

Оңтүстік Қазақстан Мемлекеттік Фармацевтикалық Академиясы

Фармакагнозия және химия кафедрасы

Органикалық қосылыстардың молекуласындағы атомдардың өзара әсері. Индуктивті эффект, қосарлану эффектісі туралы түсінік. Электрондонорлы және электронакцепторлы орынбасарлар.



Орындағандар:
Тобы: 202 «Б» ФК
Қабылдаған:

Жоспары:

- **I. Кіріспе**
- **II. Негізгі бөлім**
 - **1. Органикалық молекулалардағы атомдардың өзара әсері.**
 - **2. Индуктивті эффект**
 - **3. Мезомерлі эффект**
- **III. Қорытынды**
- **IV. Пайдаланылған әдебиеттер**

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

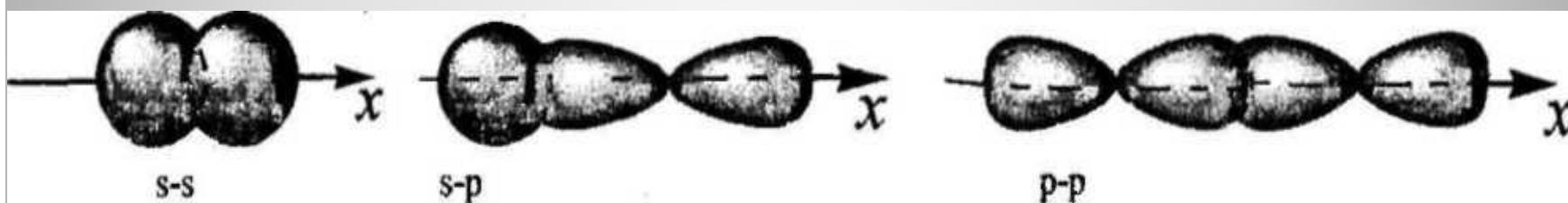
- Органикалық қосылыстар молекуласындағы атомдар бір-бірімен белгілі бір тәртіппен, валенттілігіне тәуелді орналасқан. Атомдардың белгілі бір тәртіппен орналасуының бұзылуы, жаңа заттың түзілуіне алып келеді. Мысалы, C_2H_6O формуласына екі эртүрлі қосылыс сәйкес келеді: диэтилэфирі (CH_3-O-CH_3) және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



Ковалентті **байланысты** сипаттайтын көрсеткіштер:

Байланыс энергиясы- өзара байланысқан екі атомның түзілуіне немесе үзілуіне қажет энергия. Атомдар арасында байланыс түзілгенде неғұрлым энергия көп бөлінсе, соғырлым байланыс мықты болады

Байланыс ұзындығы - байланысқан атомдар орталықтарының арасындағы қашықтық.

Валенттік бұрышы - ортақ атомнан тұратын екі байланыстың арасындағы бұрыш. Органикалық қосылыстардағы Х-С-Ү ядро аралық байланыстардың бұрышы көміртек атомының гибридтелу түріне сәйкес, яғни sp^3 -, sp^2 - және sp -гибридтік күйге сәйкес 109,5; 120 және 180 тең болады.

Байланыс полюстілігі - электрон тығыздығының әркелкі таралуы.

Электртерістілік - молекуладағы атомның химиялық байланысқа қатысатын валенттік электрондарды өзіне тарту қабілеті (күші).



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

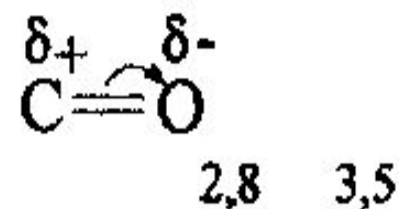
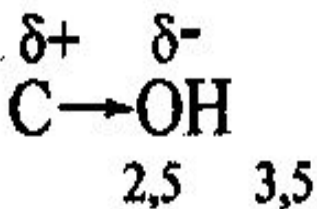
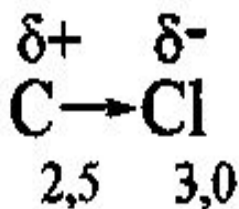
Оның біріншісін – индуктивті әсер арқылы таңбалайды және ол оң (+J) не теріс (-J) таңбалы болады. Индуктивті әсер (I-әсер)- орынбасарлардың электрондық әсерінің δ -байланыс бойында таралуы.

Индуктивті әсер

Кейбір элементтердің Полинг(1932) шкаласы бойынша

F	O	N	Cl	Br	I	Csp ³	Csp ²	Csp	S	H	P	Si	Mg	Li	Na
4,0	3,5	3,0	3,0	2,8	2,6	2,5	2,8	3,1	2,5	2,1	2,1	1,8	1,2	1,0	0,9

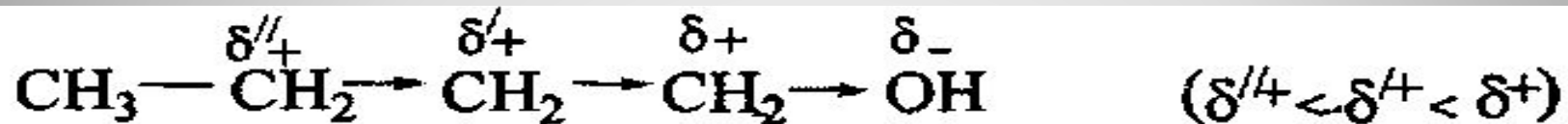
Электртерістілігі әртүрлі атомдар арасындағы пайда болған байланыс полюсті болады.



бұлтының артқанын көрсетеді.

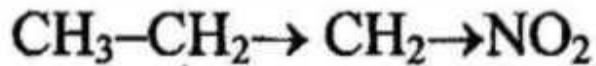
Индуктивті эффект (I-эффект)- орынбасарлардың электрондық әсерінің ст-байланыс Молекулада полюсті а-байланыстың болуы, көршілес екі-үш ст-байланыстардың полюстігін өзгертеді де, көршілес атомдарда жартылай зарядтар (δ^+ , δ^-) пайда болады. δ^+ - Электрон бұлтының жетіспеушілігін, ал δ^- электрон

Индуктивті эффекттің әсері 8-байланыс бойында біртіндеп сөнеді.

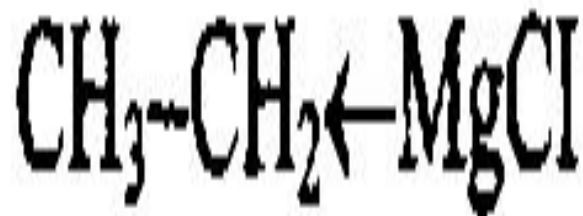


Реакция орталығының электрон бұлтын кемітетін орынбасарлар *электроноакцепторлы* (-I- эффект), ал реакция орталығының электрон бұлтын арттыратын орынбасарлар *электронодонорлы* (+I- эффект) деп аталады (12.5-кесте

-I - орынбасарлар



+I - орынбасарлар



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

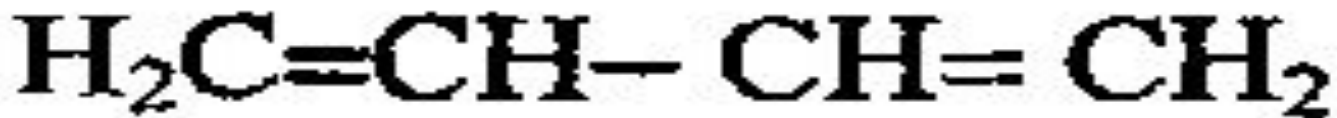
Қабысқан жүйе - гибридтелмеген /7-орбитальдардың қосарлануы нәтижесінде түзілген біріңғай электрон булты.

Біріңғай электрон булты кезектесіп орналасқан екі немесе одан да көп *n* байланыс (*л,л*- қабысу) пен көршілес атомның *p*-орбиталі мен *я*-байланыс (*р,л*- қабысу) арасында түзіледі.

π, π - қабысқан жүйе



бензол



Бутадиен -1,3

Мезомерлі эффект М әріпімен 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

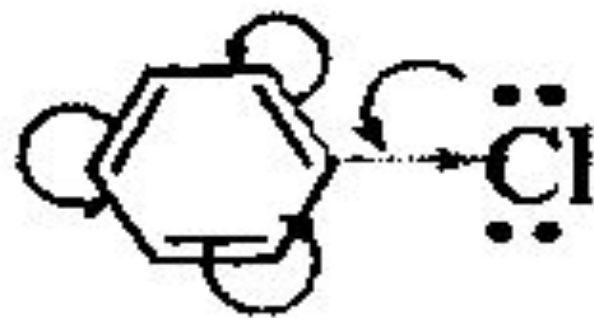
+M - эффект



этилвинилэфирі



фенол



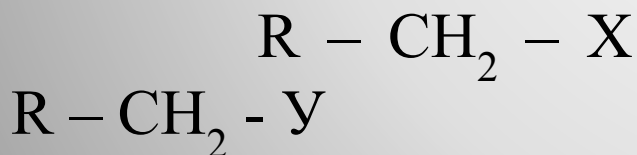
хлорбензол

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 электрондық әсерлерінің байланыстардың бойымен берілуі индуктивтік әсер (I) деп аталады. 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)

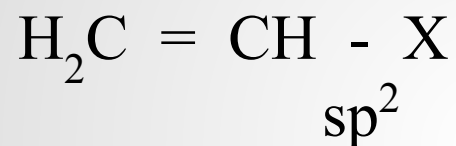
көрсетеді. Мұндай орынбасушыларға галогендер, ОН, СООН, СНО, т.б. жатады.

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. Мысалы, бензолдың туындылары.

- X
sp²

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



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

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



- Қабысқан жүйеде электрон тығыздығын жоғарылататын орынбасушылар оң мезомерлік әсер (+M) көрсетеді. Оларға бөлінбеген электрон жұптары болатын немесе толық теріс зарядталған атомды орынбасушылар жатады. Мысалы галогендер, OH , NH₂ , т.б.
- Қабысқан жүйеден электрон тығыздығын өзіне қарай ығыстыратын орынбасушылар теріс мезомерлік әсер (-M) көрсетеді. Оларға қанықпаған топшалар және оң зарядталған атомдар жатады. Мысалы CHO , COOH , NO₂ , т.б.



Орынбасушылардың электрон тығыздығын ығыстыратын жалпы әсерін бағалағанда, индуктивтік және мезомерлік әсерлердің жалпы ықпалын есепке алу керек. Барлық орынбасушылар, олардың молекуладағы электрон тығыздығын жоғарылату немесе төмендету қабилеттеріне байланысты электрондыдонор (ЭД) және электрондыакцептор (ЭА) деп қарастырылады.

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 депатады.

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.

Пайдаланылған әдебиеттер:

Негізгі:

1. Патсаев Ә.Қ., Жайлауов С.Ж. «Органикалық химия негіздері». Шымкент, 2005, 1-кітап. – 359 б. 2005, 11-кітап. -441б., 2005, 111-кітап. 232б.

2. Патсаев Ә.Қ., Сейтімбетов Т.С, Шитыбаев С.А, Дәуренбеков Қ.Н. «Биоорганикалық химия». Шымкент, 2005,-443б.

Қосымша:

- 1.Қуатбеков Ә.У., Патсаев Ә.К., Бақтыбаев У.Б. «Биоорганикалық химия практикумы», Шымкент, 2006,-582б.
- 2.Патсаев Ә.Қ., Дәуренбеков Қ.Н. «Биоорганикалық химияның тәжірибелік-зертханалық сабақтарына қолданба» Шымкент, 2005-318 б

**Назарларыңызға
Рахмет**