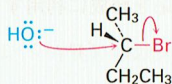
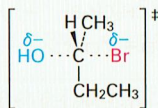


- ① 求核試薬 OH^- は非共有電子対を用いて、離れていくハロゲンから 180° 離れた位置でハロゲン化アルキルを攻撃する。これにより部分的に形成された $\text{C}-\text{OH}$ 結合と部分的に切れた $\text{C}-\text{Br}$ 結合をもった遷移状態となる

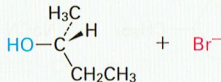


(S)-2-ブロモブタン



遷移状態

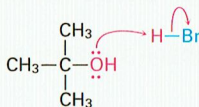
- ② 炭素における立体化学は $\text{C}-\text{OH}$ 結合が完全に形成され、臭化物イオンが始めの $\text{C}-\text{Br}$ 結合の電子対を伴って脱離するときに反転する



(R)-ブタン-2-オール

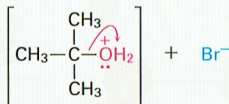
図 7・2 反応機構： $\text{S}_{\text{N}}2$ 反応の機構. 反応は入ってくる求核試薬が脱離するハロゲン化物イオンから 180° 離れた方向から接近して 1 段階で起こり、これにより中心炭素の立体化学が反転する.

① -OH がまず HBr によりプロトン化される



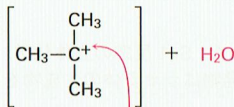
① ↓

② プロトン化されたアルコールの自発的な解離が遅い律速段階[†]で起こり、カルボカチオン中間体と水を与える



② ↓

カルボカチオン



③ ↓

③ カルボカチオン中間体と臭化物イオンが素早く反応して、中性の置換生成物を与える

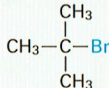


図 7・5 反応機構: *tert*-ブチルアルコールと HBr からハロゲン化アルキルが生成する S_N1 反応の機構. 中性の H₂O が脱離基である. († 訳注: いくつかの段階を経て進む反応において, 全体の反応速度を支配する段階を律速段階という.)