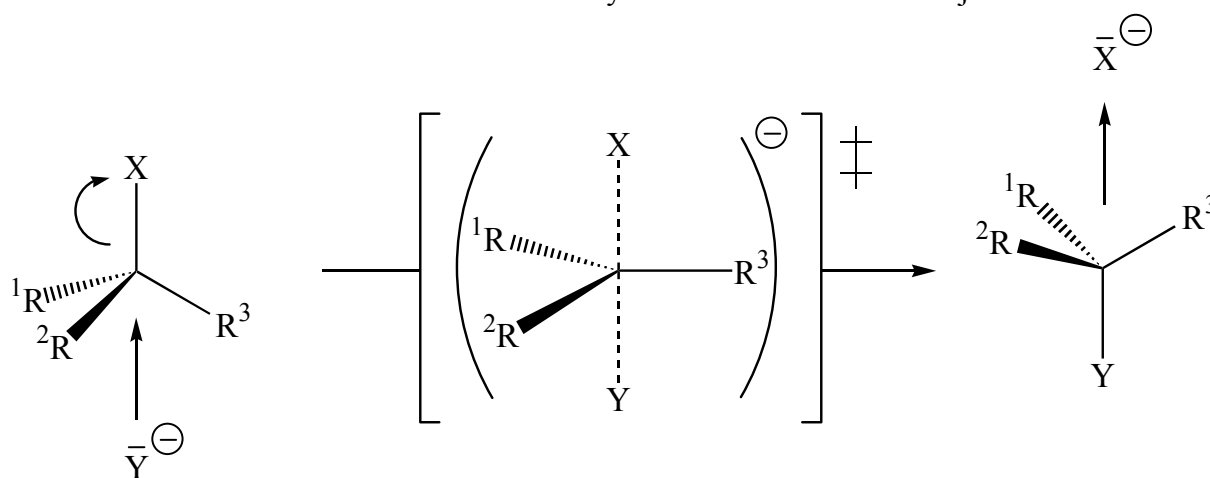


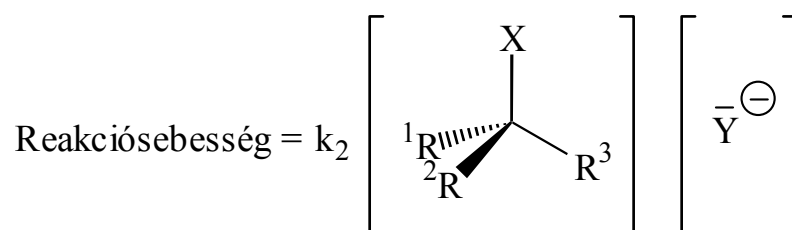
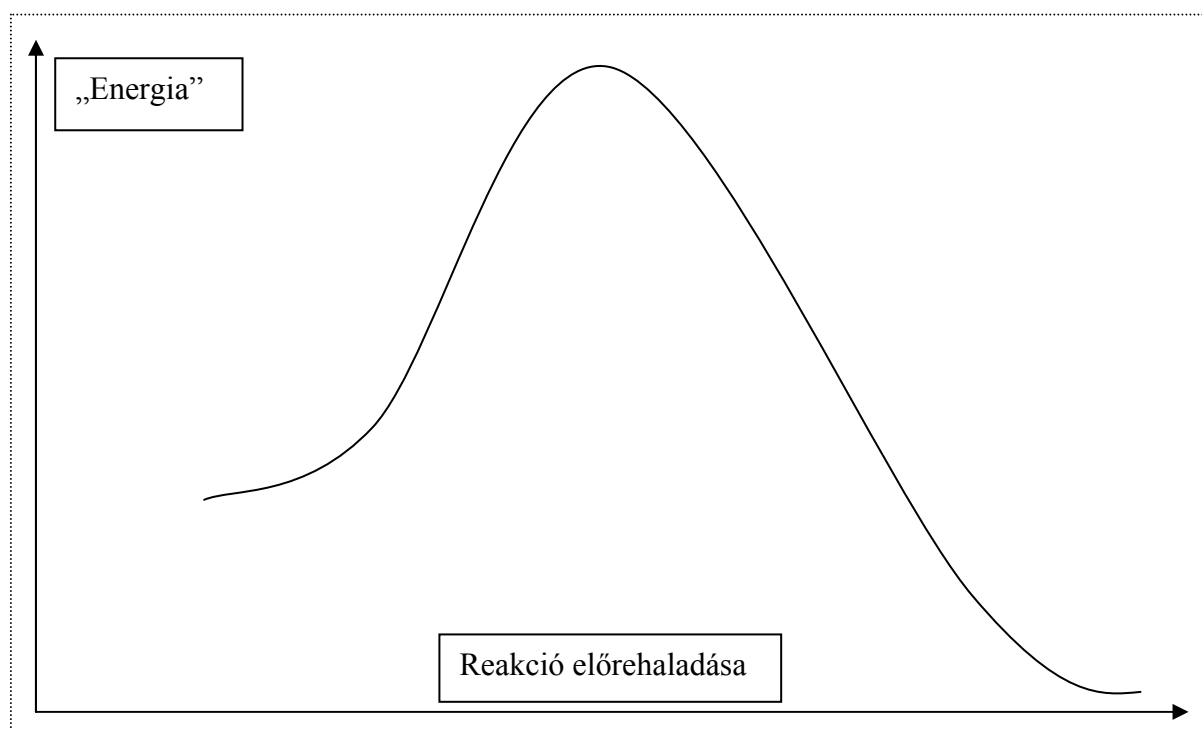
$S_N2$  szubsztitúció  
Sztereokémiai következmény: kiralitáscentrum inverziója



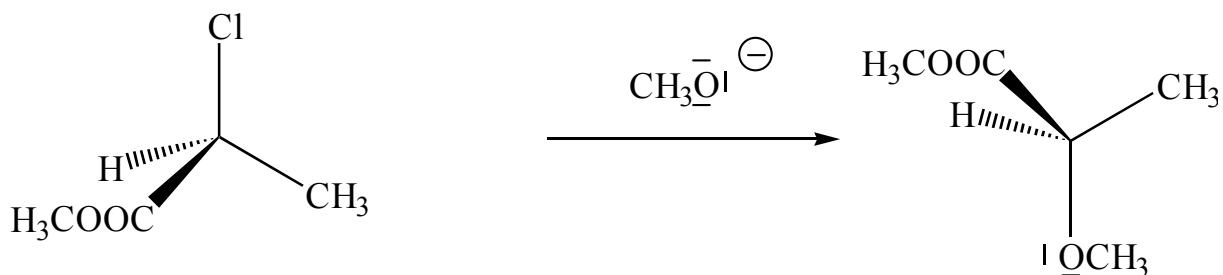
Kiindulási anyagok

Átmeneti állapot

Végtermékek

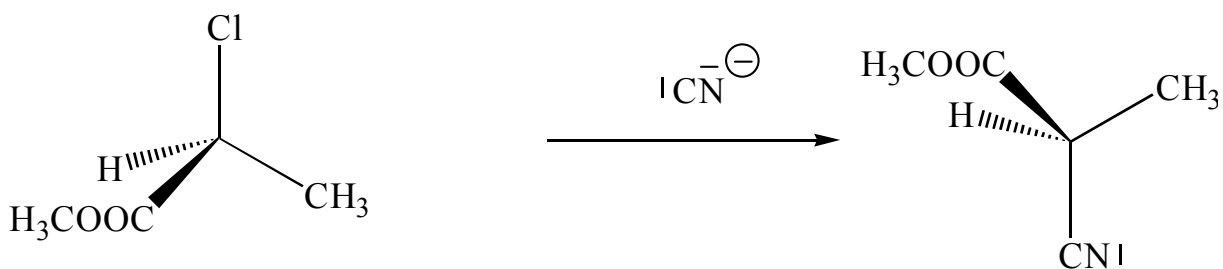


Megjegyzendő, hogy az  $S_N2$ -szubsztitúció sztereokémiai következménye mindig az érintett kiralitáscentrum inverziója, ezt azonban a C.I.P. konvenció nem mindig tudja jelezni: mindkét alábbi reakció inverzióval jár.



(*S*)-konfigurációjú kiralitáscentrum

(*R*)-konfigurációjú kiralitáscentrum

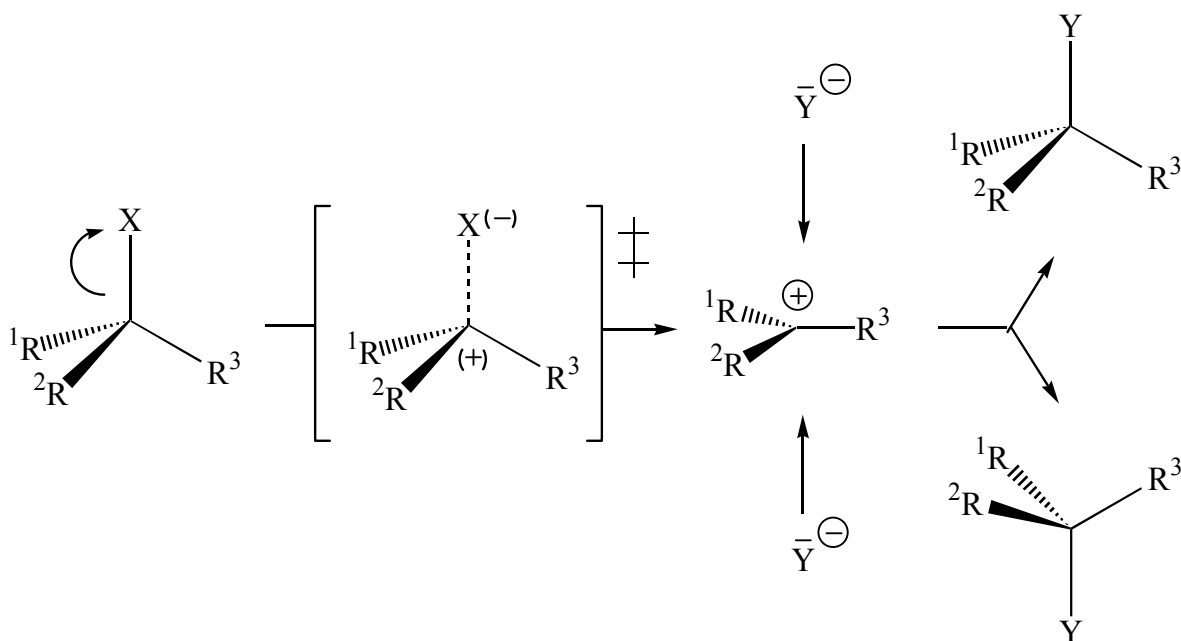


(*S*)-konfigurációjú kiralitáscentrum

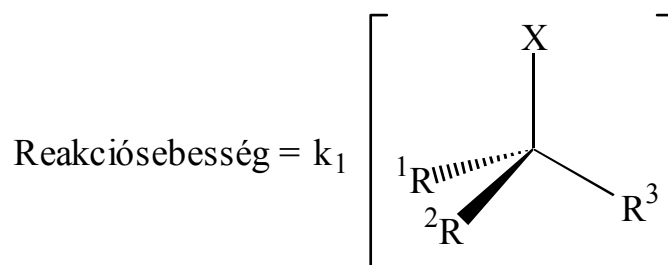
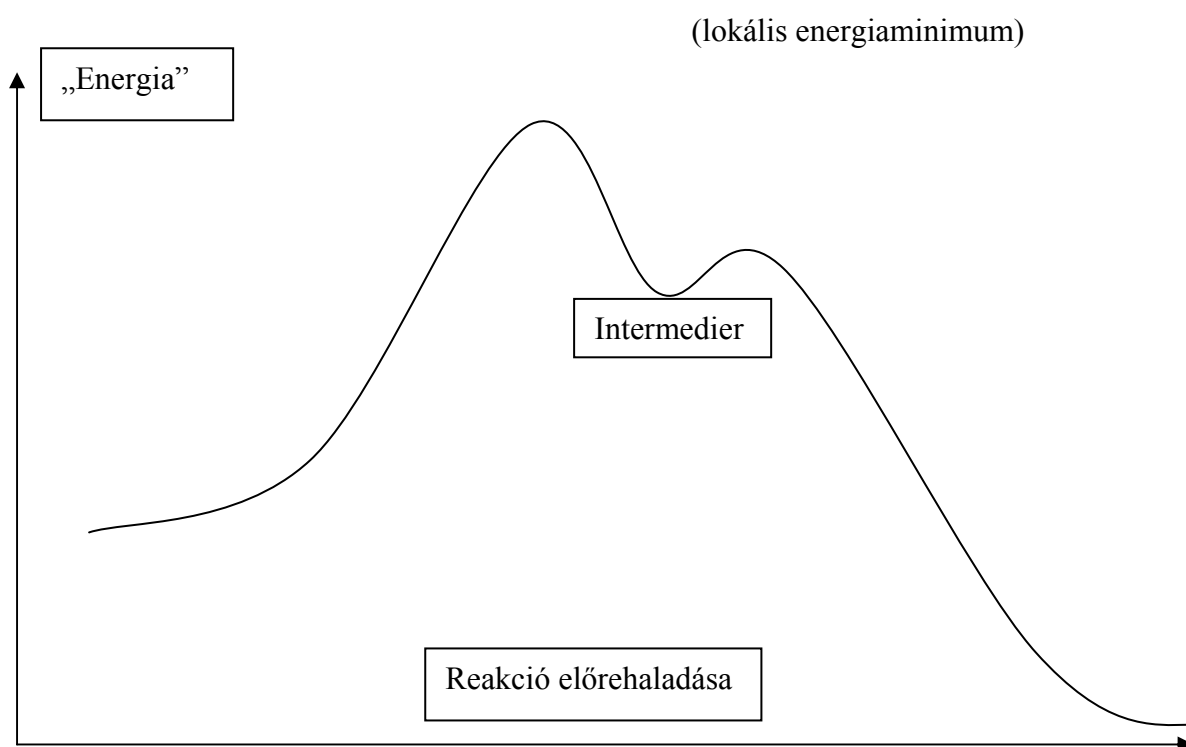
(*S*)-konfigurációjú kiralitáscentrum

### $S_N1$ -szubsztitúció

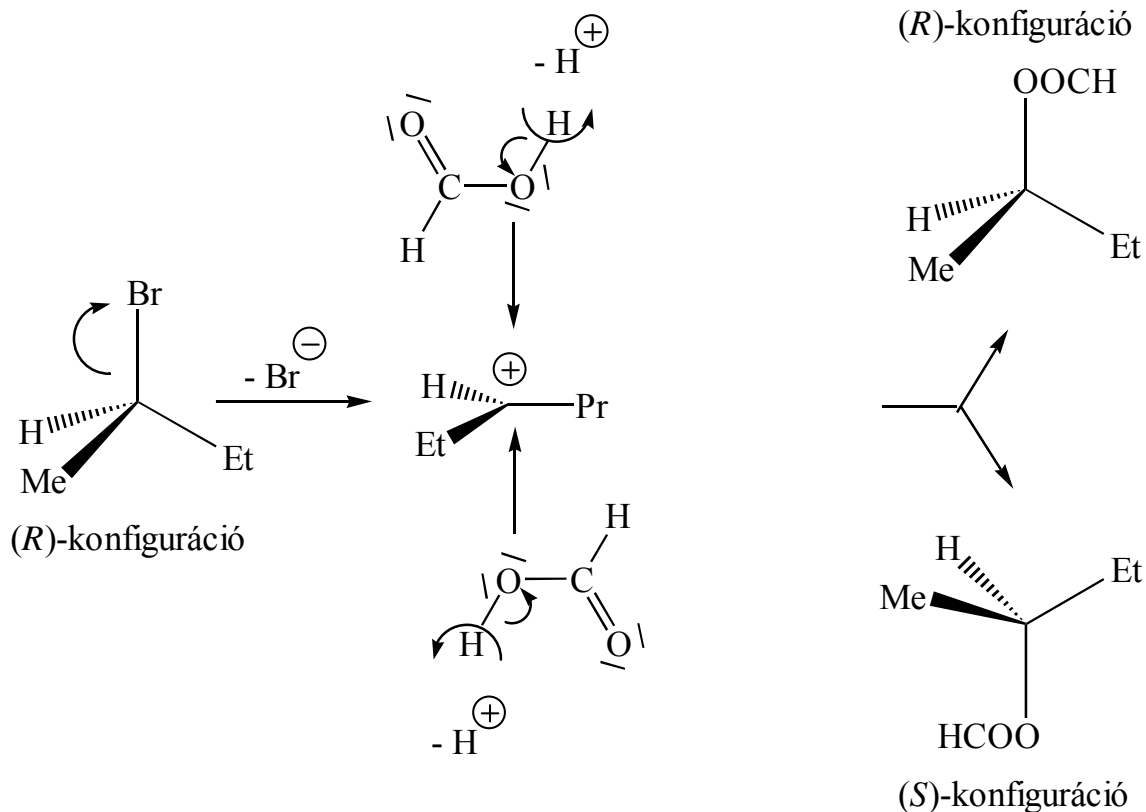
Sztereokémiai következmény: kiralitáscentrum racemizációja



Kiindulási anyagok      Átmeneti állapot      Intermedier  
 karbénium ion      Termékek



Az  $S_N1$ -szubsztitúció planáris, akirális karbénium ion intermedieren át halad, ami mindkét térfélről egyenlő valószínűséggel támadható, így a nukleofil beépülése királis kiindulási anyag esetén a kiralitáscentrum racemizációjához vezet: egy adott konfigurációjú kiralitáscentrumot tartalmazó vegyületből kiindulva a termék enantiomerek 1 : 1 arányú elegye lesz. Másképp fogalmazva: a kiindulási anyag felerészben retencióval (a kiindulási anyag és a termék kiralitása azonos), felerészben inverzióval (a kiindulási anyag és a termék kiralitása ellentétes) alakul át.



Alkil-halogenid típusa	S <sub>N</sub> 1 reakciókészség	S <sub>N</sub> 2 reakciókészség
Metil-: CH <sub>3</sub> -X	-	kiváló
Primer-: R-CH <sub>2</sub> -X	-	jó
Szekunder-: R <sub>2</sub> CH-X	reagál	reagál
Tercier-: R <sub>3</sub> C-X	kiváló	-
Allil-: CH <sub>2</sub> =CH-CH <sub>2</sub> -X	jó	jó

Nagy térigényű R-csoport primer alkil-halogenidek esetében megakadályozza az S<sub>N</sub>2-típusú szubsztitúciót a primer szénatomon: ilyenkor lehet számítani Wagner-Meerwein átrendeződésre. A nukleofil szubsztitúciós reakciókat majdnem mindig 1,2-eliminációs reakciók is kísérik (E1, E2). Nem túl nagy térigényű szubsztituensek és nem túl nagy térigényű nukleofil / bázis esetén a Zajcev-szabály érvényesül: a hidrogén nagyobb százalékban arról a szénatomról távozik, ahol eleve kevesebb van: a több elágazást tartalmazó, stabilisabb olefin nagyobb százalékban keletkezik. Az E1-elimináció karbénium ion intermedier deprotonálódásán át halad (vesd össze az S<sub>N</sub>1-szubsztitúcióval), míg az E2-elimináció annyiban hasonlít az S<sub>N</sub>2-szubsztitúcióhoz, hogy az átmeneti állapotban a nukleofil / bázis és a szubsztrátum egyaránt részt vesz, csak a bázis a távozó csoporttal szomszédos szénatomról szakít le protont: előnyös, ha ez a hidrogén a távozó csoporttal anti-periplanáris térállású.

Jó távozó csoport az, amelyiknek szénnel alkotott kötése gyenge és anionja stabilis.

Jó nukleofilek: pl. jodid ion, cianid ion.

Nukleofilek: pl. bromid ion, acetát ion, metoxid anion, metanol.