

Nucleophile Substitution S_N2

Die Nucleophile Substitution nach dem S_N2 -Mechanismus läuft in einem Schritt ab:

1. Annäherung des Nucleophils an die Rückseite des positiv polarisierten C-Atoms des Substrats und gleichzeitig heterolytische Abspaltung des Nucleofugs, dabei Bildung eines pentavalenten sp^2 -hybridisierten Übergangszustandes.

Die Gesamtreaktion $R-X + :Y^- \rightarrow R-Y + :X^-$ ist bimolekular, die Geschwindigkeit hängt von der Konzentration des Substrats $R-X$ und von der Konzentration des Nucleophils $:Y^-$ ab.

Einfluss des Substrats:

Tertiäre Substrate reagieren bevorzugt nach dem S_N1 -Mechanismus, weil tertiäre Carbenium-Ionen durch den +I-Effekt von drei Alkylgruppen stabilisiert werden.

Primäre Substrate reagieren bevorzugt nach dem S_N2 -Mechanismus, weil hier das positiv polarisierte C-Atom leichter vom Nucleophil angegriffen werden kann und weil primäre Carbenium-Ionen sehr instabil sind.

Sekundäre Substrate können nach beiden Mechanismen reagieren, andere Faktoren haben dann einen wichtigen Einfluss.

Einfluss des Lösemittels:

Protische Lösemittel umgeben das Nucleophil mit einer Solvathülle, welche die S_N2 -Reaktion erschwert, daher ist die S_N1 -Reaktion hier wahrscheinlicher.

Aprotische Lösemittel behindern das Nucleophil nicht mit einer Solvathülle, daher kann es leichter das Substrat nach dem S_N2 -Mechanismus angreifen.

Stärke des Nucleophils:

Starke Nucleophile können das Substrat leichter nach dem S_N2 -Mechanismus angreifen, schwache Nucleophile können besser reagieren, wenn bereits Carbenium-Ionen vorhanden sind (S_N1 -Mechanismus).

Stärke des Nucleofugs:

Schlechte Abgangsgruppen wie $:OH^-$ oder $:NH_2^-$ verlangsamen sowohl die S_N1 - wie auch die S_N2 -Reaktion. Gute Abgangsgruppen wie $:I^-$ oder $:Br^-$ begünstigen die S_N1 -Reaktion, weil sie den ersten Reaktionsschritt energetisch günstiger machen.