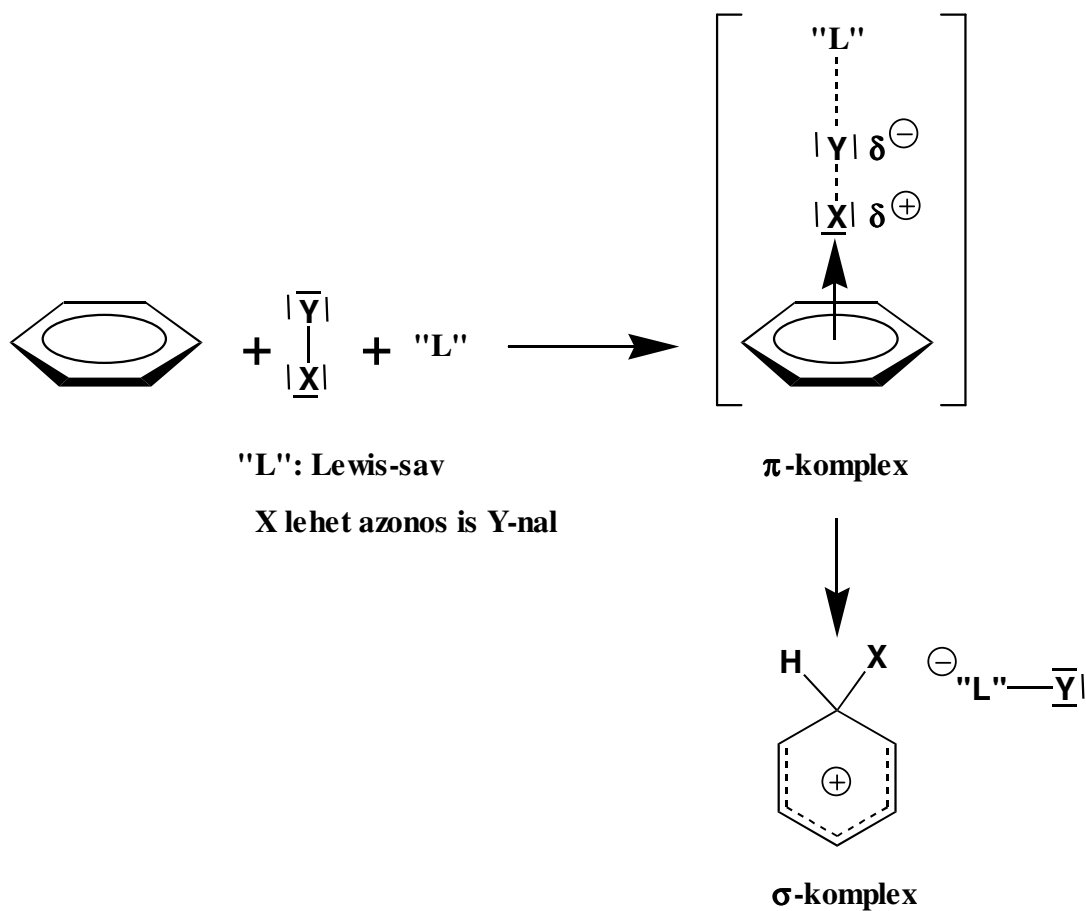
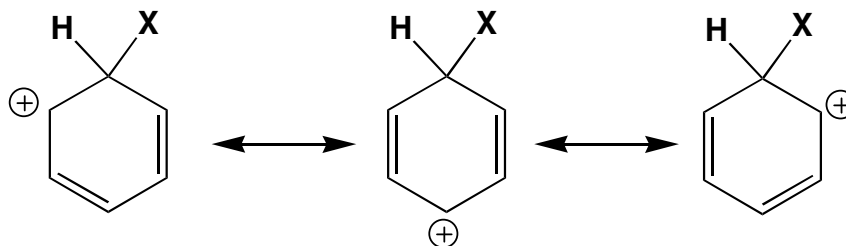


Aromás elektrofil szubsztitúció



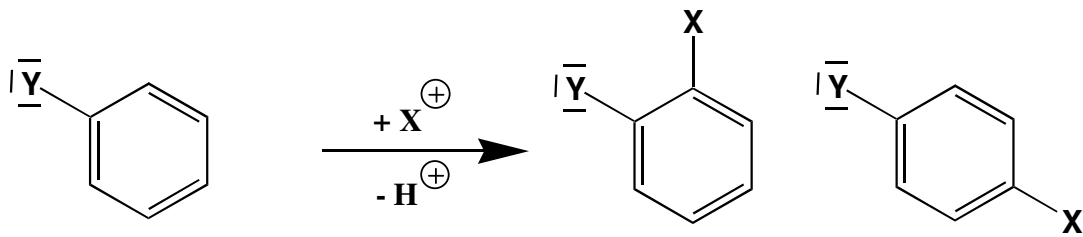
σ -komplex határszerkezetekkel ábrázolva



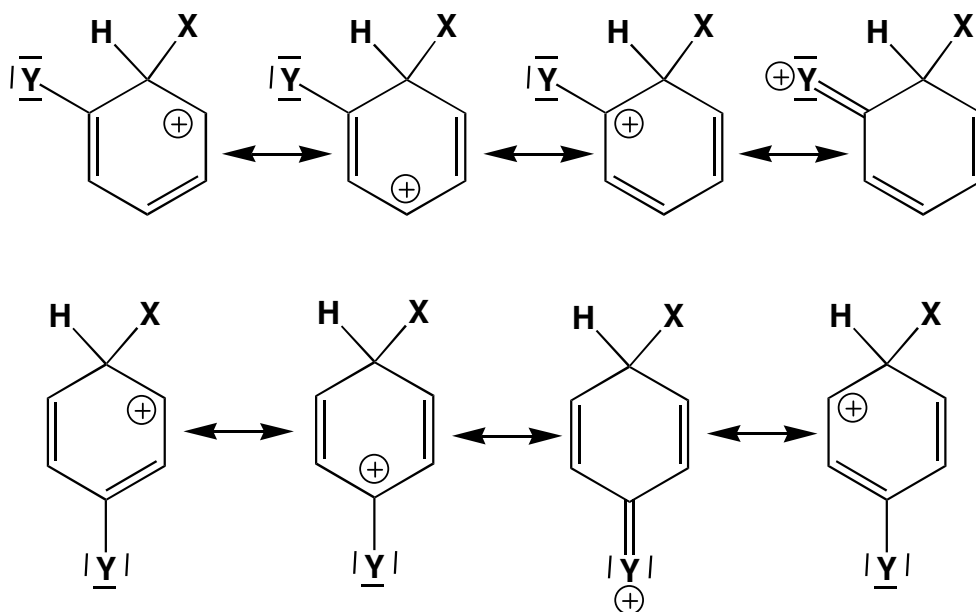
Irányítási szabályok

Ha a reakció kimenetelét döntő mértékben a σ -komplex határozza meg, egy monoszubsztituált származék további elektrofil szubsztitúciójának végeredményét (az első szubsztituens irányítását) a σ -komplexek szerkezetének összehasonlítása alapján tehetjük meg. Magános párral rendelkező elektronküldő csoport (+K-effektus: +konjugációs effektus)

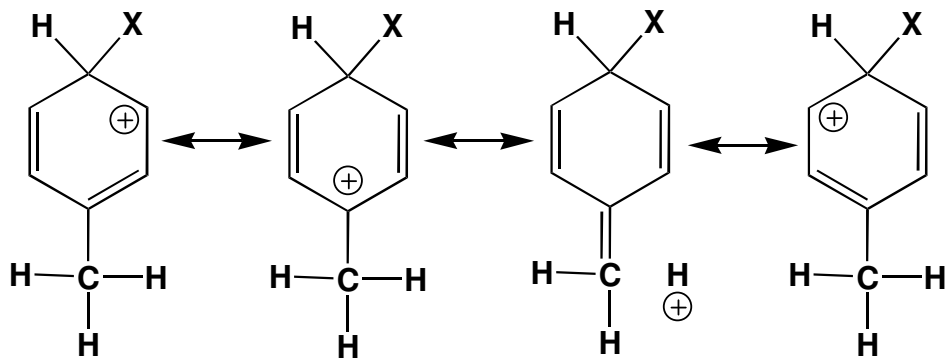
orto és para helyzetben részt tud venni a delokalizációban, így a belépő szubsztituent e két helyzetbe irányítja.



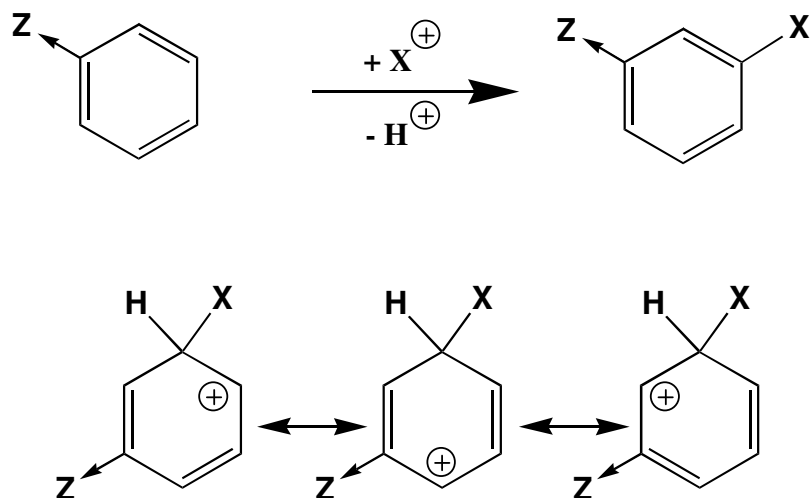
A σ -komplexet 3 határszerkezet helyett 4-gyel ábrázolhatjuk, ami a delokalizáció kiterjedését jelenti.



Az aromás gyűrűhöz kapcsolódó metilcsoport C-H σ -kötése is viselkedhet elektrondonorként, ezt hiperkonjugációnak hívjuk. Ennek megfelelően a metilcsoport is orto-para irányító. Ha a magános elektronszomszéd atomnak nagy az elektronegativitása (-I-effektus), az orto-para irányítás megmarad, de a reaktivitás csökken (pl. Br, Cl).



Elektronszívó csoportok elektrofil szubsztitúciós reakciókban dezaktiválják a benzolszármazékokat és meta-helyzetbe irányítanak. Ebben az esetben jut ugyanis a legkisebb pozitív töltés az elektronszívó csoportot hordozó szénatomra (a határszerkezetes ábrázolásmódban erre egyáltalán nem kerül pozitív töltés).



Aromás nukleofil szubsztitúció

Ha a benzolgyűrűn van egy alkalmas távozó csoport és ehhez képest orto- és para helyzetben elektronszívó, pl. nitrocsoport, megfelelő nukleofilekkel 2 lépéses nukleofil szubsztitúció játszódhat le. Első lépésben a nukleofil addicionálódik a távozó csoportot hordozó szénatomra, kialakul egy intermedier (Meisenheimer-komplex), amiben a negatív töltés delokalizálódik, majd ezt követően lép ki a távozó csoport. Az alábbiakban a Meisenheimer-komplex határszerkezetes ábrázolását tüntettük fel, csak az egyik nitrocsoport szerepét kibontva. Természetesen a másik nitrocsoport is részt vesz a delokalizációban.

