



Institut Ruđer Bošković

CXIV. Kolokvij Zavoda za organsku kemiju i biokemiju i
Sekcije za organsku kemiju Hrvatskog kemijskog društva



Prof. dr. sc. Olga Kronja

Zavod za organsku kemiju.

Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu

e-mail: okronja@pharma.hr

ponedjeljak, 30. 03. 2015.

predavaonica III. krila IRB

15:00-16:00 sati

NUKLEOFUGALNOST IZLAZNE SKUPINE I STRUKTURNE KARAKTERISTIKE KOJE JE ODREĐUJU

Brzina heterolitičkog stupnja S_N1 reakcije određena je sposobnostima izlazne skupine (nukleofugalnosti) i karbokationskog međuprodukta (elektrofugalnosti) da napuste molekulu. Primjenom linearnog odnosa slobodnih energija, a korištenjem benzhidrilnih derivata kao supstrata, postavljene su ljestvice nukleofugalnosti i elektrofugalnosti, pomoću kojih se brzina S_N1 reakcije može izračunati prema sljedećoj jednadžbi linearnog odnosa slobodnih energija.

$$\log k = s_f(E_f + N_f)$$

N_f i s_f predstavljaju parametre nukleofugalnosti izlazne skupine u određenom otapalu, dok E_f predstavlja elektrofugalnost generiranog karbokationa i neovisan je o otapalu.

Određena je nukleofugalnost brojnih izlaznih skupina eksperimentalno i koreliranjem s kvantno-kemijskim modelnim sustavima. Detaljno su istraženi elektronski i drugi efekti (intrinzična barijera, negativna hiperkonjugacija, induktivnost, rezonancija, itd.) koji utječu na nukleofugalnost.