

Kuidas joonistada mehhanisme kaarnooltega

- 1) Joonistage arusaadavalt välja (graafilise valemiga) reagentide struktuurid. Kontrollige kas saate aru, millised on reagentid ning solvent antud reaktsioonitingimustel. Näiteks kui reaktsioon toimub aluselises keskkonnas, siis kas mõni ühend esineb anioonina?
- 2) Vaadeldge lähteaineid ning produkte ning hinnake, mis on reaktsiooni käigus toimunud. Millised sidemed on moodustunud ning millised katkenud? Kas midagi on juurde liitunud või ära kadunud? Kas mõni side on molekulis asukohta vahetanud?
- 3) Leidke lähteainetes kõik nukleofiilsustsentrid ning otsustage milline neist on kõige nukleofiilsem. Seejärel leidke elektrofiilsustsentrid ning hinnake nende tugevust.
- 4) Kui nende tsentrite liitumine tundub viivat produktini, siis joonistage välja reagentid (koos laengutega) nii, et nukleofiilsus ja elektrofiilsus tsentri vahele jääb keemilise sideme moodustumiseks sobiv vahemaa ning nukleofiil ründab elektrofiili orbitaalide suhtes õige nurga all.
- 5) Joonistage kaarnool nukleofiilit elektrofiilile. See peab saama alguse täidetud orbitaalilt või negatiivsele laengult (näidake seda täpselt puutudes noole otsaga sidet või elektronpaari/negatiivset laengut) ning lõppema tühjal orbitaalil (näidake selle täpset asukohta noolepeaga).
- 6) Otsustage kas aatomitel, millega reaktsioon toimus, on nüüd liiga palju sidemeid; kui on, siis mõni side peab katkema, et ei tekiks absurdseid struktuure. Valige välja side, mis katkeb. Joonistage kaarnool valitud sideme keskelt ning lõpetage see sobivas kohas.
- 7) Kirjutage välja produkti struktuur, lõhkuge sidemed, millelt kaarnooled alguse said ning joonistage välja need, mis tekkisid. Võtke arvesse laetud aatomite mõju ning kontrollige, et kogulaeng ei ole reaktsiooni käigus muutunud. Kui kaarnooled on joonistatud, siis produkti struktuur on sellega juba kindlaks määratud. Kui struktuur tuleb välja vale, siis kaarnooled on valesti joonistatud ning minge tagasi algusesse ning muutke neid.
- 8) Korrake samme 5-7 kuni saate stabiilse produkti.