



GOVERNMENT OF ANDHRA PRADESH
COMMISSIONERATE OF COLLEGIATE EDUCATION



S_N1 (ఏక అణుక, న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ) చర్యలు

Subject: Chemistry

Winnie Teja D. M.Sc

SKR&SKR Govt. Degree College (W),
Kadapa

Email. Id : winnie.teja35@gmail.com

అభ్యసన లక్ష్యాలు

- S_N1 (ఏక అణుక, న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ) చర్యా విధానం
- S_N1 , S_N2 చర్యలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

1.S_N1 (ఏక అణుక, న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ) చర్యలు

□ టెర్షియరీ ఆల్కైల్ హాలైడ్ (R₃X) లు సాధారణంగా S_N1 చర్యా విధానాన్ని అనుసరిస్తాయి.

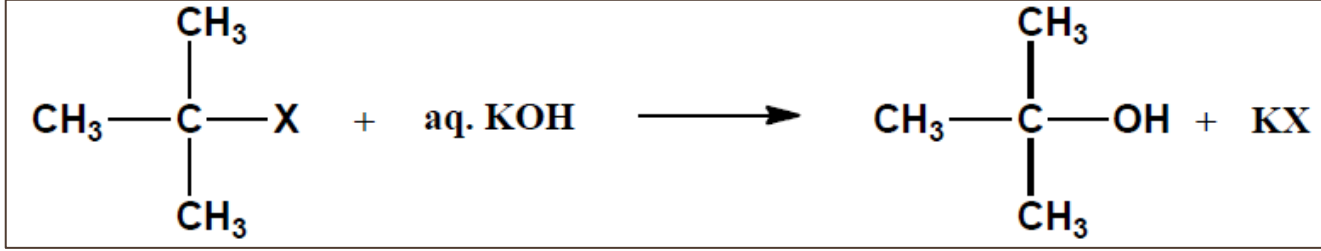
□ S_N1 చర్య

➤ రెండు దశలలో జరుగుతుంది.

➤ చర్యవేగం ఒకే క్రియాజనకం (టెర్షియరీ ఆల్కైల్ హాలైడ్) గాఢతపై మాత్రమే ఆధారపడి ఉంటుంది.

➤ చర్యవేగం ప్రథమ క్రమాంక చర్యల చర్యవేగానికి అనుగుణంగా ఉంటుంది.

S_N1 (ఏక అణుక, న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ) చర్యలు



$$\text{రేటు} \propto [(\text{CH}_3)_3\text{C-X}]$$

□ S_N1 చర్యలో ఆల్కైల్ హాలైడ్ ల సాపేక్ష చర్యాశీలత క్రమం

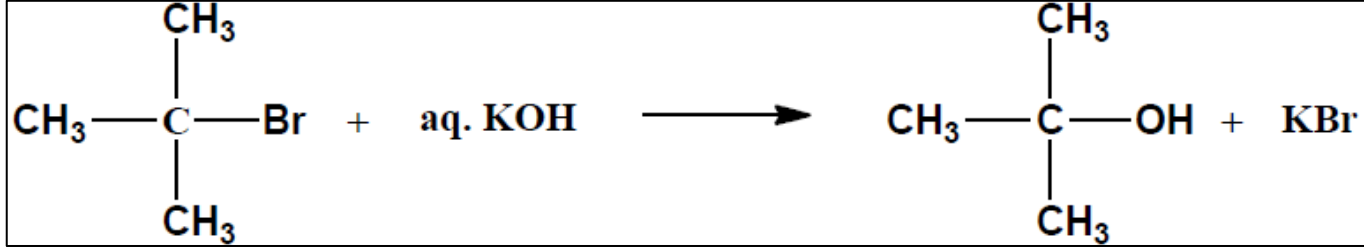
3° ఆల్కైల్ హాలైడ్ > 2° ఆల్కైల్ హాలైడ్ > 1° ఆల్కైల్ హాలైడ్

అధిక చర్యాశీలత

అల్ప చర్యాశీలత

2. S_N1 చర్య విధానం

- టెర్షియరీ బ్యుటైల్ బ్రోమైడ్, KOH జలద్రావణం సమక్షంలో క్షార జలవిశ్లేషణ



□ S_N1 చర్య రెండు దశలలో జరుగుతుంది.

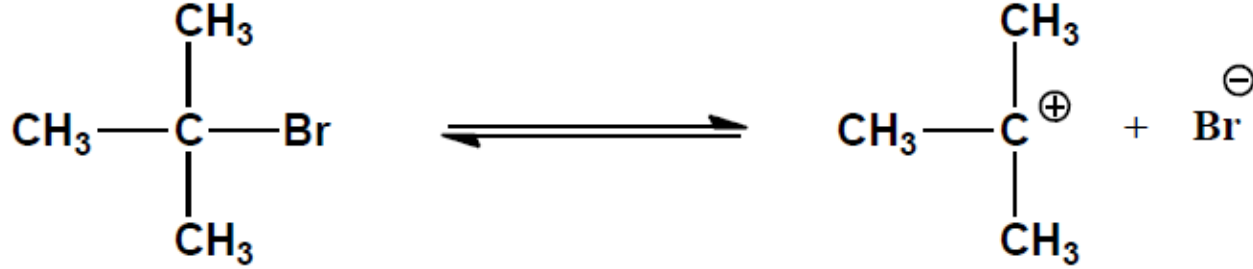
➤ మొదటి దశ - రేటు నిర్ధారక దశ (Rate Determining Step)-

నెమ్మదిగా జరుగుతుంది.

టెర్షియరీ బ్యుటైల్ బ్రోమైడ్ అయనీకరణం చెంది టెర్షియరీ బ్యుటైల్

కార్బోకాటయాన్ ను ఏర్పరుస్తుంది.

2. S_N1 చర్యా విధానం



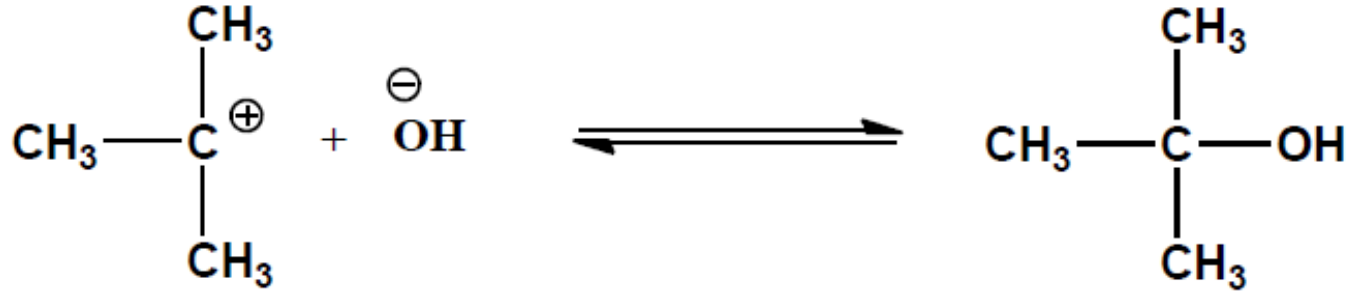
టెర్షియరీ బ్యుటైల్ బ్రోమైడ్

టెర్షియరీ బ్యుటైల్
కార్పోకాటయాన్

❖ కార్పోకాటయాన్ S_N1 చర్యా విధానంలో మధ్యగత స్థితి (intermediate).

2. S_N1 చర్య విధానం

➤ రెండో దశలో టెర్షియరీ బ్యుటైల్ కార్బోకాటయాన్ OH⁻ అయాన్ తో వేగంగా చర్యజరిపి టెర్షియరీ బ్యుటైల్ ఆల్కహాల్ ఉత్పన్నాన్ని ఏర్పరుస్తుంది.



టెర్షియరీ బ్యుటైల్
కార్బోకాటయాన్

టెర్షియరీ బ్యుటైల్
ఆల్కహాల్

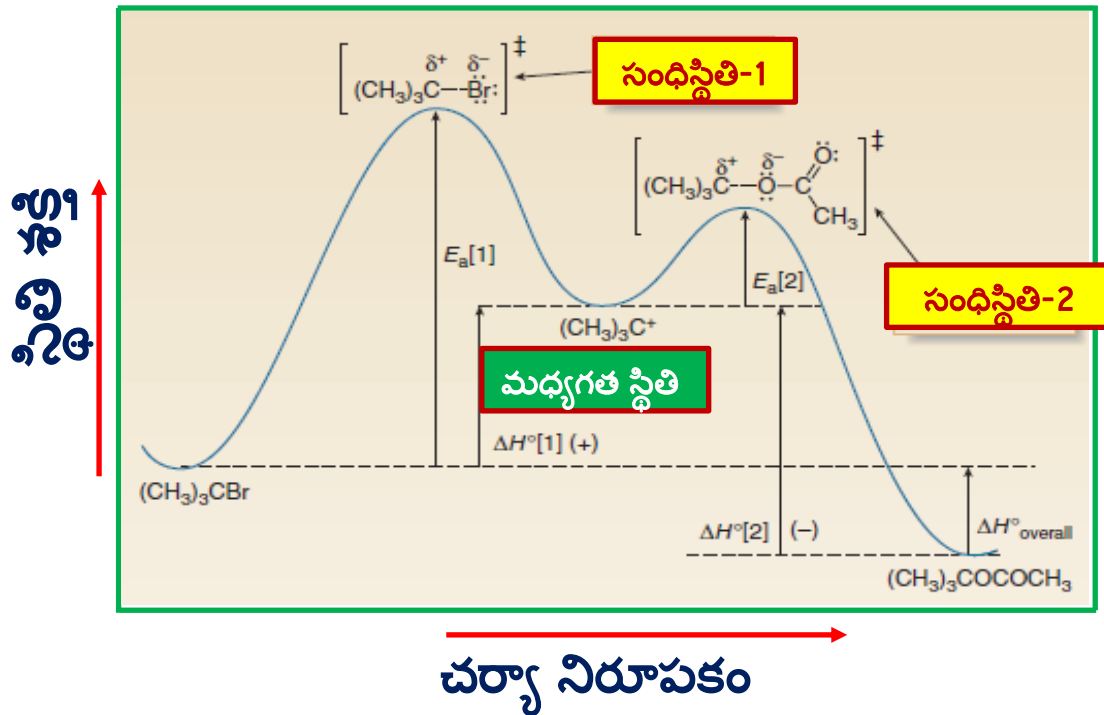
□ మొదటి దశలో

- ❖ C-Br బంధవిచ్ఛిత్తి జరుగుతుంది.
- ❖ బంధవిచ్ఛిత్తి ఉష్ణ గ్రాహకం కాబట్టి ఈ దశ మెల్లగా జరుగుతుంది.
- ❖ క్రియాజనకానికి శక్తి అవసరమవుతుంది.

➤ ధ్రువ ద్రావణాలు (polar solvents) S_N1 చర్యవిధానానికి బాగా అనుకూలీస్తాయి.

ధ్రువద్రావణి అణువులు, అయనీకరణం వల్ల ఏర్పడిన అయాన్ లను ద్రావణీకృతం చేయడం ద్వారా C —Br బంధవిచ్ఛిత్తికి సహాయపడతాయి.

S_N1 చర్య శక్తి పాఠ్య చిత్రం



రెండు సంధిస్థితులు: TS₁, TS₂

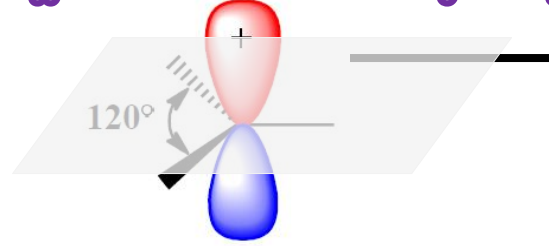
మధ్యగత స్థితి

S_N1 చర్య శక్తి పార్శ్వ చిత్రం

- టెర్షియరీ బ్యుటైల్ బ్రోమైడ్ ఉత్తేజిత శక్తిని ($E_a[1]$) గ్రహించి, మొదటి సంధిస్థితి (TS_1) కి ఉత్తేజితం చెందుతుంది.
- TS_1 త్వరితగతిన వియోగం చెంది, కొంత శక్తిని కోల్పోయి, అస్థిరమయిన టెర్షియరీ బ్యుటైల్ కార్బోకాటయాన్ మధ్యగత స్థితిగా మారుతుంది.
- మధ్యగతస్థితి కొంత శక్తిని ($E_a[2]$) గ్రహించి, రెండో సంధిస్థితి (TS_2)ను ఏర్పరుస్తుంది.
- TS_2 కొంత శక్తిని కోల్పోయి స్థిరమైన ఉత్పన్నం టెర్షియరీ బ్యుటైల్ ఆల్కహాల్ ను ఏర్పరుస్తుంది.

S_N1 చర్య ప్రాదేశిక రసాయన శాస్త్రం

□ S_N1 చర్యలలో కార్బో కాటయన్ మధ్యగతస్థితి.



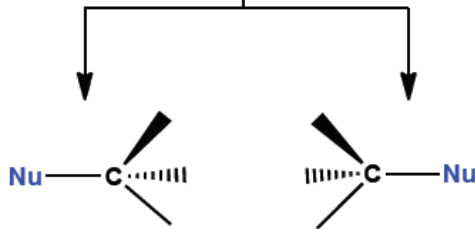
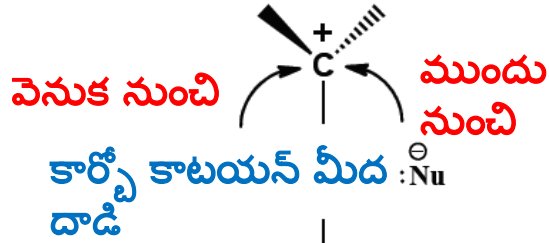
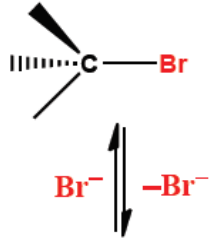
ఖాళీ p ఆర్బిటాల్

sp^2 సంకరీకరణం

□ కార్బోకాటయన్ లో

- కార్బన్ కు sp^2 సంకరీకరణ స్థితి, సమతల నిర్మాణం, ధనావేశం ఉంటుంది.
- కార్బన్ మీద ఉన్న మూడు ప్రతిక్షేపకాలు ఒకే తలంలో ఉంటాయి.
- సంకరీకరణం చెందని ఖాళీ 'p' ఆర్బిటాల్ తలానికి లంబదిశలో ఉంటుంది.

S_N1 చర్య ప్రాదేశిక రసాయన శాస్త్రం



విలోమనం
చెందిన విన్యాసం

మౌలిక
విన్యాసం

□ కార్బో కాటయన్ మీద న్యూక్లియోఫైల్ ముందు నుంచి గానీ వెనుకనుంచి గానీ దాడి చేయడానికి సమాన సంభావ్యత ఉంది.

□ అసౌష్టవ కార్బన్ కల్గిన ఆల్కైల్ హాలైడ్ S_N1 చర్యలో పాల్గొంటే, ఎనన్షియోమర్ల మిశ్రమం ఏర్పడుతుంది.

□ అసౌష్టవ ఆల్కైల్ హాలైడ్ పరంగా

మౌలిక విన్యాసం కల్గిన ఎనన్షియోమర్- 50%;

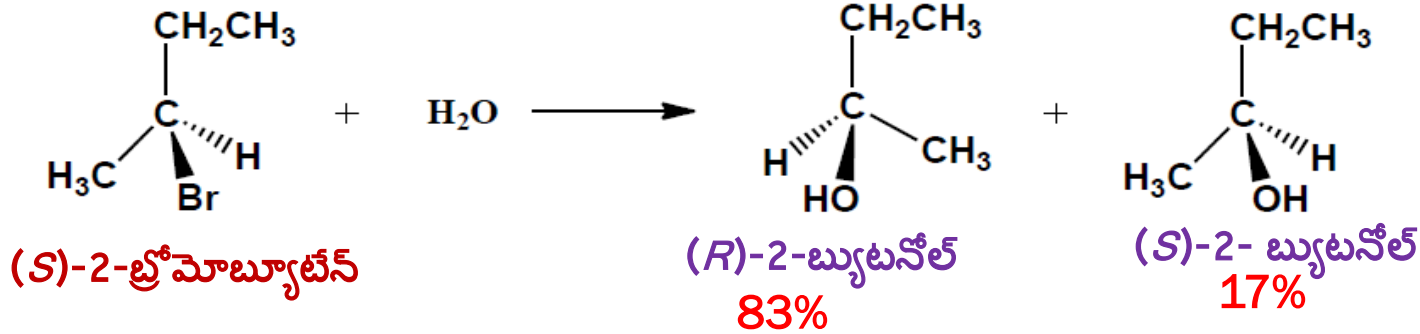
విలోమనం చెందిన విన్యాసం కల్గిన ఎనన్షియోమర్

-50% రెసిమిక్ మిశ్రమం

S_N1 చర్య ప్రాదేశిక రసాయన శాస్త్రం

□ చాలా వరకు S_N1 చర్యలలో

- అసౌష్టవ కార్బన్ కల్గిన ఆల్కైల్ హాలైడ్ల నుంచి అధిక మోతాదులో విలోమనం చెందిన విన్యాసం కల్గిన ఉత్పన్నం (ఎనన్టియోమర్) ఏర్పడుతుంది.
- 50 నుంచి 70 శాతం వరకు ఏర్పడే ఉత్పన్నం విలోమనం చెందిన విన్యాసం కలిగి ఉంటుంది.



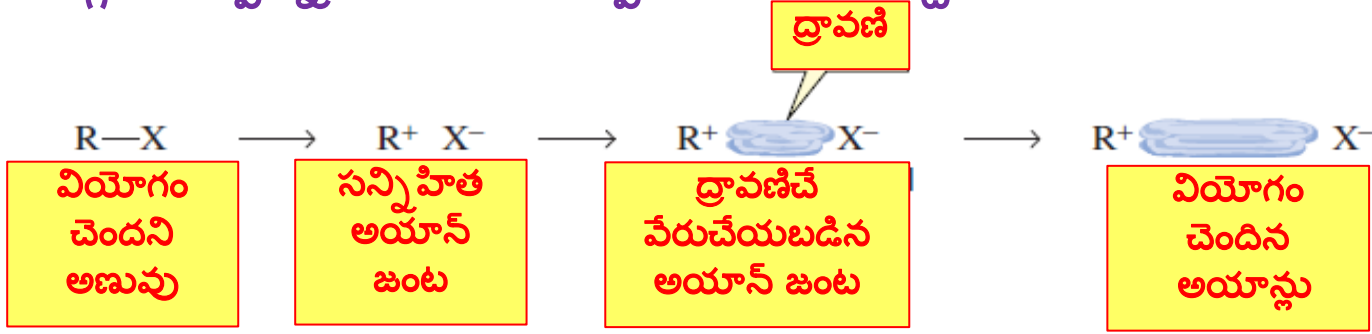
66% విలోమనం చెందిన విన్యాసం కల్గిన ఉత్పన్నం

S_N1 చర్య ప్రాదేశిక రసాయన శాస్త్రం

- సాల్ విన్స్ టీన్- S_N1 చర్యలలో అధిక మోతాదులో విలోమనం చెందిన విన్యాసం కలిగిన ఉత్పన్నం ఎందుకు ఏర్పడుతుందో మొట్టమొదటిగా వివరించారు.

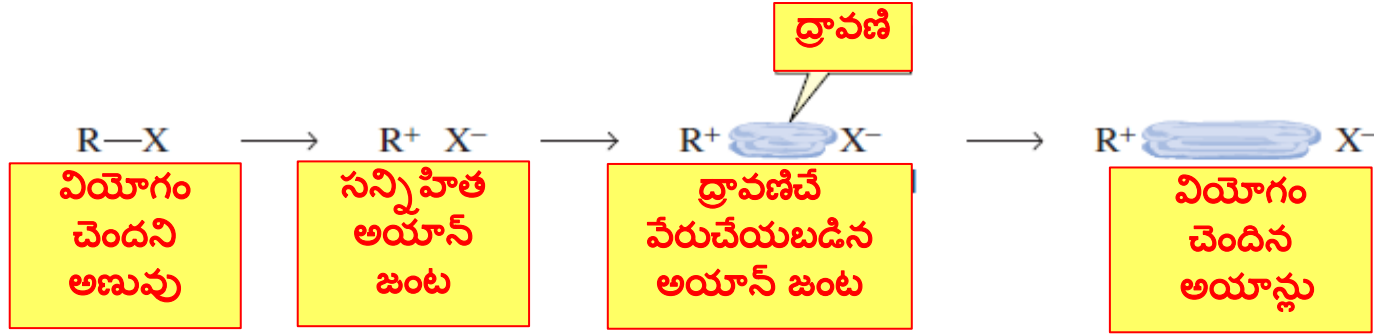


Saul Winstein



- ❖ ఆల్కైల్ హాలైడ్ వియోగం చెందినప్పుడు ముందుగా సన్నిహిత అయాన్ జంట ఏర్పడుతుంది.
- ❖ కాటయాన్, ఆనయాన్ మధ్యలో ద్రావణి అణువుల చేరిక వలన ద్రావణిచే వేరుచేయబడిన అయాన్ జంట ఏర్పడుతుంది.
- ❖ ద్రావణిచే వేరుచేయబడిన అయాన్ జంట నుండి పూర్తిగా వియోగం చెందిన అయాన్లు ఏర్పడతాయి.

S_N1 చర్య ప్రాదేశిక రసాయన శాస్త్రం



- న్యూక్లియోఫైల్ పై నాల్గింటిలో దేని మీద అయిన దాడి చేయవచ్చు.
- న్యూక్లియోఫైల్ పూర్తిగా వియోగం చెందిన కార్బోకాటయన్ మీద దాడి చేస్తే రెసిమిక్ మిశ్రమం ఏర్పడుతుంది.
- న్యూక్లియోఫైల్ సన్నిహిత అయాన్ జంట లేదా ద్రావణిచే వేరుచేయబడిన అయాన్ జంటలో కార్బోకాటయన్ మీద దాడి చేసినప్పుడు ఒక వైపు హాలైడ్ అయాన్ అడ్డుగా ఉండుట వలన విలోమనం చెందిన విన్యాసం కల్గిన ఉత్పన్నం ఏర్పడుతుంది.

న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ చర్యలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

S_N1 , S_N2 చర్యల వేగాలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

1. ఆల్కైల్ సమూహ నిర్మాణం (-R)
2. న్యూక్లియోఫైల్ ప్రభావం
3. నిష్క్రమించే ప్రమేయం (X) స్వభావం
4. ద్రావణి స్వభావం

న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ చర్యలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

1. ఆల్కైల్ సమూహ(-R) నిర్మాణం:

S_N1 చర్యవేగం కార్బోకాటయన్ స్థిరత్వం మీద ఆధారపడి ఉంటుంది.

- ప్రేరేపక, అతిసంయుక్త, రెజోనెన్స్ ప్రభావం వల్ల ఎలక్ట్రాన్లను విడుదల చేసే సమూహాలు కార్బోకాటయన్ల స్థిరత్వాన్ని పెంచుతాయి.

ఆల్కైల్ హాలైడ్లలో S_N1 చర్యవేగం క్రమం (కార్బోకాటయన్ ల సాపేక్ష స్థిరత్వ క్రమం)

టెంజైల్, ఎలైల్ > టర్షియరీ > సెకండరీ > ప్రైమరీ > మిథైల్ కార్బోకాటయన్

న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ చర్యలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

1. ఆల్కైల్ సమూహ(-R) నిర్మాణం:

క్రియాశీల కార్బన్ చుట్టూ ప్రాదేశిక అవరోధం పెరుగుతున్న కొద్దీ S_N2 చర్యాశీలత తగ్గుతుంది.

ఆల్కైల్ హాలైడ్ లలో S_N2 చర్యావేగ క్రమం:

మిథైల్ > ప్రైమరీ > సెకండరీ > టెర్షియరీ హాలైడ్

న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ చర్యలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

2. న్యూక్లియోపైల్ ప్రభావం:

S_N1 చర్య:

- చర్యారేటు న్యూక్లియోపైల్ గాఢత లేదా స్వభావం మీద ఆధారపడదు- రేటు నిర్ధారణ దశలో న్యూక్లియోపైల్ పాల్గొనదు.

S_N2 చర్య:

- చర్యారేటు న్యూక్లియోపైల్ గాఢత మరియు స్వభావం మీద ఆధారపడుతుంది.
- న్యూక్లియోపైల్ గాఢత పెంచితే చర్యారేటు పెరుగుతుంది.

న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ చర్యలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

2. న్యూక్లియోఫైల్ ప్రభావం:

S_N2 చర్య:

బలమైన న్యూక్లియోఫిలిక్ కారకాలు సమర్థవంతంగా చర్యాశీల కార్బన్ నుంచి హాలైడ్ అయాన్ ను తొలగించడం ద్వారా చర్యవేగాన్ని పెంచుతాయి.

కొన్ని న్యూక్లియోఫైల్ ల న్యూక్లియోఫిలిసిటీ క్రమం:



న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ చర్యలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

3. నిష్క్రమించే ప్రమేయ (X) స్వభావం :

S_N1 , S_N2 చర్య వేగాలను నిష్క్రమించే ప్రమేయ స్వభావం ప్రభావితం చేస్తుంది-
చర్యానిర్ధారణ దశలో నిష్క్రమించే ప్రమేయం తొలగింపబడుతుంది.

❖ నిష్క్రమణ తరువాత బలహీన క్షారాలు- మంచి నిష్క్రమణ సమూహాలు

❖ హలోజన్లలో, అయోడైడ్ అయాన్ బలహీన క్షారం, కావున మంచి

నిష్క్రమణ సమూహం. $I^- > Br^- > Cl^- > F^-$

ఆల్కైల్ హాలైడ్ చర్యవేగ క్రమం:

$RI > RBr > RCl > RF$

న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ చర్యలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

4. ద్రావణి స్వభావం

S_N1 చర్య: పోలార్ ప్రోటిక్ ద్రావణిలు (ఉదాహరణ: నీరు, ఇథనోల్)

- కార్బోకాటయన్ ఏర్పడే రేటును పెంచుతాయి.
- కార్బోకాటయన్ ఏర్పాటుకు దోహదపడే సంధిస్థితికి స్థిరత్వాన్ని ఇస్తాయి.
- చర్యవేగాన్ని పెంచుతాయి.

❖ నీరు మంచి పోలార్ ప్రోటిక్ ద్రావణి- అయనీకరణాన్ని ప్రోత్సహిస్తుంది.

❖ నీరు-మిథనోల్ లేదా నీరు-ఇథనోల్ ద్రావణి మిశ్రమాన్ని S_N1 చర్యలో ఉపయోగిస్తారు.

న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ చర్యలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

4. ద్రావణి స్వభావం

S_N2 చర్య:

పోలార్ ప్రోటిక్ ద్రావణిలు

- న్యూక్లియోఫైల్ ను హైడ్రోజన్ బంధాల ద్వారా బంధిస్తాయి.
- చర్యారేటును తగ్గిస్తాయి.
- హాలైడ్ అయాన్ల న్యూక్లియోఫిలిసిటీ క్రమం: $I^- > Br^- > Cl^- > F^-$

(అల్ప పరిమాణాన్ని కలిగిన F^- ఎక్కువగా ద్రావణీకరణం చెందుతుంది)

న్యూక్లియోఫిలిక్ ప్రతిక్షేపణ చర్యలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

4. ద్రావణి స్వభావం

S_N2 చర్య:

పోలార్ అప్రోటిక్ ద్రావణిలు (ఉదాహరణ: DMF, DMSO)

- న్యూక్లియోఫైల్ ను హైడ్రోజన్ బంధాల ద్వారా బంధించవు.
- చర్యారేటును పెంచుతాయి.
- హాలైడ్ అయాన్ల న్యూక్లియోఫిలిసిటీ క్రమం:



S_N1 , S_N2 చర్యల మధ్య భేదాలు

S_N1 చర్య	S_N2 చర్య
1. ఇవి ఏక అణుక చర్యలు	1. ఇవి ద్వి అణుక చర్యలు.
2. చర్యాశీల కార్బన్ పరమాణువుపై న్యూక్లియోఫైల్ దాడి రెండువైపుల నుంచి జరుగుతుంది. కానీ వెనుకవైపు నుంచి దాడి జరిగే శాతం అధికంగా ఉంటుంది.	2. న్యూక్లియోఫైల్ దాడి వెనుక వైపు నుంచి మాత్రమే జరుగుతుంది.
3. ధ్రువణభ్రామక ఆల్కైల్ హాలైడ్ లో పాక్షికంగా రెసిమీకరణం జరుగుతుంది.	3. వాలైన్ విలోమనం జరుగుతుంది

S_{N1} , S_{N2} చర్యల మధ్య భేదాలు

S_{N1} చర్య	S_{N2} చర్య
4. న్యూక్లియోఫైల్ అల్పగాఢత చర్యావిధానాన్ని ప్రోత్సహిస్తుంది.	4. న్యూక్లియోఫైల్ అధిక గాఢత చర్యావిధానాన్ని ప్రోత్సహిస్తుంది.
5. ఎలక్ట్రానిక్ అంశాలు చర్యావేగాన్ని ప్రభావితం చేస్తాయి.	5. ప్రాదేశిక అవరోధం చర్యావేగాన్ని తగ్గిస్తుంది.
6. H_2O , NH_3 లాంటి బలహీనమైన న్యూక్లియోఫైల్ లు ఈ చర్యావిధానానికి అనుకూలంగా ఉంటాయి.	6. ఆల్కాల్కైడ్, అయోడైడ్ లాంటి బలమైన న్యూక్లియోఫైల్ లు చర్యావిధానానికి అనుకూలంగా ఉంటాయి.

S_N1, S_N2 చర్యల మధ్య భేదాలు

S _N 1 చర్య	S _N 2 చర్య
7. ద్రావణి ధ్రువణతతో చర్యా వేగం పెరుగుతుంది.	7. ద్రావణి ధ్రువణత పెరుగుతున్న కొద్దీ, చర్యా వేగం తగ్గుతుంది.
8. ఆల్కైల్ హాలైడ్లలో చర్యాశీలక్రమం బెంజైల్, అలైల్ > టెర్షియరీ > సెకండరీ > ప్రైమరీ > మిథైల్ హాలైడ్లు	8. ఆల్కైల్ హాలైడ్లలో చర్యాశీలక్రమం మిథైల్ > ప్రైమరీ > సెకండరీ > టెర్షియరీ హాలైడ్లు



ధన్యవాదాలు



References:

- 1. Organic Reaction mechanisms VK Ahluwalia & Rakesh Kumar Parashar**
- 2. Organic chemistry by IL Finar Vol –II**

For additional information refer to the following books:

- 1. Organic chemistry(English, Paperback, 10th edition) by TW Graham Solomons, John Wiley and Sons Ltd.**
- 2. Organic chemistry(English, Paperback, 7th edition) by Paula Y Bruice, Pearson Education.**
- 3. Organic chemistry(English, Paperback, 3rd edition) by Janice Gorzynski Smith, McGraw-Hill**
- 4. Organic chemistry(English, Paperback, 2nd edition) by Jonathan Clayden, Nick Greeves and Stuart Warren, Oxford University Press.**