

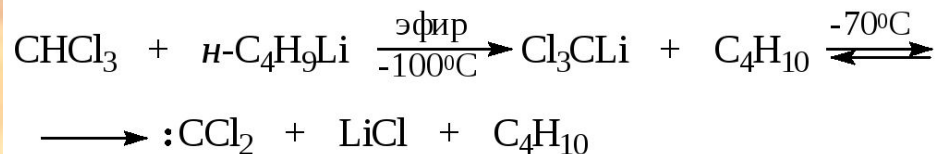
Современные представления о  
механизме реакций  
отщепления. Спектр  
механизмов E1-E2-E1сВ.  
Диаграммы Дженкса-О'  
Феррола.

Доклад  
Студента 5 курса  
КОХ ФЕН НГУ  
Рогового Максима

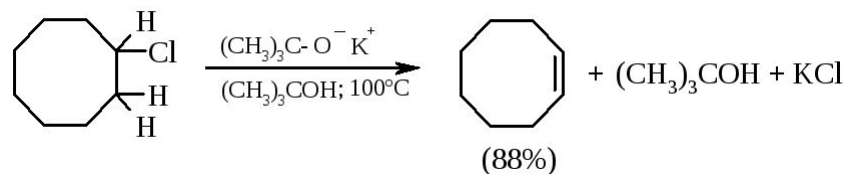
# Классификация реакций элиминирования

( $\alpha$ -элиминирование,  $\beta$ -элиминирование,  $\gamma$ -,  $\delta$ - и т.д.)

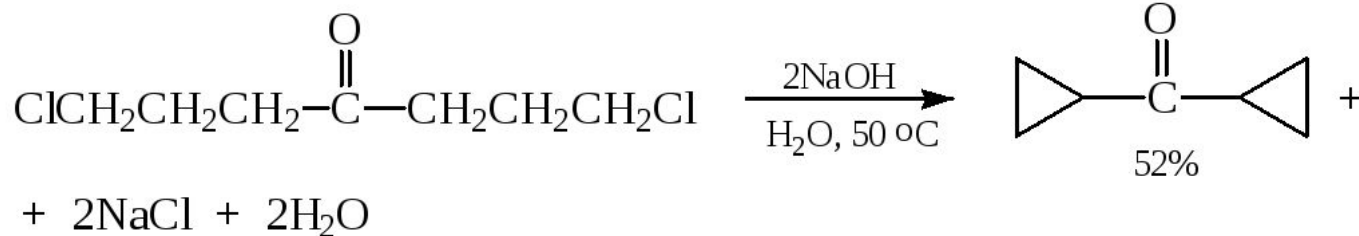
$\alpha$ -  
элиминирование:



$\beta$ -  
элиминирование:



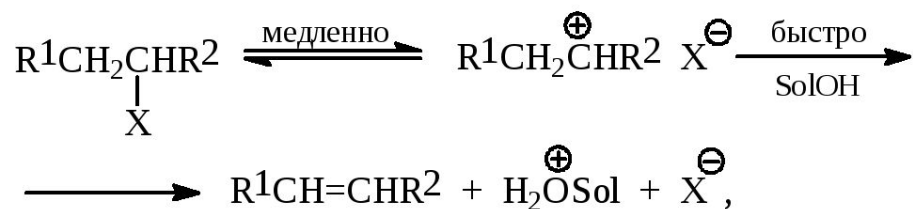
$\gamma$ -  
элиминирование:



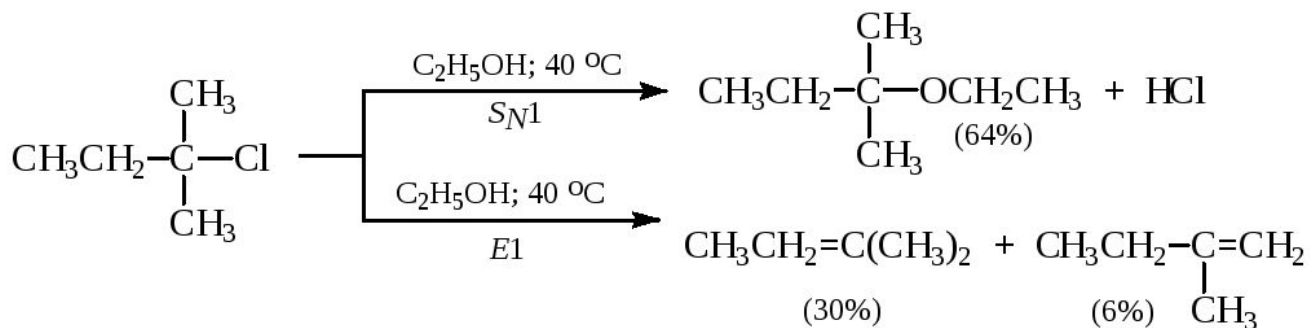
Может происходить, если есть акцепторные  
группы  
(CN, COOH, NO<sub>2</sub>, кетогруппа)

# Механизмы β-элиминирования

## I. E1-элиминирование

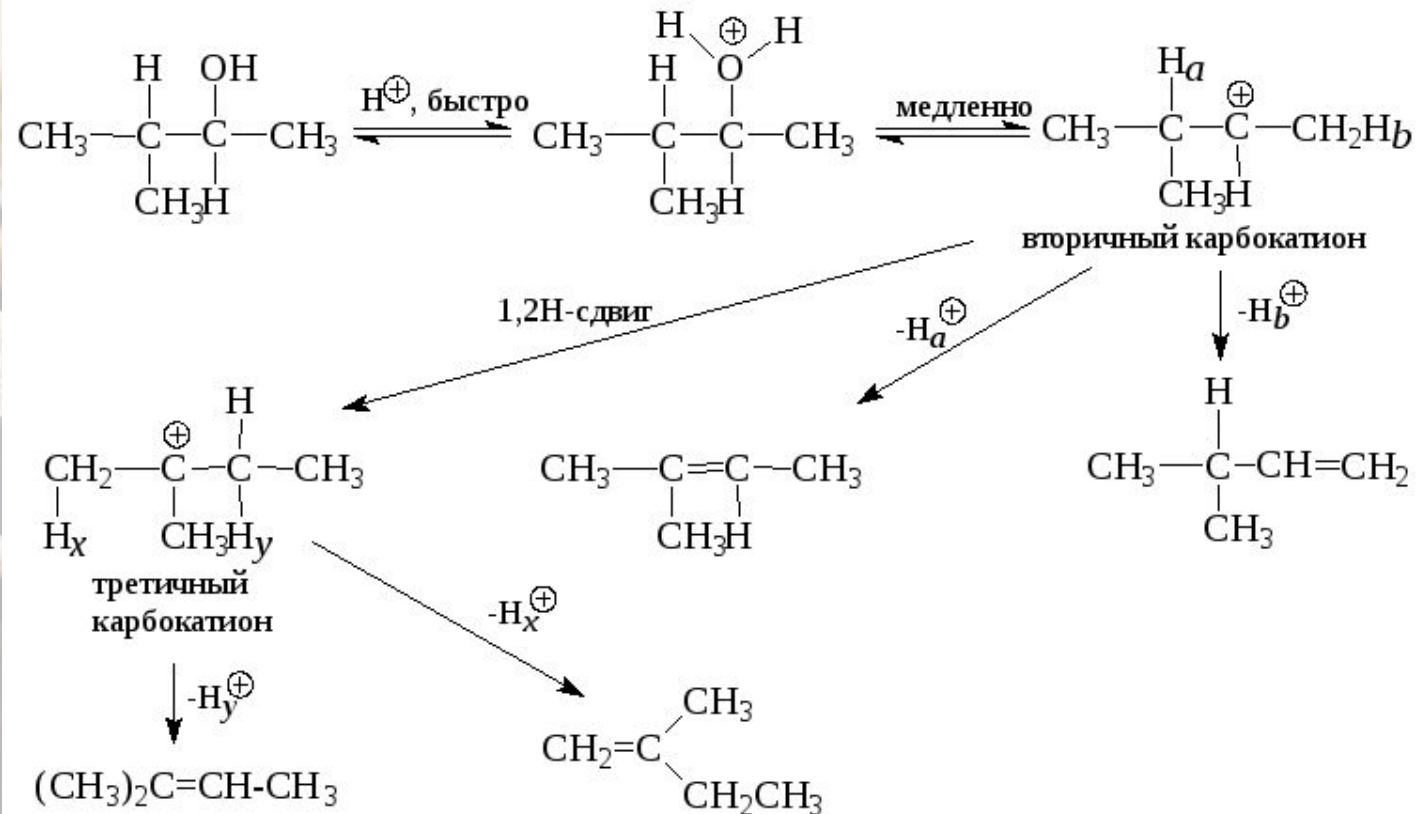


где SolOH - растворитель



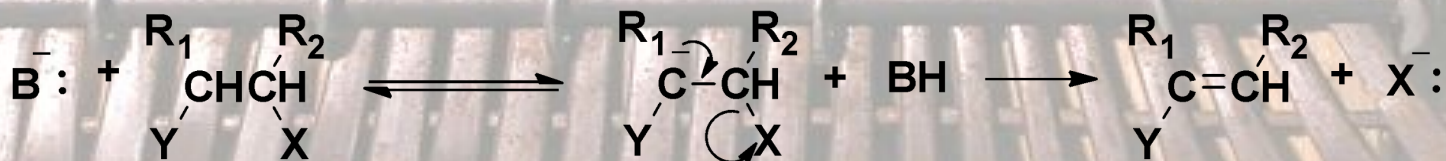
Выход продукта E1 растёт в ряду  $\text{S}^+(\text{CH}_3)_2$ , Br, Cl

# Перегруппировки в E1-элиминировании



# Механизмы β-элиминирования

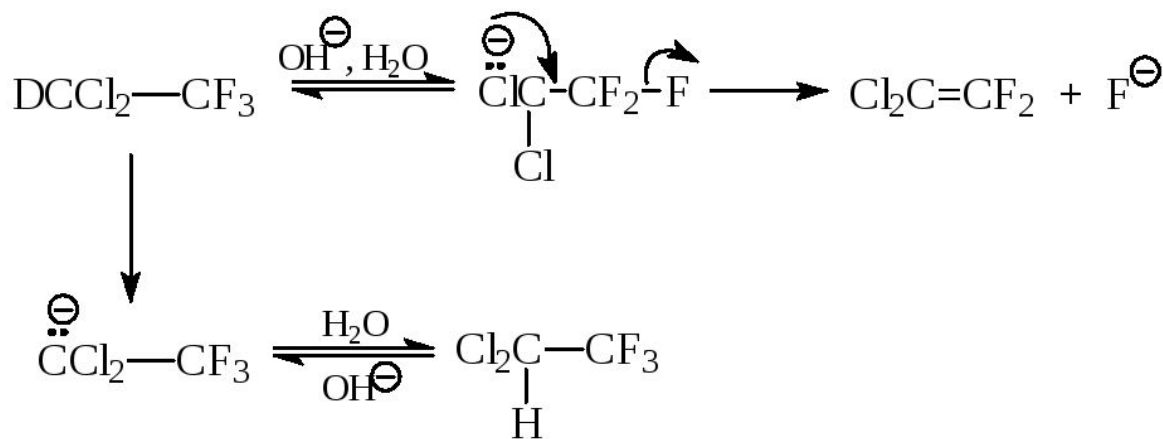
## II. E1cB-элиминирование



$$v = k[\text{субстрат}][\text{B}^-]$$

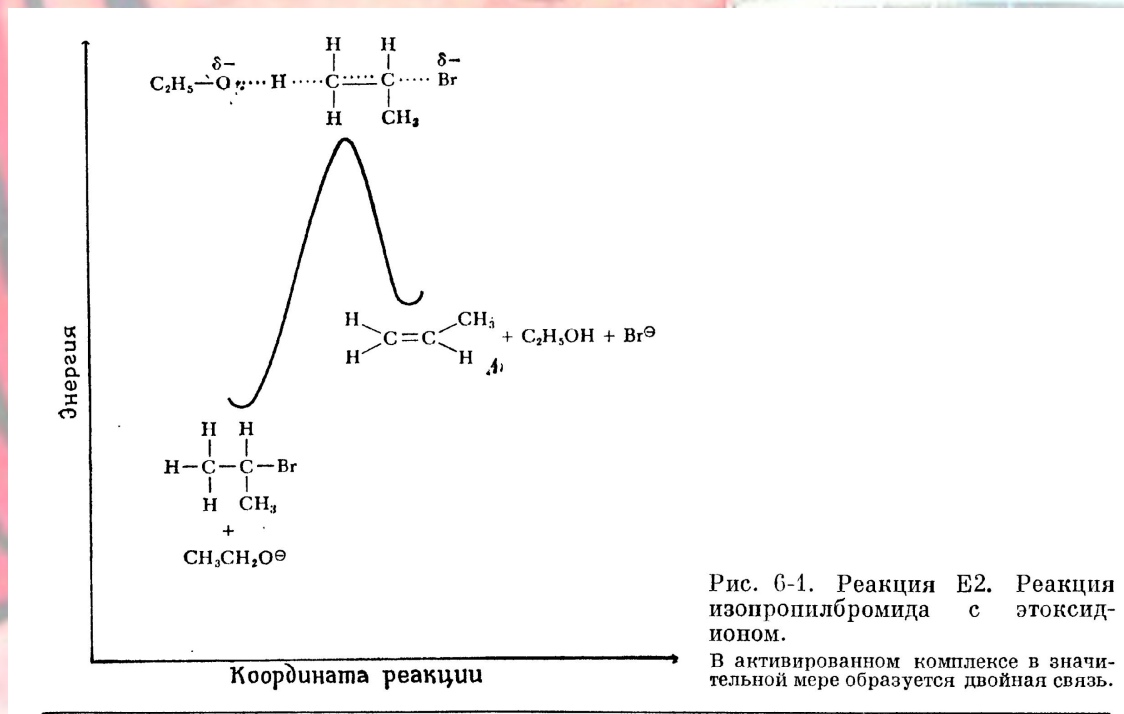
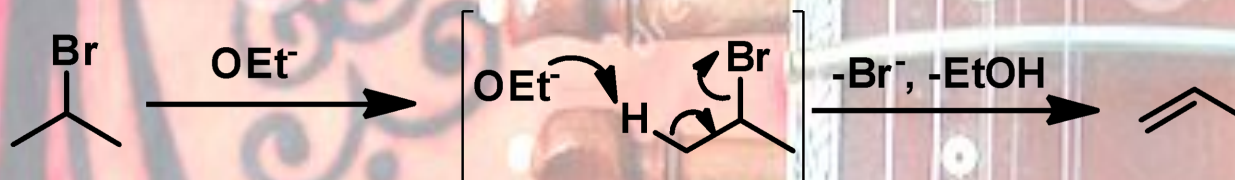
Субстрат содержит CN, NO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>R и т.п. в β-положении к уходящей группе

Или ух. группа – F, N<sup>+</sup>(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>, OTf

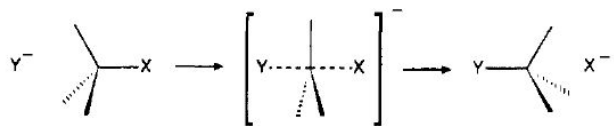


# Механизмы β-элиминирования

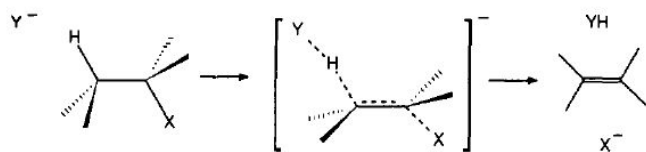
## III. E2-элиминирование



$$v \approx [\text{субстрат}][\text{B}^-] - \text{E2/S}_{\text{N}}2$$

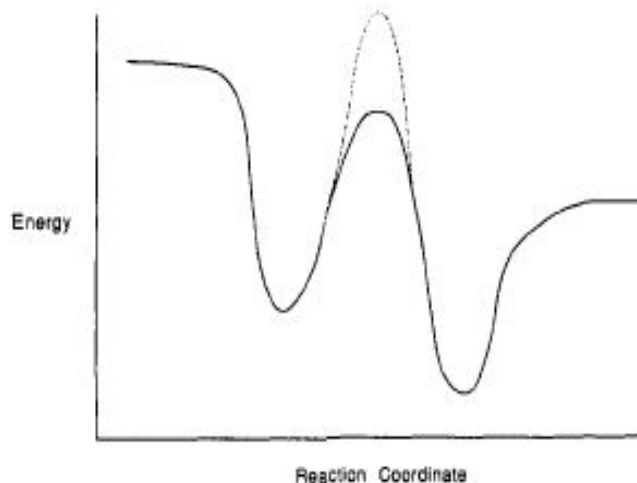


(a)

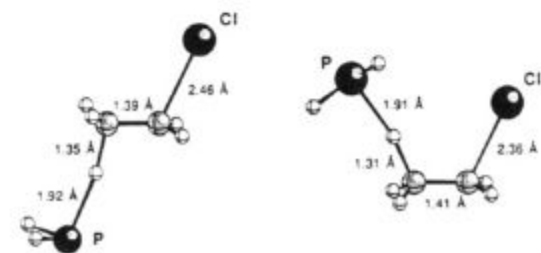
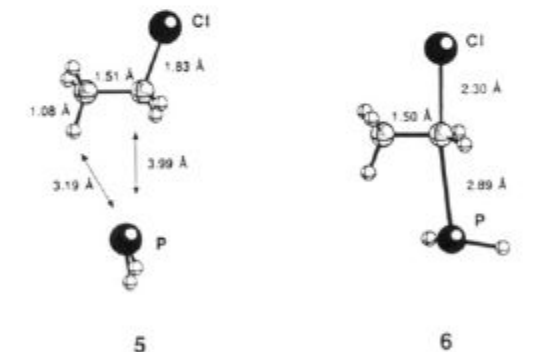
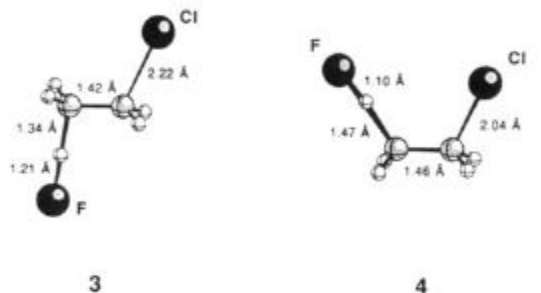
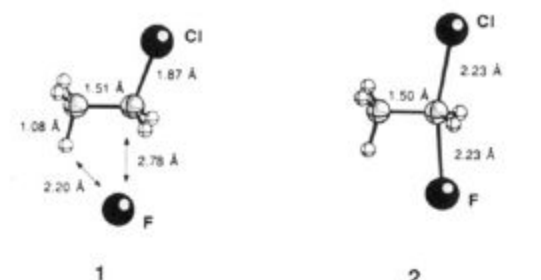
HF/6-31(+) $G^*$ 

geometry		HF	
$F^-$		energies <sup>a</sup>	-99.418 586
$PH_2^-$	P-H, 1.425 Å H-P-H, 93.46°	proton affinity <sup>b</sup>	374.3
		energies <sup>a</sup>	-341.857 647
HF	H-F, 0.911 Å	proton affinity <sup>b</sup>	367.7
$PH_3$	P-H, 1.403 Å H-P-H, 95.40°	energies <sup>a</sup>	-100.024 208
		energies <sup>a</sup>	-342.455 031

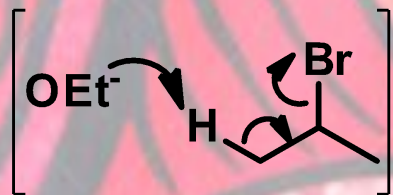
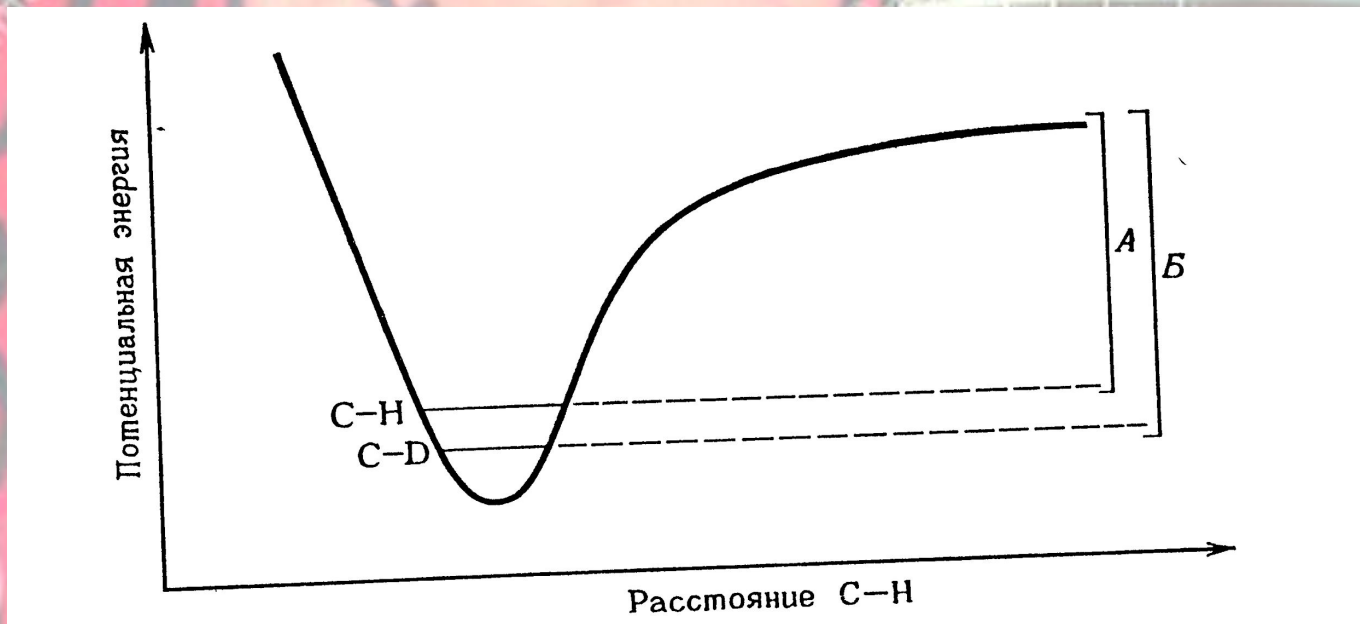
structure	6-31(+) $G^*$
	HF
1	-637.578 78 (-15.4)
2	-637.567 83 (-10.6)
3	-637.550 79 (-3.5)
4	-637.528 17 (+10.0)
5	-879.997 63 (-7.3)
6	-879.975 51 (+6.5)
7	-879.943 96 (+22.9)
8	-879.925 22 (+34.9)
$CH_3CH_2Cl$	-538.132 48



Gronert S. //Journal of the  
American Chemical Society. – 1991.  
– T. 113. – №. 16. – C. 6041-6048.



# КИЭ в механизме E2



$$k_{\text{H}}/k_{\text{D}} = 6.7$$





# Спектр E1cB-E2-E1

