ბენზოლის მოლეკულის თვისებების თვალსაჩინოდ გამომსახველი ელექტრონული აღნაგობის ახალი ფორმულა

გივი ხიდეშელი
ქიმიურ მეცნიერებათა კანდიდატი

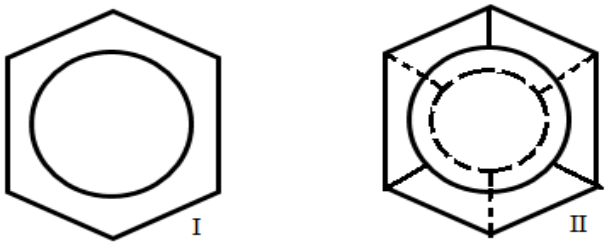
რეზიუმე

ნაშრომში აღნიშნულია, რომ ბენზოლის პირველ ფორმულაზეა აგებული დღევანდელი ბენზოლის ქიმია, ხოლო ბენზოლის მეორე ფორმულა მოწოდებულია ჩვენს მიერ და პირველი ფორმულის ალტერნატივაა. შედარებულია პირველი და მეორე ფორმულების შესაბამისი მოლეკულების საშუალებით ბენზოლის ქიმიური თვისებების გამოსახვა, მათი ელექტრონული აღნაგობიდან გამომდინარე. დადგენილია, რომ მეორე ფორმულა პირველ ფორმულას ბენზოლის ქიმიური თვისებების გამოსახვაში ჯობნის ოთხ პუნქტში: 1. ბენზოლის მონოწარმოებულებში ჩანაცვლების ორიენტაციის წესს მეორე ფორმულა თვალსაჩინოდ გამოსახავს, ხოლო პირველი ფორმულა ვერ გამოსახავს; 2. ბენზოლის ჰიდრირების პირველი საფეხურის ახსნა მეორე ფორმულით უფრო დამაჯერებელია, ვიდრე პირველი ფორმულით; 3. ბენზოლის მონოწარმოებულების ჰიდრირების პირველ საფეხურზე ელექტრონის მიერთების მიმართულების, ანუ მიღებული დიჰიდროპროდუქტის სტრუქტურის ახსნა მეორე ფორმულით ნათელია, ხოლო პირველი ფორმულით არ არის ნათელი; 4. ბენზოლისა და ქრომის შემცველი სენდვიჩისა და ნახევარსენდვიჩის ტიპის ნაერთების სტრუქტურის ახსნა მეორე ფორმულით უფრო დამაჯერებელია, ვიდრე პირველი ფორმულით.

საკვანძო სიტყვები: ბენზოლის მოლეკულა. ელექტრონული აღნაგობის ფორმულა. ბენზოლის თვისებები.

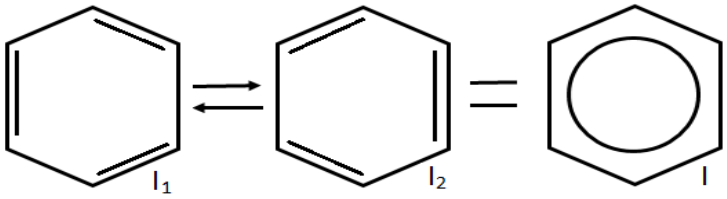
1. შესავალი

ბენზოლის მოლეკულურ ფორმულას (C_6H_6) შეესაბამებიან მრავალი ციკლური და ღიაჯაჭვიანი აღნაგობის იზომერული და ელექტრონული აღნაგობის „რეზონანსური“ ფორმულები, მაგრამ ბენზოლის თვისებებს ყველაზე მეტად გამოხატავს I და II ელექტრონული აღნაგობის ფორმულები (ნახ.1).



ნახ.1

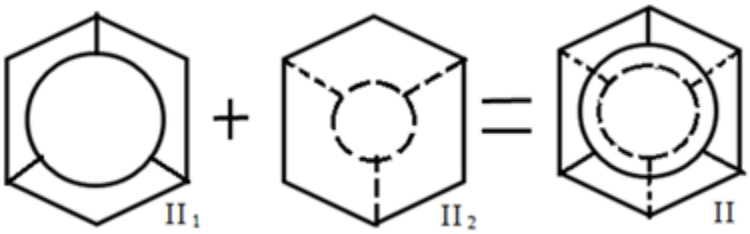
I ფორმულა საყოველთაოდ ცნობილია. მასზეა აგებული დღევანდელი ბენზოლის ქიმია. იგი წარმოადგენს კეკულეს მიერ 1865 წელს მოცემული ბენზოლის სტრუქტურული ფორმულების I_1 და I_2 „რეზონანსულ“ ჰიბრიდს:



ნახ.2

II ფორმულა მოწოდებულია ჩვენს მიერ და I ფორმულის ალტერნატივაა [1]. მის შესახებ ინფორმაცია გამოქვეყნდა 2001 წლის 16 მარტს გაზეთ ახალ შვიდ დღეში. შევადაროდ ერთმანეთს ეს ფორმულები: 1)ბენზოლის ორივე ფორმულაში (I და II) ნახშირბადის ექვსივე ატომი ექვივალენტურია და წყალბადის ექვსივე ატომი ტოლფასია; 2) ბენზოლი იძლევა მხოლოდ ერთ მონოწარმოებულ პროდუქტს (C_6H_5 Cl და სხვა), რასაც ორივე ფორმულა აკმაყოფილებს; 3) ბენზოლი იძლევა სამ (ორთო, მეტა, პარა) დიჩანაცვლებულ იზომერულ პროდუქტს და სამ ტრიჩანაცვლებულ იზომერულ ნაწარმს, რასაც ორივე ფორმულა აკმაყოფილებს; 4) ბენზოლის I და II ფორმულების შესაბამის მოლეკულებს აქვთ ბრტყელი, ციკლული აღნაგობა და შეიცავენ დელოკალიზებული ელექტრონების სისტემებს, ელექტრონების რიცხვით 4n + 2 (ჰიუკელის წესი), რითაც ისინი აკმაყოფილებენ არომატული ნაერთის მოლეკულის აღნაგობას [1].

I ფორმულის აღნაგობა ახსნილია SP^2 ჰიბრიდიზაციით. II ფორმულის აღნაგობა შეიძლება აღიწეროს ნახშირბადის ატომის ირგვლივ ელექტრონების განლაგებით დაახლოებით ტეტრაედრულის მსგავსად. მათ მიერ ექვსწევრიანი ციკლის წარმოქმნის დროს ბენზოლის მოლეკულის სიბრტყის ორივე მხარეს მიიღება სამი არალოკალიზებული ელექტრონისაგან შემდგარი ორი სისტემა. ისინი სიმეტრიულად არიან განლაგებული მოლეკულის სიბრტყის მიმართ (II_1 და II_2)და უზრუნველყოფენ ბენზოლის მდგრადობას. II_1 და II_2 ფორმულებში არსებული სამი არალოკალიზებული ელექტრონის სისტემის ერთ მოლეკულაში გამოსახვით ვღებულობთ II ფორმულას:



ნახ.3

I და II ფორმულების შედარებიდან ჩანს, რომ მათი მოლეკულების სტრუქტურებში ატომების განლაგების გეომეტრია ერთნაირია, ხოლო ელექტრონული აღნაგობა განსხვავებულია. I ფორმულაში 6 არალოკალიზებული ელექტრონის სისტემა შედგება ბირთვში შემავალი ნახშირბადების ექვსივე ატომის თითო ელექტრონისაგან. II ფორმულაში მოლეკულის სიბრტყის ორივე მხარეს არსებული სამი არალოკალიზებული ელექტრონისგან შემდგარი სისტემები შეიცავენ ნახშირბადის სამი ატომის თითო ელექტრონს - მოლეკულის სიბრტყის ერთ მხარეს კენტი (1, 3, 5), ხოლო მეორე მხარეს ლუწი (2, 4, 6) ნახშირბადის ატომების თითო ელექტრონს. ეს განსხვავება I და II ფორმულების შესაბამისი მოლეკულების ენერგოშემცვლელობას არ ცვლის; ასევე ერთნაირია მათში არსებული

არალოკალიზებული ელექტრონების სისტემების ენერგიები, რის გამოც ნახშირბად ატომებს შორის მიზიდვა თანაბარია; ამიტომ მათ შორის ბმა იწერება ასე C ⋯ C, რომელსაც ერთნახევრიანი ბმა ეწოდება. მათი რიცხვი მოლეკულაში არის 6 .

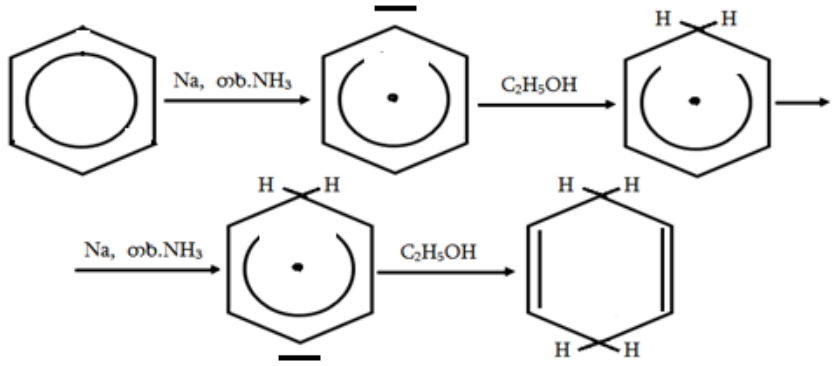
I და II ფორმულების ელექტრონული აღნაგობის აღწერიდან ჩანს , რომ მათში არ არიან მკვეთრად გამოხატული ერთმაგი, ორმაგი და სამმაგი ბმები; მაგრამ ბენზოლი უჯერი ნაერთია და მისთვის დამახასიათებელია ჩანაცვლების და მიერთების რეაქციები. ამასთან, ჩანაცვლების რეაქციები უფრო ადვილად მიმდინარეობენ, ვიდრე მიერთების რეაქციები ღიაჯაჭვიანი უჯერი ნაერთებისაგან განსხვავებით.

ბენზოლში ჩანაცვლების რეაქციებით მიიღება მისი მონოწარმოებულები. ჩანაცვლებული ატომი ან ატომთა ჯგუფი, ელექტრონისადმი დამოკიდებულებიდან გამომდინარე, გავლენას ახდენს ბირთვის ნახშირბადის ატომების ელექტრონულ სიმკვრივეზე, რომელსაც თავისებური კანონზომიერება ახლავს. ელექტროდონორული ან ელექტროაქცეპტორული ნაწილაკები, შესაბამისად, უფრო მეტად ზრდიან ან უფრო მეტად ამცირებენ ელექტრონულ სიმკვრივეს ბირთვის 2,4, და 6 (ორთო და პარა) მდგომარეობაში მყოფ ნახშირბადის ატომებზე, ვიდრე 3 და 5 (მეტა) მდგომარეობაში მყოფ ნახშირბადის ატომებზე [2-5].

აქედან გამომდინარე, ბენზოლის მონოწარმოებულში მყოფი ელექტროდონორული ნაწილაკი, ბენზოლის ბირთვში შემდგომი (მეორე) ჩანაცვლებისას, ელექტროაქსეპტურულ ნაწილაქს ჩაანაცვლებს დიდი ელექტრონული სიმკრივის მქონე 2, 4, ან 6 (ორთო, პარა) მდგომარეობაში მყოფ ნახშირბადის ატომთან. ამ თავისებურებას ბენზოლის მონოწარმოებულებში ჩანაცვლების ორიენტაციის წესი ეწოდება, რასაც მეორე ფორმულა თვალსაჩინოდ გამოსახავს, ხოლო პირველი ფორმულით მისი გამოსახვა მოუხერხებელია [3]. მეორე ფორმულის შესაბამისი მოლეკულის შემთხვევაში ვიტყვით: ბენზოლის მოლეკულაში ჩანაცვლებული ელექტროდონორული ნაწილაკი ელექტროაქცეპტორულ ნაწილაკს ჩაანცვლებს 2, 4 ან 6 მდგომარეობის ნახშირბადის ატომთან იმიტომ, რომ ამ ნახშირბადების თითო ელექტრონისაგან შედგება სამი არალოკალიზებული ელექტრონის სისტემა, რომლის ელექტრონული სიმკრვივე გაზრდილია.

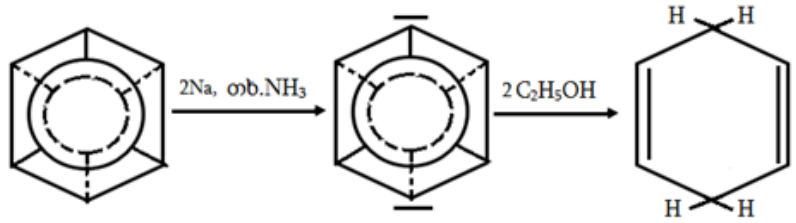
I ფორმულის შესაბამისი მოლეკულის შემთხვევაში ამას ვერ ვიტყვით, რადგან ბირთვის ექვსივე ნახშირბადის თითო ელექტრონისაგან შედგება ექვსი არალოკალიზებული ელექტრონის სისტემა, რომლის ელექტრონული სიმკრვივის გაზრდა ან შემცირება, ყველა ნახშირბადზე ერთნაირად უნდა მოხდეს; ამ შემთხვევაში II ფორმულის უპირატესობა I ფორმულასთან შედარებით აშკარაა.

ბენზოლი მიერთების რეაქციებში შედის ქლორთან და წყალბადთან სპეციალურ პირობებში. ორივე შემთხვევაში შუალედური პროდუქტების გამოყოფა არ ხერხდება [4]. [5]-ის მიხედვით ბენზოლის ნაწილობრივი აღდგენა ანუ ჰიდრირება პირველ საფეხურზე შეიძლება თხევად ამიაკში, ნატრიუმის მოქმედებით, მცირე რაოდენობის ეთანოლის თანაობისას. ამ დროს პირველი ფორმულის შესაბამისი მოლეკულის შემთხვევაში, (1) სქემის მიხედვით, ბენზოლის ბირთვი იერთებს ელექტრონს ნატრიუმის ატომიდან და გარდაიქმნება ანიონ - რადიკალად, რომელიც ეთანოლის მოლეკულას ართმევს პროტონს. პროტონის მიერთების შემდეგ მიღებული რადიკალი განიცდის ასეთივე ორსაფეხურიან აღდგენას და მიიღება 1, 4 - დიჰიდროჰექსადიენ - 2,5:



(1)

ბენზოლის II ფორმულის შესაბამისი მოლეკულის ჰიდრირების პირველი საფეხური შეიძლება გამოვსახოთ (2) სქემით:

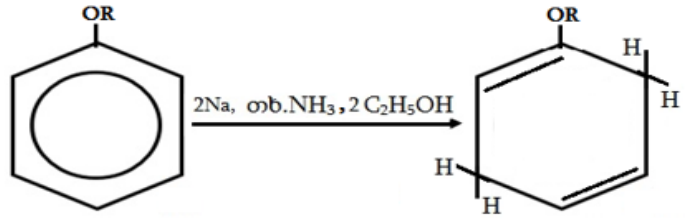


(2)

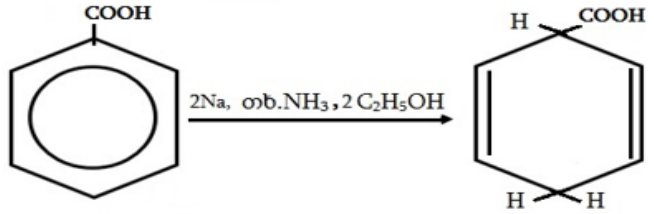
ამ დროს II ფორმულის შესაბამის მოლეკულაში არსებული სამი დელოკალიზებური ელექტრონის ორი სისტემა ნატრიუმიდან იერთებს თითო ელექტრონს, რომლებიც ელექტრონული განზიდვის გამო ფიქსირდება ბენზოლის ბირთვის მოპირდაპირე (1, 4)

ნახშირბადის ატომებზე. შედეგად წარმოიქმნება დიანიონი, რომელიც ეთანოლს ართმევს პროტონებს და მიიღება 1,4 - დიჰიდროციკლოჰექსადიენ - 2,5. (2) სქემა უფრო მარტივია (1) სქემაზე. თანაც, I ფორმულაში არსებული არალოკალიზებული ელექტრონების სისტემა ორ ელექტრონს იერთებს, რაც ძნელია; ამიტომ უპირატესობა II ფორმულის მხარესაა.

საინტერესოა ბენზოლის მონოწარმოებულების მიერ წყალბადის მიერთების პირველ საფეხურზე მიმდინარე რეაქციები, რომლის შესახებაც, I ფორმულიდან გამომდინარე, [5] აღნიშნავს: ნათელი არაა ბირთვში ჩანაცვლებული ჯგუფის გავლენა ელექტრონის მიერთების მიმართულებაზე ანუ მიღებული პროდუქტის სტრუქტურაზე. ექსპერიმენტული მონაცემების საფუძველზე შეიძლება ითქვას, რომ ელექტროდონორული ჯგუფები, მაგალითად R, OR და სხვა იწვევს 2,5 -დიჰიდროპროდუქტების წარმოქმნას (3). ხოლო ელექტროაქცეპტორული ჯგუფები, მაგალითად COOH , NO_2 და სხვა 1,4 - დიჰიდროპროდუქტების მიღებას (4).

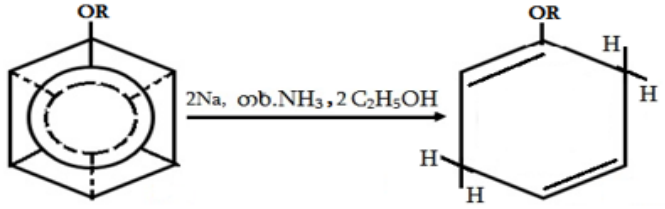


(3)

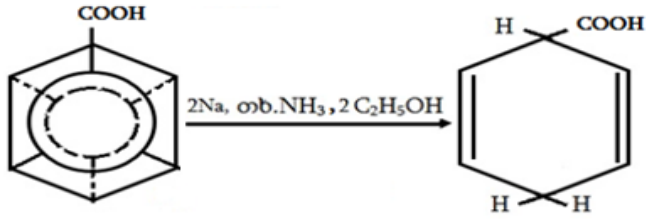


(4)

ბენზოლის II ფორმულის შესაბამისი მოლეკულის ელექტროდონორული და ელექტროაქცეპტორული ჯგუფების შემცველი მონოწარმოებულების ჰიდრირება პირველ საფეხურზე მიმდინარეობს (5) და (6) სქემების მიხედვით.



(5)



(6)

მართალია, ამ შემთხვევაში საქმე გვაქვს ბენზოლის მონოწარმოებულებში ჰიდრირების პირველ საფეხურზე წყალბადის მიერთების რეაქციასთან, მაგრამ მის ასახსნელად შეიძლება გამოვიყენოთ ბენზოლის მონოწარმოებულებში ჩანაცვლების ორიენტაციის წესი. მაგალითად, თუ ბენზოლის მონოწარმოებულში ჩანაცვლებულია ელექტროდონორული ჯგუფი OR {სქემა (3) და (5)}, მაშინ I და II ფორმულების შესაბამის მოლეკულებში, ინდუქციური ეფექტის გამო, ელექტრონული სიმკვრივე უფრო მეტად იზრდება 2,4 და 6 მდგომარეობაში მყოფი ნახშირბადის ატომებზე. ბენზოლის I ფორმულის შესაბამის მოლეკულაში ეს არ უნდა მოხდეს, რადგან 6 არალოკალიზებული ელექტრონის სისტემაში ელექტრონული სიმკრივის გაზრდა თანაბრად უნდა განაწილდეს ექვსვიე ნახშირბადის ატომზე; სწორედ ამიტომ არაა ნათელი [5]-სთვის ბირთვში ჩანაცვლებული ჯგუფის გავლენა ელექტრონის მიერთების მიმართულებაზე ანუ მიღებული პროდუქტის სტრუქტურაზე. ბენზოლის II ფორმულის შესაბამის მოლეკულაში ეს შესაძლებელია და ამრიგად ნათელია ელექტრონის მიერთების მიმართულება ანუ მიღებული პროდუქტის სტრუქტურა იმიტომ, რომ ბენზოლის მოლეკულის ერთი მხარის 3 არალოკალიზებული ელექტრონის სისტემა შედგება 2, 4 და 6 ნახშირბადის ატომების თითო ელექტრონისაგან. რადგან მათზე ელექტრონული სიმკვრივე დიდია, ამიტომ ბენზოლის დონორჯგუფიანი მონოწარმოებულის ჰიდრირების პირველ საფეხურზე ნატრიუმიდან ელექტრონი მიუერთდება ნაკლები ელექტრონული სიმკრივის მქონე 3 ან 5 მდგომარეობაში მყოფ ნახშირბადის ატომს; შედეგად, მასზე ელექტრონული მუხტი ჭარბად გაიზრდება და მეორე ელექტრონი ნატრიუმიდან, ელექტრონული განზიდვის გამო, მიუერთდება მისგან ბირთვში ყველაზე შორს, 6 ან 2 მდგომარეობაში მყოფ ნახშირბადის ატომს. მიღებული დიანიონი მიიერთებს პროტონებს ეთანოლიდან და მიიღება 3,6 ან 2,5 დიჰიდრონაწარმი, რაც ერთიდაიგივეა. ამ შემთხვევაშიც II ფორმულის უპირატესობა აშკარაა I ფორმულასთან შედარებით.

როცა ბენზოლის მონოწარმოებულში ჩანაცვლებულია ელექტროაქცეპტორული ჯგუფი - COOH {სქემა (4) და (6)}, მაშინ ბირთვის ყველა ნახშირბადის ატომიდან (უფრო მეტად 2,4,6), ინდუქციური ეფეტის გავლენით, ელექტრონული სიმკრვივე გადაიწევა მისკენ. ამის გამო ელექტრონული სიმკვრივე უფრო ნაკლები იქნება ბირთვის მე-4 -ე ნახშირბადის ატომზე. შედეგად, ჰიდრირების დროს, ნატრიუმიდან ელექტრონი მიუერთდება მე-4-ე ნახშირბადის

ატომს და მასზე ელექტრონული მუხტი გაიზრდება ჭარბად; ამიტომ მეორე ელექტრონი, ელექტრონული განზიდვის გამო, მიუერთდება პირველ ნახშირბადის ატომს. წარმოქმნილი დიანიონი ეთანოლის მოლეკულებიდან მიერთებს პროტონებს და მიღება 1,4 დიჰიდრო-პროდუქტი. ამ შემთხვევაშიც უპირატესობა ბენზოლის II ფორმულის მხარესაა.

არსებობენ ბენზოლის ნაერთები მეტალებთან, რომელთაგან აღსანიშნავია სენდვიჩისა და ნახევრადსენდვიჩის ტიპის ნაერთები ქრომთან {6}. სენდვიჩის ტიპის ნაერთში ქრომის ატომი აკავშირებს ბენზოლის ორ მოლეკულას სიბრტყეებით, ხოლო ნახევარ-სენდვიჩის ტიპის ნაერთში ქრომის ატომთან მიერთებულია ბენზოლის მოლეკულა სიბრტყით და CO-ს სამი მოლეკულა. ეს ნაერთებია: 1. $Cr(C_6H_6)_2$ – დიბენზოლქრომი, 2. $CrC_6H_6(CO)_3$ - ტრიკარბონილბენზოლქრომი, 3. $Cr(CO)_6$ - ჰექსაკარბონილქრომი. მე-3-ე ნაერთი მოტანილია შედარებისათვის. ამ ნაერთებში ქრომის დაჟანგულობის რიცხვი ნულის ტოლია [6]. მასთან დაკავშირებული არიან მოლეკულები; ამიტომ ქრომის ატომსა და მოლეკულებს შორის ბმის სახეობა გაურკვეველია, მაგრამ ისინი არსებობენ. მე-3-ე ნაერთში ქრომის ატომი დაკავშირებულია ექვს კარბონილის ჯგუფთან, მე-2-ე ნაერთში სამი კარბონილის მოლეკულა ჩანაცვლებულია ბენზოლის ერთი მოლეკულით, ხოლო 1 ნაერთში ექვსი CO-ს ადგილს იკავებს ბენზოლის ორი მოლეკულა. გამოდის, რომ ბენზოლის მოლეკულა სენდვიჩისა და ნახევარსენდვიჩის ტიპის ნაერთებში ქრომის ატომთან დაკავშირებულია სამი ბმით. აქედან გამომდინარე, ბენზოლის II ფორმულაში არსებული სამი არალოკალიზებული ელექტრონის შემცველი ნახშირბადები უნდა ამყარებდნენ სამ ბმას ქრომთან. თუ ეს ასეა, მაშინ ბენზოლის II ფორმულას უპირატესობა ექნება ბენზოლის I ფორმულასთან შედარებით, რადგან I ფორმულის შესაბამისი ბენზოლის ერთი მოლეკულა ექვსი ბმით, ხოლო 2 მოლეკულა 12 ბმით უნდა იყოს დაკავშირებული ქრომის ატომთან, რაც შეუძლებელია.

ბენზოლის ქიმიური თვისებების ახსნაში I და II ფორმულების შედარებიდან ჩანს, რომ II ფორმულა უფრო თვალსაჩინოდ გამოსახავს ბენზოლის თვისებებს 4 პუნქტში: 1) ბენზოლის მონოწარმოებულებში ჩანაცვლების ორიენტაციის წესს II ფორმულა თვალსაჩინოდ გამოსახავს, ხოლო I ფორმულა ვერ გამოსახავს; 2) ბენზოლის ჰიდრირების პირველი საფეხურის ახსნა II ფორმულით უფრო დამაჯერებელია, ვიდრე I ფორმულით; 3) ბენზოლის მონოწარმოებულების ჰიდრირების პირველ საფეხურზე ელექტრონის მიერთების მიმართულების ანუ მიღებული დიჰიდროპროდუქტის სტრუქტურის ახსნა II ფორმულით ნათელია, ხოლო I ფორმულით არ არის ნათელი; 4) ბენზოლისა და ქრომის შემცველი, სენდვიჩისა და ნახევრადსენდვიჩის ტიპის ნაერთების სტრუქტურის ახსნა II ფორმულით უფრო დამაჯერებელია, ვიდრე I ფორმულით.

ლიტერატურა:

1. ხიდეშელი გ. (2002). ბენზოლის ახალი „რეზონანსული“ სტრუქტურული ფორმულა. სერტიფიკატი N115, გაცემული „საქპატენტი“-ს მიერ, 2002.02.21.
2. Моррисон Р., Бойд Р. (1972). Органическая химия. - М., „Мир“
3. ნოღაიდელი ა., ზონისი ს. (1973). ორგანული ქიმიის კურსი. თბ., ,,განათლება“
4. ჭირაქაძე გ., საგინაშვილი მ. (1979). ორგანული ქიმია. თბ., ,,განათლება“
5. Райд К. (1972). Курс физической органической химии. - М., „Мир”
6. Карапетьянц М.Х.. Дракин С.И. (1981). Обшая и неорганическая химия. М. ,,Химия“.

NEW FORMULA OF BENZOLE MOLECULE ELECTRONIC STRUCTURE, CLEARLY SHOWING ITS FEATURES

Khidesheli Givi
Ph.D. of Chemical sciences

Summary

The resume indicates , that on the the first formula of benzene is built modern benzole chemistry, second formula presented by us and it is an alternative to the first formula. On the back of the corresponding molecules of the first and the second formulas, were compared chemical properties expression of benzole, on the assumption of its electronic structure. It has been established, that the second formula better expresses the benzole properties in four points: 1. As distinct from the first formula, the second formula clearly expresses rule of orientation substitution of benzole monoderivatives; 2. Interpretation of the first stage of hydrogenation of benzole in the second formula more persuasive than in the first; 3. Interpretation of the structure of the electron attachment direction on the first stage of hydrogenation of benzole monoderivatives, in other words received dihydro product , unlike with the first formula is clearly presented in the second formula; Interpretation of the sandwich and half-sandwich structures, consisting from compounds of benzole and chromium convincing presented in the second formula.

НОВАЯ ФОРМУЛА ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ БЕНЗОЛА, НАГЛЯДНО ВЫРАЖАЮЩАЯ ЕГО СВОЙСТВА

Хидешели Г.
Кандидат химических наук

Резюме

В резюме отмечается, что на первой формуле бензола построена сегодняшняя химия бензола, вторая формула бензола предоставлена нами и является альтернативой первой формулы. На основе соответствующих молекул первой и второй формул было проведено сравнение выражения химических свойств бензола, исходя из их электронного строения. Установлено, что вторая формула лучше выражает химические свойств бензола в четырех пунктах: 1. В отличии от первой формулы во второй формуле наглядно выражается правило ориентации замещения монопроизводных бензола; 2. Толкование первой ступени гидрирования бензола во второй формуле убедительнее выражено, чем первой; 3. Толкование структуры направления присоединения электрона на первой ступени гидрирования монопроизводных бензола, то есть полученного дигидро продукта, в отличии от первой формулы отчетливо преподнесено во второй формуле. 4. Толкование сэндвич и полу- сэндвич структур, состоящих из соединений бензола и хрома убедительнее преподнесено во второй формуле.