KRC
Kemilärarnas resurscentrum

Reaktioner med alkylhalogenider – simuleringsövning

Senast uppdaterad: 2025-04-16

Inledning

Vid en organisk syntes mellan organiska molekyler sker reaktioner på olika sätt beroende av vilka reaktanter som ingår i syntesen. Hur reaktionen sker brukar beskrivas med att en reaktionsmekanism som beskriver den stegvisa omfördelningen av elektroner för att uppnå en stabil produkt. På vägen bildas instabila mellanprodukter, så kallade *intermediärer*. I den här övningen ska titta närmare på alkylhalogeniders reaktioner med hjälp av två olika visualiseringsverktyg.

Resurser

Visualiseringsverktygen Chemtube3d, https://www.chemtube3d.com/
och Molview, https://molview.org/

Utförande

Separat förberedande övning: Visualiseringsverktyget – Molview (länk)

Del I – Lär känna visualiseringsverktyget Chemtube3d (punkt 1–4).

Del II – Reaktionen mellan en primär alkylhalogenid och bromidjoner (punkt 5–7).

Del III – Reaktionen mellan en tertiär alkylhalogenid och vatten (punkt 8).

Del IV – Beskriv en egen vald reaktion från Chemtube3d (punkt 9).

Del I

1. Öppna appen Chemtube 3d https://www.chemtube3d.com/
2. Välj i rullgardinsmenyn; → Organic → Organic Chemistry Animations Introduction Varje sida under ”Organic” innehåller lite information om en reaktion, följt av ett interaktivt reaktionsschema.
3. Genom att klicka på lämpliga delar av schemat och rotera strukturerna i 3D kan du utforska reaktionens egenskaper och upptäcka hur molekylerna interagerar. Observera ”mekanismpilarna” på reaktanten, som visar elektronförflyttningar.

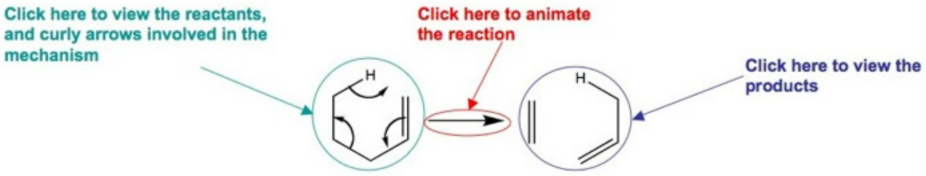
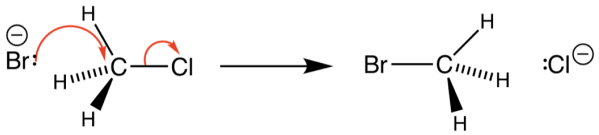


Bild 1: Exempel som visar hur man kan klicka sig fram i en reaktion (Skärmdump från https://www.chemtube3d.com/)

4. Lek runt lite grann i programmet och lär känna det på egen hand. Klicka på ”Controls” i stora figuren till vänster och testa vad som händer när du klickar i de olika rutorna. Under ”Display controls” kan du exempelvis välja vilken typ av molekylmodell som du föredrar. I den här övningen rekommenderas ”Ball & Stick”. Lägg till beteckningar för atomslagen.

Del II

5. Nedan visas en reaktion där en bromidjon reagerar med en alkylhalogenid (halogenerat kolväte).



   a) Vad heter reaktanten med ett systematiskt namn?

   b) Vad heter produkten med ett systematiskt namn?

   c) Vad kallas denna typ av reaktion?

   d) Hur många reaktionssteg har reaktionen?

6. Använd följande länk transition state (i Chemtube3d). Ta reda på strukturen för reaktionens *aktiverade komplex* (*transition state*).

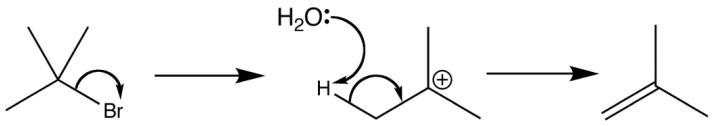
7. Öppna appen Molview: https://molview.org/?cid=6327 och titta på elektronfördelningen för reaktanten.

   2D-bilden i Molview visar skelettformeln för en klormetanmolekyl som kan vara lite svår att tolka. Klicka på symbolen C–H i övre menyraden så syns en tydligare strukturformel.

   Du kan se elektronfördelningen i molekylen genom att klicka på “*Jmol*” och sedan *MEPsurface lucent*. Hur tror du att bromidjonen kommer att reagera?

Del III

8. I bilden nedan visas en reaktion mellan en tertiär alkylhalogenid och vatten.



a) Vad är det för organisk reaktionstyp?

b) Vad heter reaktanten med ett systematiskt namn?

c) Se animation av reaktionen som stöd: https://www.chemtube3d.com/elimination-e1/

d) Beskriv vad som händer med molekylens struktur i första reaktionssteget. (Klicka på Animated Molecular Orbitals-E1 Step 1)

e) Beskriv även vad som sker i steg två med hjälp av animationen i chemtube3d. (Klicka på Animated Molecular Orbitals-E1

Del IV

9. Gå in på https://www.chemtube3d.com/ igen. Välj fliken Organic och välj sedan en ny reaktion. Välj mellan menyalternativen *elimination* eller *nucleophilic substitution*.

   Beskriv den reaktion du valt med hjälp av en eller flera av följande kemiska begrepp; reaktionstyp (nukleofil substitution eller elimination), steriska hinder, elektronfördelning, intermediär och reaktionsmekanism.

Till läraren

Målgrupp: [Gy]

Teori

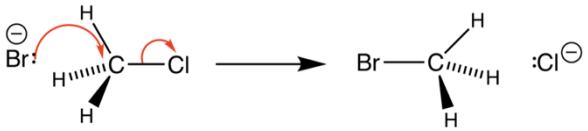
5.

a) Vad heter reaktanten med ett systematiskt namn? *klormetan eller metylklorid*

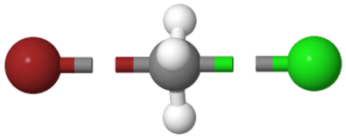
b) Vad heter produkten med ett systematiskt namn? *brommetan eller metylbromid*

c) Vad kallas denna typ av reaktion? *Substitutionsreaktion*

d) Hur många reaktionssteg har reaktionen? *Ett steg. Det bildas ingen intermediär. (Det bildas ett aktiverat komplex).*

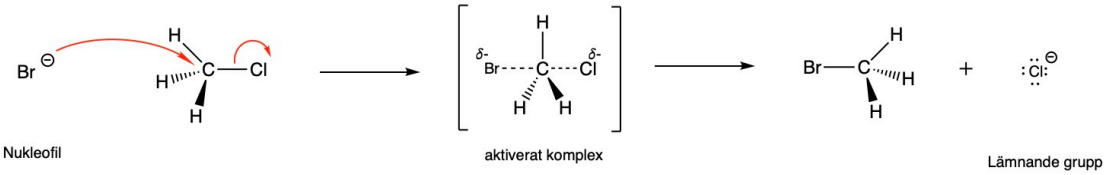


6. I *Chemtube3d* visas ”transition state” som att varken brom- eller kloratomen är helt adderad till kolatomen.



Figur 1: Visualisering i chemtube3D av det aktiverade komplexet.

Ett annat sätt att åskådliggöra det aktiverade komplexet visas i bilden nedan. (Illustrationen är gjord i programmet ChemDraw).



KRC
Kemilärarnas resurscentrum

CC BY NC

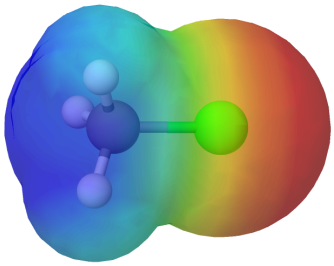
Stockholms universitet

GÖTEBORGS UNIVERSITET

www.su.se/krc

7. Öppna appen Molview: https://molview.org/?cid=6327 och titta på elektronfördelningen för reaktanten och beskriv hur bromidjonen reagerar.

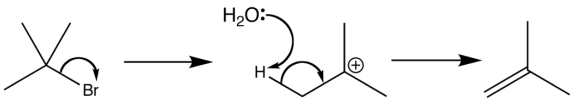
   2D-bilden i Molview visar skelettformeln för en klormetanmolekyl som kan vara lite svår att tolka. Klicka på symbolen C–H i övre menyraden så syns en tydligare strukturformel. I 3D syns en tydlig bild av elektronfördelningen som visar att molekylen är polariserad. Den negativt laddade bromidjonen kommer att attackera den mer elektropositiva delen av klormetanmolekylen, på motsatt sida om kolatomen jämfört med kloratomen. Reaktionen är en S_N2-reaktion.



Figur 2:Elektrondensitetsmodell av klormetan.

Del III

8. Nedan visas en reaktion mellan en tertiär alkylhalogenid och vatten.



   a) Vad är det för typ av reaktion? *Eliminationsreaktion (E_1-reaktion)*

      En eliminationsreaktion av typen E_l beskriver en reaktion där reaktionshastigheten endast beror av koncentrationen av den reagerande organiska föreningen. Den lämnande gruppen (bromidjonen) lämnar i den första delreaktionen, och i det andra reaktionssteget avges en proton till vatten så att en dubbelbindning bildas.

   b) Vad heter reaktanten med ett systematiskt namn? *2-brom-2-metylpropan* (*tertbutylbromid*)

   c) Beskriv vad som händer med molekylens struktur i första reaktionssteget. *Bromatomen är mer elektronegativ och drar till sig båda elektronerna i bindningen till den tertiära kolatomen. Bromidjonen lämnar molekylen (lämnande grupp, LG). Intermediären är en tertiär karbokatjon (den positiva laddningen sitter på en kolatom, den som var bunden till bromatomen).*

d) Beskriv även vad som sker i steg två utifrån animationen.

Ett fritt elektronpar på syreatomen i en vattenmolekyl fångar upp en vätejon. Elektronförflyttning sker till den positiva karbokatjonen. Det bildas en alken med en dubbelbindning (en π-orbital).

e) Gå in på https://www.chemtube3d.com/ igen. Välj fliken Organic och välj sedan en ny reaktion. Välj mellan menyalternativen *elimination* eller *nucleophilic substitution*.

Här får eleven välja en valfri eliminations- eller substitutionsreaktion som eleven ska beskriva.

9. Beskriv vald reaktion med hjälp av en eller flera kemiska begrepp; reaktionstyp (SN, nukleofil substitution eller E, elimination), steriska hinder, elektronfördelning, intermediär och reaktionsmekanism.

Exempel på beskrivning av en eliminationsreaktion av typen E_1.

"En eliminationsreaktion av typen E_l beskriver en reaktion där reaktionshastigheten endast beror av koncentrationen av den reagerande organiska föreningen som innehåller den lämnande gruppen. På grund av steriska hinder bildas först en mellanprodukt (en intermediär) med en tertiär karbokatjon. Den lämnande gruppen (bromidjonen) lämnar i den första delreaktionen, och i det andra reaktionssteget avges en proton (till vatten) så att elektronförflyttning sker till den positivt laddade kolatomen så att en dubbelbindning bildas. Reaktionsprodukten är en alken.

Övrigt

Övningen utvecklades av Maja Jonsson, kemilärare på ProCivitas gymnasium, Uppsala under en fortbildning ledd av Fredrik L Holmelin på KRC hösten 2024.
Övningen har bearbetats av KRC.