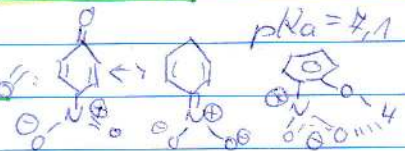
• az O-I effektusa miatt a H lovított (?) → savas jellegű

• durogyi savak > karbonsavak > szén-sav > fenolok > alcoholok

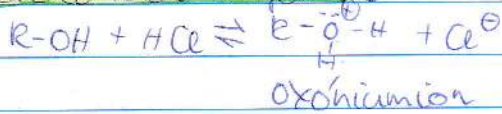
• a fenolok stabilabb az alkoxidanionnal (R-O<sup>-</sup>)



• a fenolok aciditása -M substituens hatására nő:



• az alcoholok amfotereit:



• vagy erősebben nem állítható elő alcoholat! (pKa alk. ≈ pKa alk.)



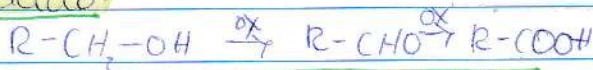
- alkilálás, éteresítés (metil, etil, ...)



Na-metilát etil-bromid etil-metil-éter

= alcoholat/phenolatianion + alkil halogenid (S<sub>N</sub>2)

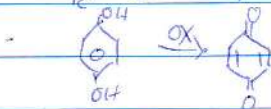
- oxidáció



primer alk.      aldehyd karbonsav

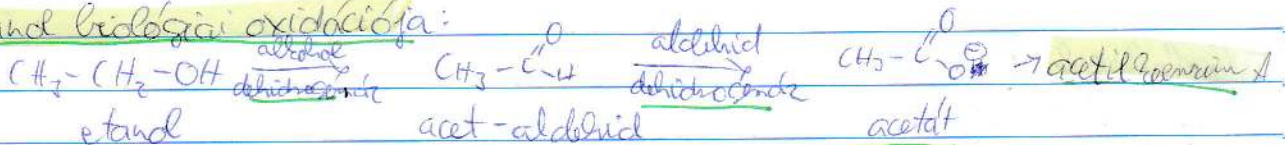


szekunder alk.      keton

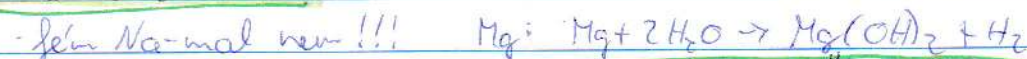


hidrokinon p-benzoquinon

• etanol biológiai oxidációja:



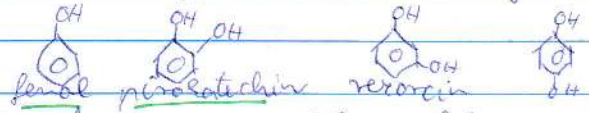
- etanol víztelenítése:



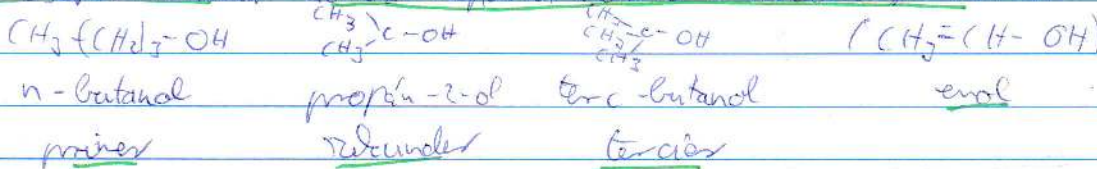
nem oldható alcoholok



9) OH/NH<sub>2</sub> csoportok tartalmazó vegyületek kémiai tulajdonságai; szervesfehérje-reaktivitás

- alkoholok és fenolok:  fenol katéchin rezorcin hidrokinon

alk. csoportok típusa: highoxi csoportok vezérelt C rendszere szerint

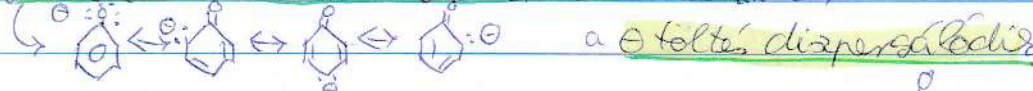


- savasság

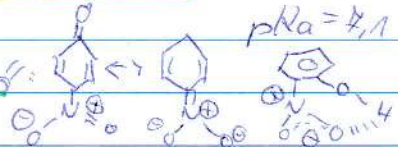
• ar O-I effektusa miatt a H konjugált (?) → savas jellegű

• csúszási savak > karbonsavak > szén-sav > fenolok > alkoholok

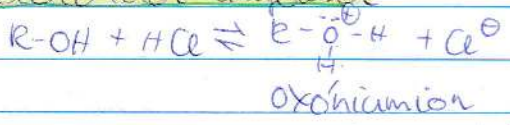
• a fenolok stabilabb az alkoxidanionnal (R-O<sup>-</sup>)



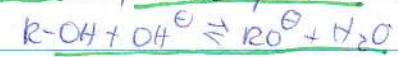
• a fenolok aciditása -H szubsztitúms hatására nő:



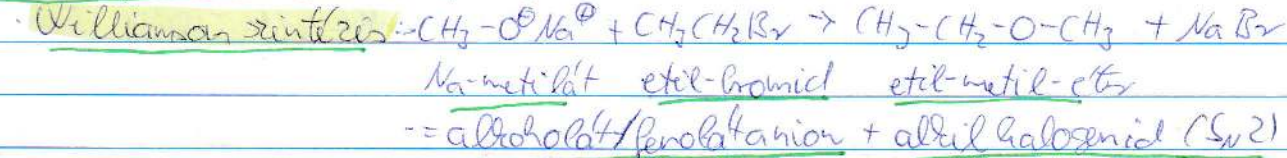
• ar alkoholok amfoterek:



• mit szélesen nem álkálható elő alkoholok! (pKa<sub>alk</sub> ≈ pKa<sub>alk</sub>)



- alkilálás, éterképzés (metil, etil, ...)



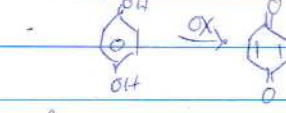
- oxidáció



primer alk. aldehid karbonsav

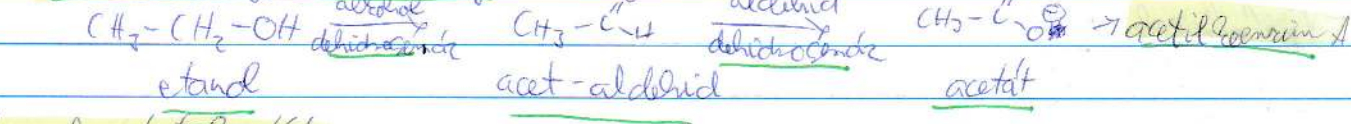


szekunder alk. keton

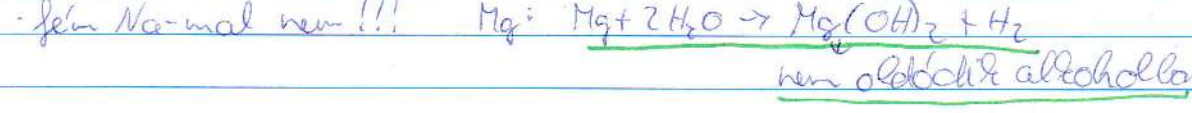


hidrokinon p-levoglucinon

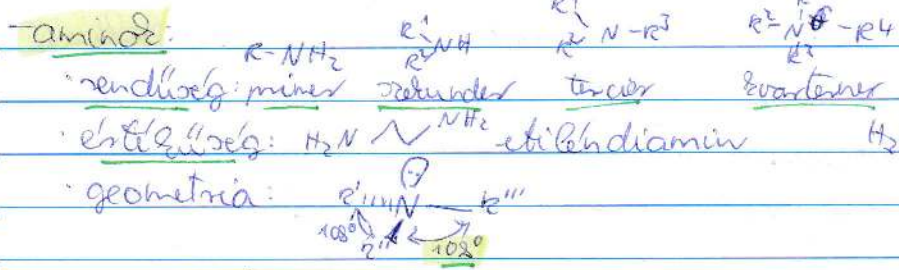
• etanol biológiai oxidációja:



- etanol vértelenítése

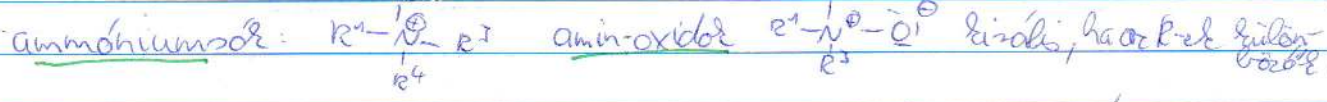
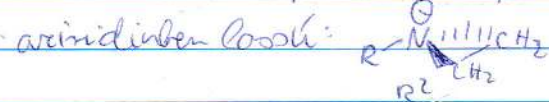
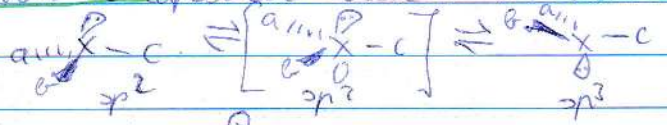






konfigurációs inverzió:

a centrális atomhoz kapcsolódó ligandumok új rendeződnek át, így a centrális atomhoz kapcsolódó kötések nem maradnak el



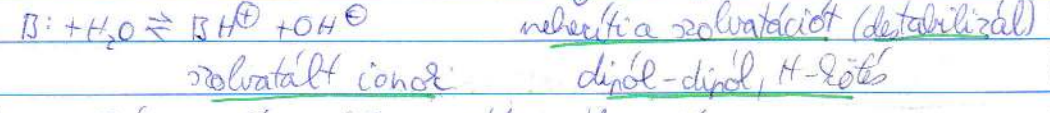
a H-kiold keményebb, mint az alkoholban:  $>N-H$     "N"

bázicitás:

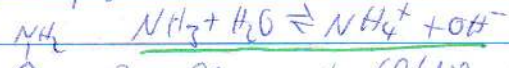
U olyan hatás, ami növeli a N-en az elektron sűrűséget  $\rightarrow$  növeli a bázicitást


gyárfázis:  $R_3N > R_2NH > RNH_2 > NH_3$  (a substituensoz elektronos hatása)

víz lócsig:  $R_2NH > RNH_2 > R_3N > NH_3 >> R_2NH_2$  (???) alkilcsoport  $\rightarrow$  e-kioldó (iont stabilizáló)

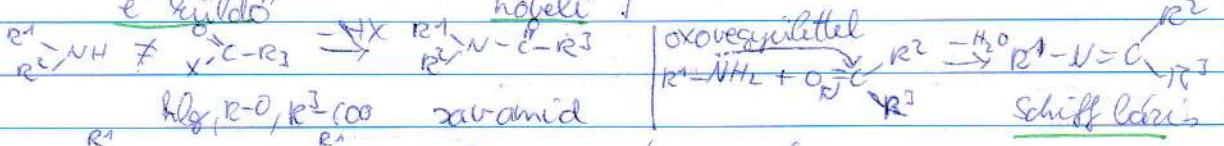


kémény konjugált sav/bázis esetén urkben:  $pK_a + pK_b = 14$

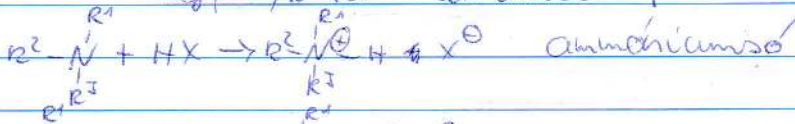


anilin:  where all other protonalódók és protonalódásakor megrúnik a delokalizáció e-kioldó substituensoz köllenti (a bázicitást e-kioldó) növeli!

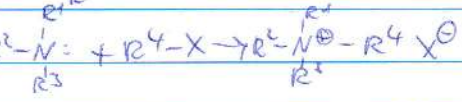
acilok:



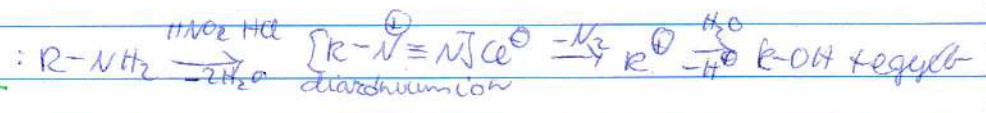
szépek:



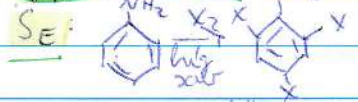
alkilok:



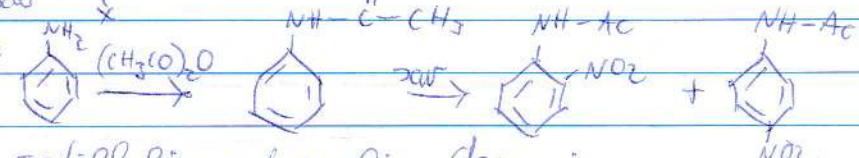
alkiltranszverzál reagál:



Gyáriszereakció:



Nitrálás:



acetilédin, adrenalin, dopamin, amfetamin



10) Halogén vegyületek, típusok és reaktivitás-sorrend

- a C-ffélg. erős polarizált:  $\overset{\ominus}{C}-\overset{\oplus}{H}lg$

polarizáltság:



- szórolódás → harmotikus hatás

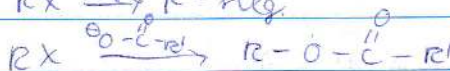
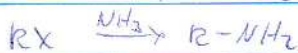
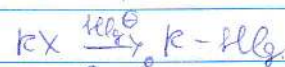
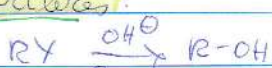
reaktivitás



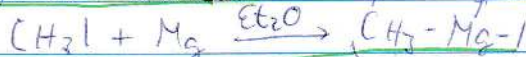
- f.p. > CH-ek

- többszörösen ~~szórolódó~~ Cl-ekkel toxikusok (CHCl<sub>3</sub>)

- alkilálás:

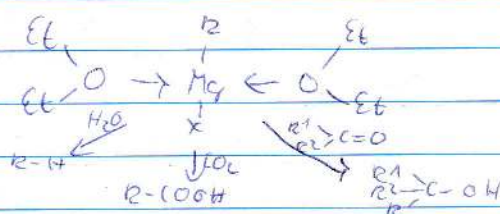


- Grignard reakció: redukáló oxidáló



Grignard vegyület

metil-Mg-jodid (fémorganikus)



- Nucleofil substituáció:



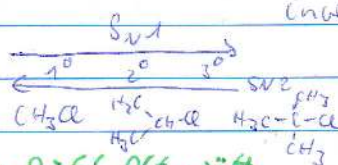
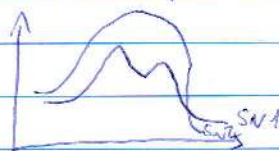
a, Br, I, O, S, N, F, Cl, Br, I, Cl, P



enantionem 1:1 arányban



invertió



2-ös kötés létrejötte

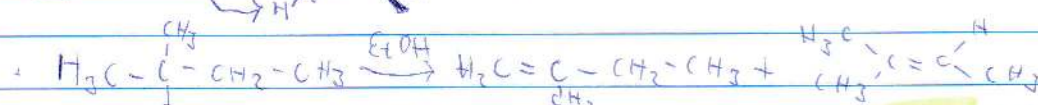
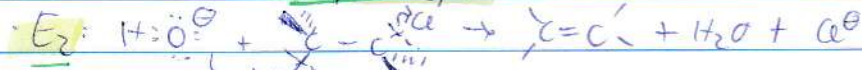
- substituáció vs. elimináció:

- bejövő csoport: substrát

oldószer

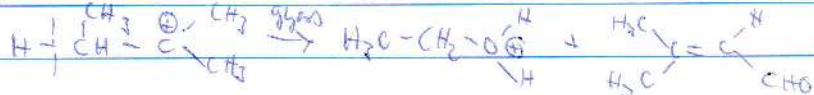
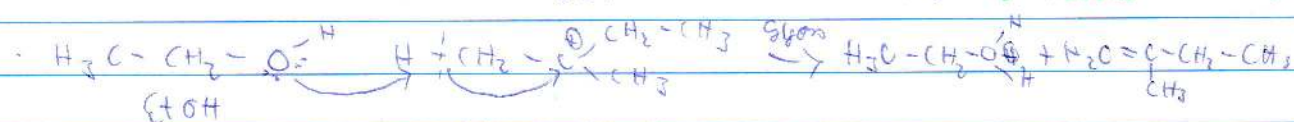
favorizáló csoport

bejövő csoport



Reaffmann 25%

Zajicev (1) atom a kevesebb 75% tantál markóli = zsebkészítő

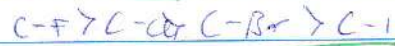




10) Halogén vegyületek, típusok és reaktivitás-sorrend

- a C-klg kötés erősen polarizált:  $\overset{\ominus}{C}-\overset{\oplus}{klg}$

polarizáltság:



- zéróelője → karbokatilikus hatás

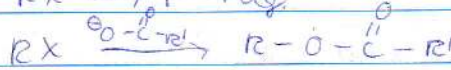
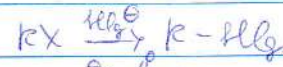
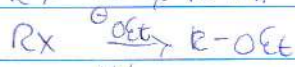
reaktivitás



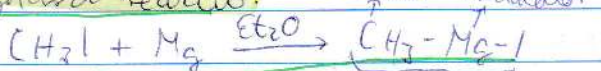
- f.p. > CH-ek

- többszörösen ~~csak~~ α-ossal fonálkötés (CHCl<sub>3</sub>)

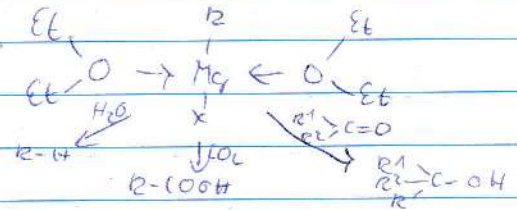
- alkilációk:



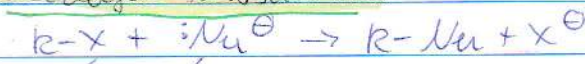
- Grignard reakció:



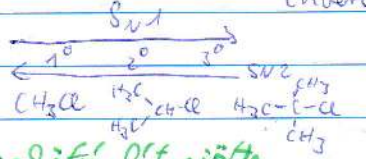
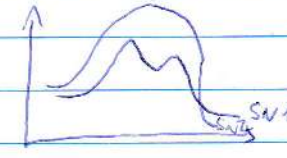
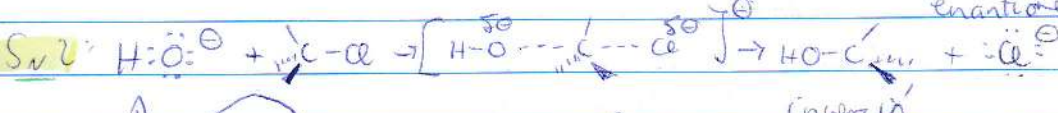
Grignard vegyület  
metil-Mg-jodid  
(fémorganikus)



- Nucleophil substitúció:



α, Br, I, O, S, N, P, Cl, Br, I, Cl, P



2-2 kötés létrejötte

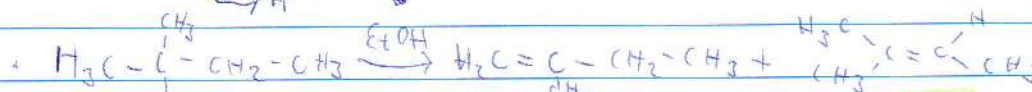
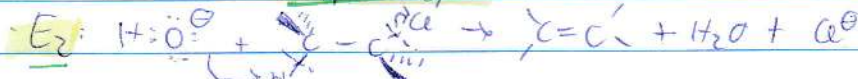
- substitúció vs. elimináció:

- befolyásolja: substrát

oldószel

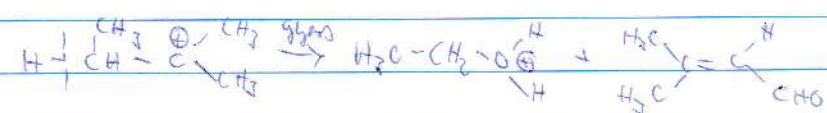
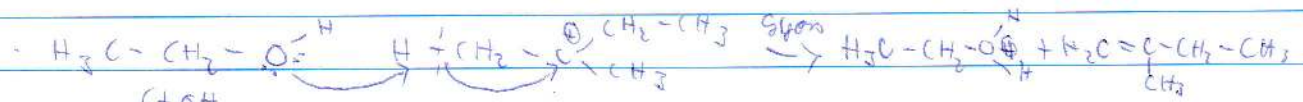
temperatúra

belejövő csoport



reaktívum 25%

2-2 kötés (H) atom a levelező csoport  
75%  
fontos markáló jelek





- reakciók:

$CH_3X$	$RCH_2X$	$\begin{matrix} R \\   \\ R-CHX \end{matrix}$	$\begin{matrix} R \\   \\ R-C-X \\   \\ R \end{matrix}$
bimolekuláris ( $S_N2$ v. $E2$ )		$S_N1/E1$ v. $E2$	
$S_N2$	főleg $S_N2$ $E2$ is lehet	gyenge lejárás ( $1^\circ, 2^\circ, CN^-$ ) $S_N2$ erős lejárás ( $3^\circ$ ) $\rightarrow E2$	$S_N2$ $S_N1/E1$ erős lejárás $E2$

- aromás halogénvegyületek:



- a) aril halogénid  $PhX$
- b) benzil halogénid  $PhCH_2X$

- reaktivitás nukleofilrel szemben: részecské reaktivitás

1. csoport: alil-halogénid, benzil-klorid
2. csoport: aril-halogénid ( $H_2C=C^+-X$ ) vinil-klorid
3. csoport: fenil (és aril)-halogénid ( $Ph-X$ ), halogén-étinid ( $H_2C=CH-X$ )

- csoportosítás:

1. halogénid száma: mono-, di-, poli-halo-, -vegyületek
2. dihalogénid: geminalis  $\begin{matrix} X & H \\ | & | \\ C \\ | & | \\ R-CH & -CH-R \\ | & | \\ X & Y \end{matrix}$   
vicinális  
diszjunkt  $XH-CH_2-(CH_2)_n-CH_2-XH$
3. aC rendszere szerint: primer  $CH_3-CH_2-X$   
szekunder  $\begin{matrix} H & H & H \\ | & | & | \\ H_2C & -CH & -CH-X \\ & | & | \\ & H & CH_3 \end{matrix}$   
tercier  $\begin{matrix} H & H & H \\ | & | & | \\ H_2C & -C & -X \\ & | & | \\ & H & CH_3 \end{matrix}$

4. CH váz szerint: alifás: telített  
- telítetlen: vinil  $H_2C=CH-X$   
alkil  $H_2C=CH-CH_2-X$

- alicyklusos
- aromás: aril  
· benzil



- reakciók:

$\text{CH}_2\text{X}$	$\text{RCH}_2\text{X}$	$\begin{matrix} \text{R} \\   \\ \text{R}-\text{CHX} \end{matrix}$	$\begin{matrix} \text{R} \\   \\ \text{R}-\text{C}-\text{X} \\   \\ \text{R} \end{matrix}$
bimolekuláris ( $\text{S}_{\text{N}}2$ v. $\text{E}2$ )		$\text{S}_{\text{N}}1/\text{E}1$ v. $\text{E}2$	
$\text{S}_{\text{N}}2$	főleg $\text{S}_{\text{N}}2$ $\text{E}2$ is lehet	gyenge leaving ( $1^\circ, \text{U}, \text{CN}^-$ ) $\text{S}_{\text{N}}2$ erős leaving ( $\text{NO}_2$ ) $\rightarrow \text{E}2$	$\text{S}_{\text{N}}2$ $\text{S}_{\text{N}}1/\text{E}1$ erős leaving $\text{E}2$

- aromás halogénezéssel:



- a) aril halogenid  $\text{PhX}$
- b) benzil halogenid  $\text{PhCH}_2\text{X}$

- reaktivitás nukleofillel szemben: szubsztitúciós reaktivitás

1. csoport: alil-halogenid, benzil-klorid
2. csoport: terc. halogenid ( $\text{H}_3\text{C}-\text{C}^+(\text{R})_2$ ) vinil-klorid
3. csoport: fenil (és aril)-halogenid ( $\text{Ph}-\text{Cl}$ ), halogén-étinid ( $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{Cl}$ )

- csoportosság:

1. halogén száma: mono-, di-, poli-halo-, -vezületek
2. dihalogén: geminalis  $\begin{matrix} \text{X} & \text{H} \\ | & | \\ \text{C} & \\ | & | \\ \text{X} & \text{H} \end{matrix}$   
vicinális  $\begin{matrix} \text{R} & \text{H} & \text{R} \\ | & | & | \\ \text{C} & - & \text{C} \\ | & & | \\ \text{X} & & \text{X} \end{matrix}$   
diszjunkt  $\text{XH}-\text{CH}_2-(\text{CH}_2)_n-\text{CH}_2-\text{XH}$

3. al. rendűsége szerint: primer  $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{X}$   
secunder  $\begin{matrix} \text{H}_3\text{C} & \text{H} & \text{H} \\ | & | & | \\ \text{C} & - & \text{C} & - & \text{X} \\ | & & | \\ \text{H}_3\text{C} & & \text{CH}_3 \end{matrix}$   
tercier  $\begin{matrix} \text{H}_3\text{C} & \text{H} & \text{H} \\ | & | & | \\ \text{C} & - & \text{C} & - & \text{X} \\ | & & | \\ \text{H}_3\text{C} & & \text{CH}_3 \end{matrix}$

4. CH vár szerint: alifás: telített  
- telítetlen: vinil  $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{X}$   
- alkil  $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{X}$

- alicyklus
- aromás: aril  
- benzil