

А.М.Бутлеровтың химиялық құрылыс теориясы (1861ж.) бойынша:

• Органикалық қосылыстар молекуласындағы атомдар бір-бірімен белгілі бір тәртіппен, валенттілігіне тәуелді орналасқан. Атомдардың белгілі бір тәртіппен орналасуының бұзылуы, жаңа заттың түзілуіне алып келеді. Мысалы, C_2H_6O формуласына екі әртүрлі қосылыс сәйкес келеді: диэтилэфирі (CH_3-O-CH_3) және этил спирті (C_2H_5OH).

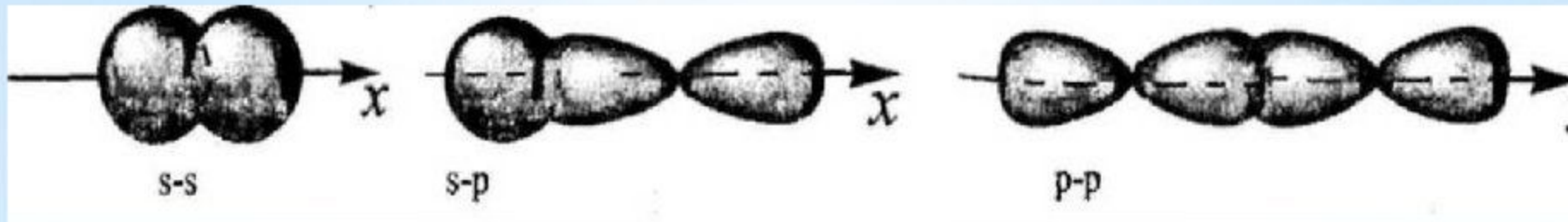
• Заттардың қасиеттері молекула құрылысына, яғни атомдардың қосылу ретіне және байланыс сипатына тәуелді.

Органикалық молекулалардың құрылысы - оның құрамындағы атомдардың химиялық байланыстардың көмегімен белгілі бір ретпен байланысып орналасуы.

Органикалық қосылыстарға коваленттік δ - және π -байланыстар тән.

Коваленттік байланыс - электрондар жұптасуы арқылы түзілетін байланыс.

δ -Байланыс- атом орбитальдарының тура ось бойында қабысу арқылы түзілген байланыс.



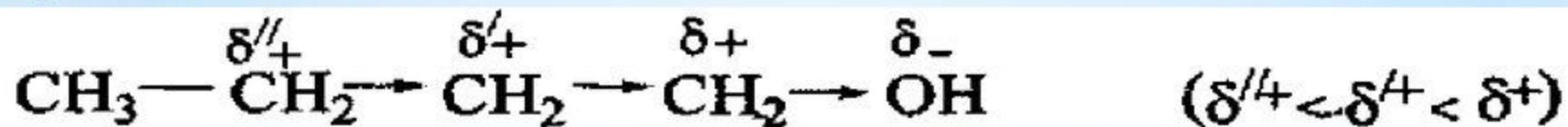
π -Байланыс- гидридтелмеген p- орбитальдардың жазықтықтың бетінде және астында бүйірлей қабысу арқылы түзілген байланыс.



Ығысудың электрондық теориясы. Бұл теорияның екі мәні электрондық әсері жайлы мазмұндалған ілімде болатын: индуктивті және мезомерлі.

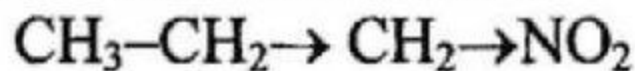
Электртерістігі жоғары атомның коваленті байланыстың сигма электрон жұбын өзіне қарай ығыстыру қабілеті индуктивті эффект деп аталады. Индуктивті эффект оң және теріс болады. егер атом электрон жұбын өзінен кері ығыстыратын болса ол оң индуктивті эффект деп аталады. +I деп белгіленеді. мұның нәтижесінде атом өзі ішінара оң зарядқа ал көрші атом ішінара теріс зарядқа ие болады. керсінеше атом немесе радикал сигма электрон жұбын өзіне тартып, көрші атомның электрон тығыздығын томендетсе ол теріс индуктивті эффект деп аталады және -I эффект деп белгіленеді. Мұның нәтижесінде атом ішінара теріс зарядқа ал көрші атом ішінара оң зарядқа ие болады. Оның біріншісін – индуктивті әсер арқылы таңбалайды және ол оң (+I) не теріс (-I) таңбалы болады. Индуктивті әсер (I-әсер)- орынбасарлардың электрондық әсерінің δ -байланыс бойында таралуы.

Индуктивті эффекттің әсері π -байланыс бойында біртіндеп сөнеді.

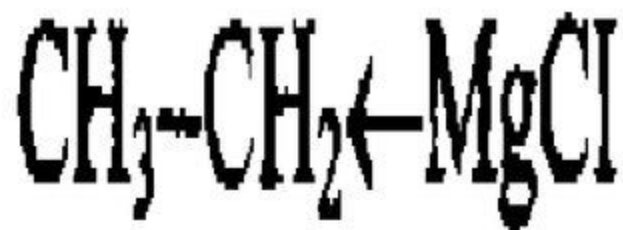


Реакция орталығының электрон бұлтын кемітетін орынбасарлар *электроноакцепторлы* (-I- эффект), ал реакция орталығының электрон бұлтын арттыратын орынбасарлар *электронодонорлы* (+I- эффект) деп аталады

-I - орынбасарлар



+I - орынбасарлар

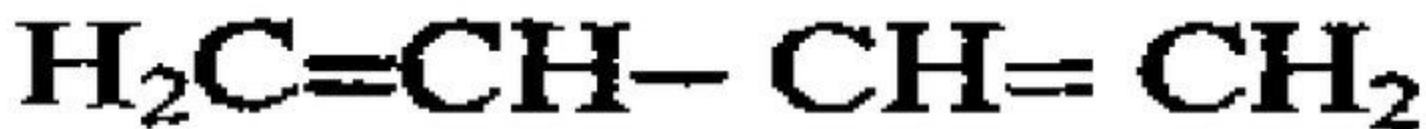


Мезомерлі эффект немесе қабысу - орынбасарлардың электрондық әсерінің π -байланыс бойында таралуы.

π, π - қабысқан жүйе



бензол



Бутадиен -1,3

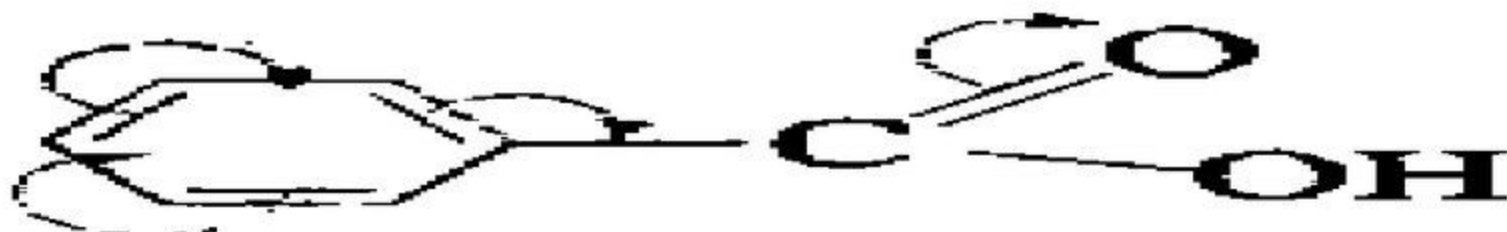
Мезомерлі эффект М әрішімен белгіленеді. Индуктивті эффект сияқты мезомерлі эффект оң және теріс болуы мүмкін.

Қабысқан жүйенің электрон бұлтының тығыздығын кемітетін орынбасарлар -М- эффект көрсетіп, электроноакцепторлар болады, ал қабысқан жүйенің электрон бұлтының тығыздығын арттыратын орынбасарлар +М -эффект көрсетіп, электронодонорлар болады.

-М- эффект



бензонитрил

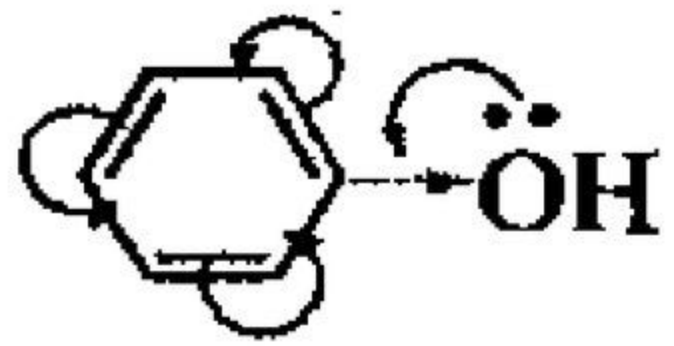


бензой қышқылы

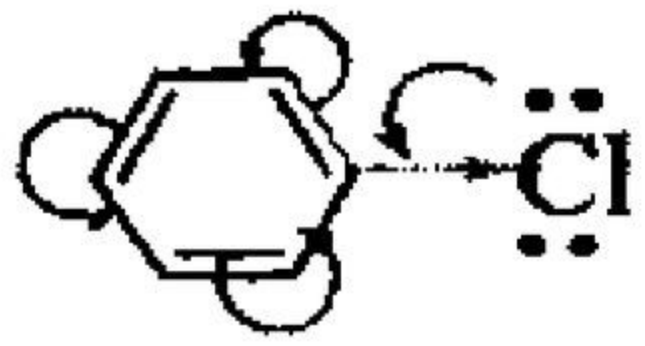
+M - эффект



этилвинилэфирі



фенол



хлорбензол

АТОМДАРДЫҢ ӨЗАРА ӘСЕРІ.

Қосылыстардың әрекеттесу қабілеттері молекуладағы электрон бұлтының бөліну сипатына байланысты болады.

Электрон тығыздығының бірдей бөлінбеуі орынбасушылардың индуктивтік және мезомерлік әсерлерінің салдары болып табылады.

Орынбасушылардың индуктивтік әсерінің бағыты сутегі атомының әсерімен ($I = 0$) салыстыру арқылы анықталады.



- I

I = 0

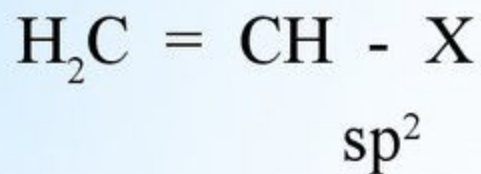
+ I

Егер орынбасушы - байланыстардың электрондық тығыздығын, сутегімен салыстырғанда, өзіне қарай күштірек ығыстыратын болса, теріс индуктивтік әсер ($-I$) көрсетеді. Мұндай орынбасушыларға галогендер, OH, COOH, CHO, т.б. жатады.

Егер орынбасушы тізбектегі электрон тығыздығын, сутегімен салыстырғанда, жоғарылататын болса, оң индуктивтік әсер ($+I$) көрсетеді. Мұндай әсерді алкилдік топтар жасайды.

Егер индуктивтік әсер электртерістілігі әртүрлі атомдары бар молекулаларда байқалатын болса, ал мезомерлік әсер үшін молекулада қабысқан бөлік болуы керек. Орынбасушылардың әсері - байланыстардың жүйесімен берілетін болғандықтан, мезомерлік әсер қабысу әсері деп те аталады. Орынбасушының өзі қабысқан жүйені түзуге қатысады.

Қабысқан жүйе дара байланыстармен бөлінген еселенген байланысты молекулаларға байланысы бар немесе p электронды жұбы бар орынбасушыларды енгізу арқылы алынады.



Еселенген байланыстың орбитальдары мен орынбасушының орбитальдары бүркессе, қабысу, ал p - орбитальдары бүркессе, p - қабысу жүреді. Пайда болған ортақ электрон бұлты орынбасушының әсерінен бірдей бөлінбейді.

Орынбасушылардың электрондық әсерлерінің қабысқан жүйенің бойымен берілуі мезомерлік әсер (M) деп аталады.

Орынбасушылардың электрондық әсерлері.

Орынбасушылар
жүйелердегі жалпы

Электрондық әсерлер

Қабысқан

I

M

электрондық әсер

Алкил

+ I

-

ЭД

- NH₂ (NH N -)

- I

+ M

+ M >> - I (ЭД)

- OH

- I

+ M

+ M > - I (ЭД)

- OR

- I

+ M

+ M > - I (ЭД)

NaI

- I

+ M

+ M < - I (ЭА)

- NO₂

- I

- M

ЭА

- COOH

- I

- M

ЭА

- SO₃H

- I

- M

ЭА

C = O

- I

- M

ЭА

Қорытынды

Органикалық зат молекуласындағы атомдар ретсіз орналаспайды, олар өздерінің валенттіктеріне сай белгілі бір ретпен байланысады. А. М. Бутлеров молекуладағы атомдардың байланысу ретін заттың химиялық құрылысы деп атады.

Заттың қасиеті оның молекуласының құрамына, қандай атомдардың қанша мөлшерде кіретіндігіне тәуелді болуымен қатар молекуладағы атомдардың өзара байланысу ретіне де (яғни, химиялық құрылысына) тәуелді болады. Молекуладағы атомдардың байланысу реті көрсетілген химиялық формула құрылымдың формула немесе құрылыс формуласы деп аталады. Зат молекуласының құрылысын осы заттың өзіне ғана тән жалғыз құрылымдың формуласы арқылы өрнектеуге болады.

Молекула құрамындағы атомдар мен атом топтары бір-бірінің химиялық қасиетіне әсер етеді. Бір-бірімен тікелей байланысқан атомдар мен атом топтарының өзара әсерлері күштірек болады.

Заттың қасиеті арқылы оның молекуласының құрылысын анықтауға және керісінше оның молекуласының химиялық құрылысы бойынша заттың қасиетін болжауға болады.