SỰ PHÂN CẮT LIÊN KẾT

- Đồng li → chia đôi cặp e → 2 gốc tự do Cl•; •Cl
- Dị li → cặp e bay hẳn về 1 nguyên tử
  - Tiểu phân chứa C^+ → carbocation → electrophile
  - Tiểu phân chứa C^- → carbanion → nucleophile

(cái C chứa C thì C gọi là carb gì)

PHẢN ỨNG THẾ

TÁC NHÂN PHẢN ỨNG

- Nucleophile: mang điện âm (−) → thích chui vào chỗ nhiều (+) → nucleo (proton)
- Electrophile: mang điện dương (+) → thích chui vào chỗ nhiều (−) → electro (electron)
- gốc tự do (Free radical): mang e độc thân [T] → khả năng phản ứng cao

PHẢN ỨNG THẾ

SR

- Đặc trưng của — HĐC no
- Gồm: Thế Halogen(*); thế nitro NO_2^-; ...
- Cơ chế

$RH + X_2 \rightarrow RX + HX$

1. Khởi mào: phân cắt đồng li X_2: (as)

$Br_2 \xrightarrow{as} Br^\bullet + \bullet Br$

2. Phát triển mạch (bước quyết định) — chậm

$Br^\bullet + CH_3-H \rightarrow \boxed{CH_3^\bullet} + HBr$ (*)

$CH_3^\bullet + Br-Br \rightarrow CH_3-Br + Br^\bullet$

... lặp lại (*) n lần

3. Tắt mạch

$Br^\bullet + Br^\bullet \rightarrow Br_2$

$Br^\bullet + CH_3^\bullet \rightarrow CH_3Br$

$CH_3^\bullet + CH_3^\bullet \rightarrow C_2H_6$

→ phổ thường thu được hỗn hợp s.phẩm

LIVEWORKSHEETS

gốc alkyl

$R-X + Y^{(-)} \rightarrow R-Y + X^{(-)}$

X: nhóm bị thế (nhóm rời) — $-HLG$; $-OH$; $-\overset{+}{N}R_3$

Y: tác nhân nucleophile — Halogen$^-$; OH^-; CN^-; $:NH_3$

S_N

S_N1

X gắn C bậc III

S_N đơn phân tử — 2 giai đoạn: (1) cắt LK cũ; (2) tạo LK mới — ≠ đồng thời

$$CH_3-C(CH_3)_2-Br \xrightarrow[GĐ(1)]{\text{chậm}} CH_3-C^{(+)}(CH_3)_2 + Br^-$$

carbocation phẳng → giai đoạn nếu $Y^{(-)}$ có thể tấn công vào từ cả 2 phía → (nếu RX quang hoạt) → thu được SP HH Race mic

carbocation — SP TRUNG GIAN

$$+OH^{(-)} \xrightarrow[GĐ(2)]{\text{nhanh}} CH_3-C(CH_3)_2-OH$$

S_N2

X gắn C bậc I

S_N lưỡng phân tử — 1 giai đoạn: cắt cũ tạo mới xảy ra đồng thời

I > Br > Cl; F ít PU

$$OH^{(-)} + H-C(H)_2-I^{\delta-} \rightarrow HO^{\delta-}\cdots C(H)_2\cdots I^{\delta-} \rightarrow HO-C(H)_2-H + I^{(-)}$$

TRẠNG THÁI CHUYỂN TIẾP

ít thuận lợi hơn khi Y tấn công vào từ phía sau X → (nếu RX quang hoạt) → thu được SP có cấu hình ngược lại ($H_3C-I \rightarrow HO-CH_3$)

S_E

HLG; NO_2; ... — $+HE$; $+Fe$

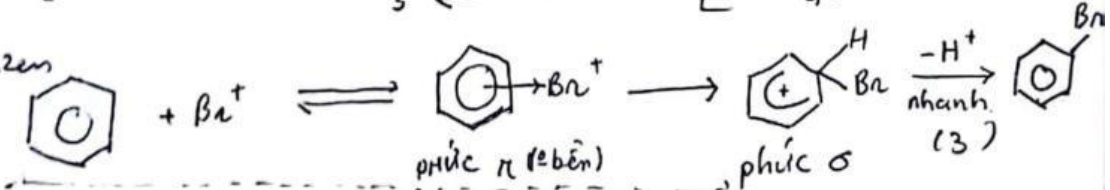
Đặc trưng cấu — HAC thơm; ưu vòng thơm (vòng thơm có mật độ e cao → dễ gắn electrophile)

Lưỡng phân tử — nhiều GĐ: (1): hình thành $Br^{(+)}$; (2) → phức π trung gian → phức σ; (3) → sản phẩm

CƠ CHẾ:

(1) $Br-Br + Fe \rightarrow FeBr_3$

$Br-Br + FeBr_3 \rightleftharpoons Br^+ + [FeBr_4]^-$



- Loại I: ưu ortho, para — alkyl; $-HLG$; $-OH$; $-NH_2$
- Loại II: ưu meta — $-NO_2$; $-CHO$; $-COOH$

Carbocation (2) — SP TRUNG GIAN

LIVEWORKSHEETS