



**әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті
Химия және химиялық технология факультеті**

Бензол ядросындағы бағыттау ережелері. Үйлесімді (келісімді), және үйлесімсіз бағыттау.

**Дәріскер: х.ғ.к., доцент
Дюсебаева Мөлдір Әкімжанқызы**

***o-, m-, p-*Орынбасарлардың бағытталуға әсері**

Бензол молекуласы симметриялы (электрондық тығыздық молекулада біркелкі таралған) ж/е ондағы алты көміртек атомы тең бағалы. Сондықтан әрекеттесуші бөлшек (E^+ н/е Nu) молекуладағы кез келген көміртек атомымен бірдей әрекеттеседі.

Егер бензол сақинасына бір орынбасушы келіп орналасса, онда молекуладағы электрондық тығыздықтың симметриясы бұзылады. Соған сәйкес, әрекеттесуші бөлшек кез келген көміртек атомымен емес, белгілі бір көміртек атомдарымен ғана әрекеттеседі.

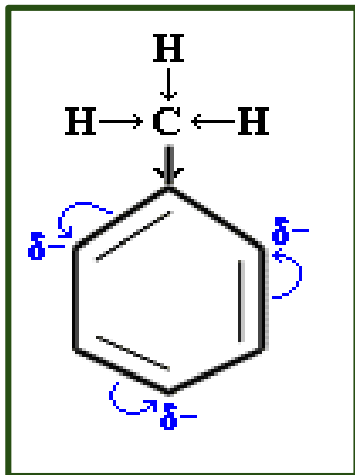
орто-пара-Бағыттаушылар
(бірінші реттік орынбасушылар)
күшті +M н/е +J

мета-Бағыттаушылар
(екінші реттік орынбасушылар)
-M н/е -J

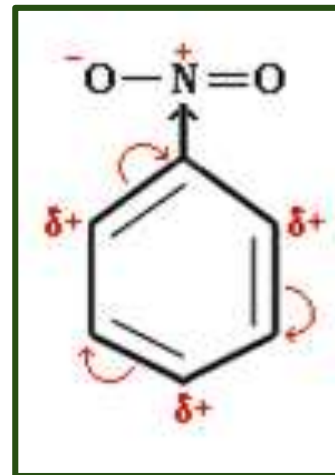
бензол сақинасына өздерінің π -рын беруге бейім **электрондонорлы атомдар** н/е атомдар тобы.

бензол сақинасынан π -ды өздеріне қарай тартуға бейім **электрон-акцепторлы атомдар тобы**

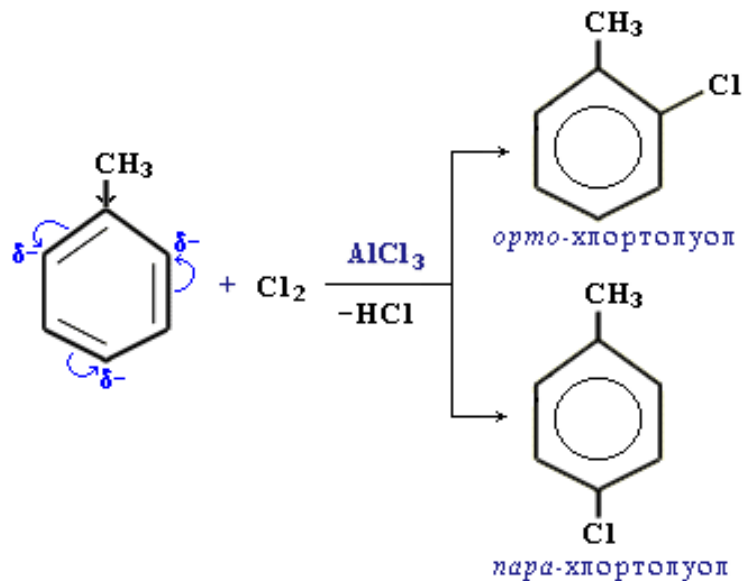
- OH
- NH₂
- NH₂
- NHR
- CH₃
- SH
- Hal



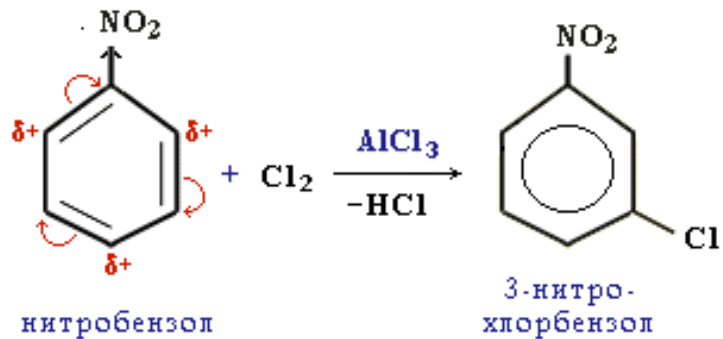
- COH
- COOH
- COOR
- SO₃H
- NO₂
- CN
- CHal₃



орто-пара-Бағыттаушылар
(бірінші реттік орынбасушылар)



мета-Бағыттаушылар
(екінші реттік орынбасушылар)



орто-пара-Бағыттаушылар
(бірінші реттік орынбасушылар)

мета-Бағыттаушылар
(екінші реттік орынбасушылар)

бензол сақинасындағы \bar{e} -дар-дың
тығыздығын \uparrow

бензолмен салыстырғанда S_E
реак-дағы белсенділігін \uparrow

Hal электроноакцепторлы қасиетке ие:

-F (+M<-I), -Cl (+M<-I), -Br (+M<-I).

Олар $S_E \downarrow$, өйткені күшті -I-эффект
көрсетеді, сақинада \bar{e} -дық тығыздығын \downarrow .

бензол сақинасындағы \bar{e} -дар-дың
тығыздығын \downarrow

бензолмен салыстырғанда S_E
реак-дағы белсенділігін \downarrow

толуол $C_6H_5CH_3 >$ бензол $C_6H_6 >$ нитробензол $C_6H_5NO_2$

Екі орынбасушылар бар бензолдардағы орынбасушылардың SE реакциялардың бағытына әсері

Келісімді бағытталу - екі орынбасушы үшінші орынбасушыны (E^+) сақинадағы бір орынға бағыттайды.

Келісімсіз бағытталу - екі орынбасушы үшінші орынбасушыны (E^+) сақинадағы әртүрлі орынға бағыттайды, олар өзара бәсекеге түседі, нәтижесінде өнімдер қоспасы түзіледі.

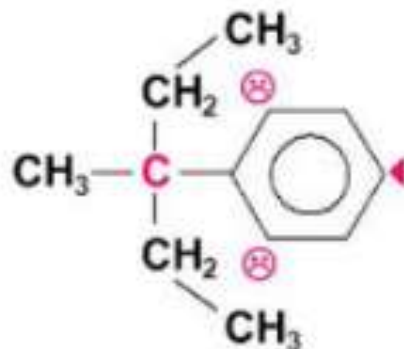
Келісімді бағытталу



Келісімсіз бағытталу



Бағытталудың стерикалық факторлар



Екі орынбасқан бензолдарда SE бағыттау ережелері

1. Бірінші реттік орынбасушылар екінші реттік орынбасушыларға қарағанда күшті бағыттаушылар болады, яғни SE реакцияның бағытын анықтайды.
2. Егер екі ЭД немесе екі ЭА орынбасушылар болса, онда SE реакция бағытын күшті ЭД-орынбасушы ж/е әлсіз ЭА-орынбасушы анықтайды.

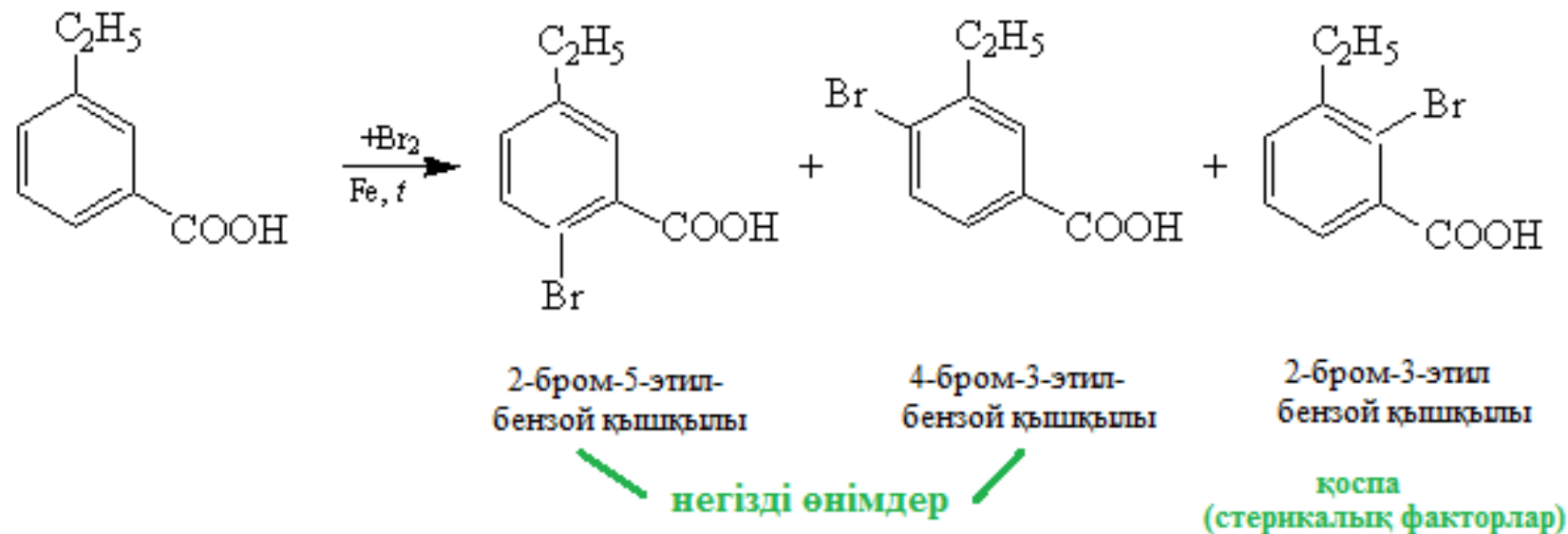
Голлеман қатары: $-\text{OH} > -\text{NH}_2 > -\text{CH}_3 > -\text{Cl} > -\text{I} > -\text{Br}$
 $-\text{COOH} > -\text{SO}_3\text{H} > -\text{NO}_2$

3. Мета-орында тұрған орынбасушылардың арасына кіретін топтың орналасуы стерикалық факторлар есебінен екіталай болады.

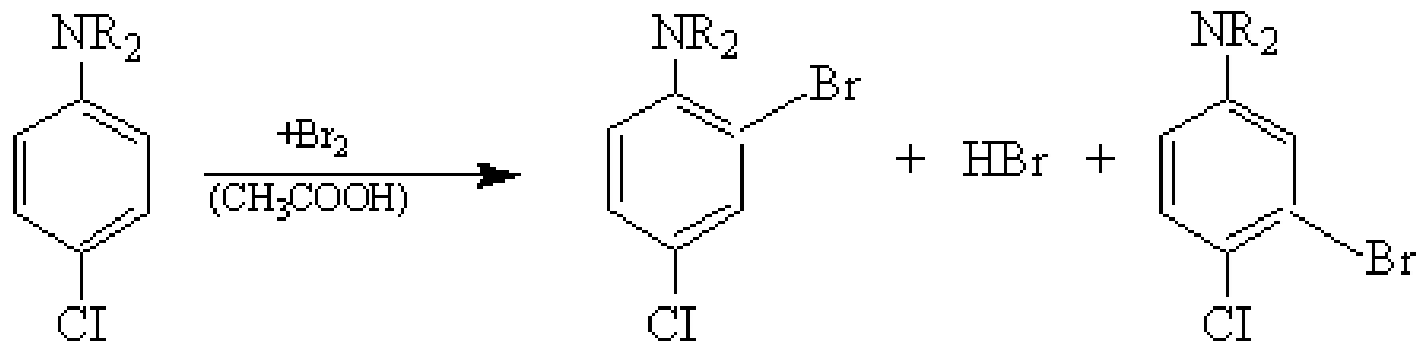
Заместители	Тип эффекта	Влияние на реакционную способность	Преобладающее ориентирующее действие
Заместители I рода: электронодонорные, активирующие группы			
-NH ₂ , -NHR, -NR ₂ , -OH	+M >> -I	+++	<i>орто- и пара-</i>
-O ⁻	+M, +I	+++	
-NHCOCH ₃ (-NHCOR), -OCH ₃ (-OR)	+M > -I	++	
-CH ₃ и другие алкильные группы	+I	+	
-C ₆ H ₅ , -CH=CH ₂	+M > -I	+	
-F, -Cl, -Br, -I	-I > +M	-	
Заместители II рода: электроноакцепторные, дезактивирующие группы			
-C≡N, -CHO, -COR, -COOH, -COOR, -SO ₃ H	-I, -M	--	<i>мета-</i>
-NR ₃ ⁺ , -CF ₃ , -CCl ₃	-I	---	
-NO ₂ , -N ₂ ⁺	-I, -M	---	

Активируют сильно (+ + +), умеренно (+ +), слабо (+); дезактивируют сильно (---), умеренно (--), слабо (-)

1-ші ережеге мысал:



2-ші ережеге мысал:



4-хлор-*N,N*-диалкиланилин

2-бром-4-хлор-*N,N*-диалкиланилин

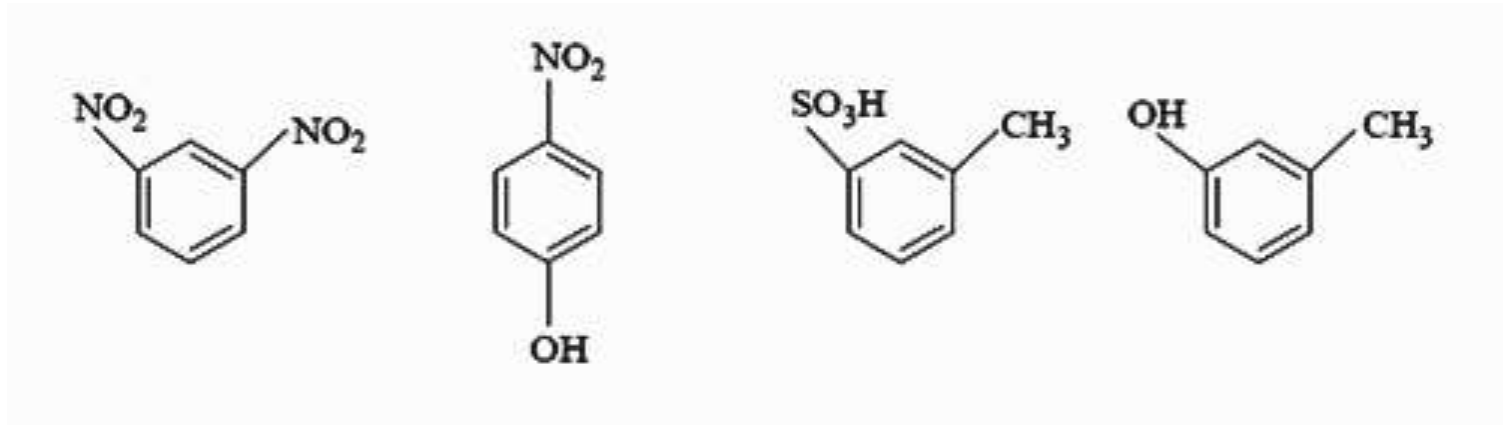
негізгі өнім

3-бром-4-хлор-*N,N*-диалкиланилин

қоспа (примесь)

Кері байланыс

Келесі орынбасқан бензолдар үшін орынбасушылардың келісілген және келісілмеген бағыты бар қосылыстарды анықтаңыз:



Пайдаланган әдебиет немесе интернет-ресурстар:

1. Травень, В.Ф. Органическая химия: в 2 т.: [учеб. для студентов вузов, обучаю-щихся по направл. "Хим. технология и биотехнология"] М.: Академкнига, 2005.- (Учеб. для вузов).
2. Нейланд, О.Я. Органическая химия: [Учеб. для хим. спец. вузов] - М.: Высш. шк., 1990.- 750, [1] с.
3. <http://cnit.ssau.ru/organics/chem5/link31.htm>
4. https://mipt.ru/education/chair/chemistry/upload/f7b/f_5i2a7a-arph07xnq32.pdf