

UOT 547.022.12

**DİLS – ALDER REAKSİYASINDA SİS- VƏ TRANS KONFİQRASIYALARIN İZAHİ VƏ TETRAEDRİK MOLEKUL MODELLƏRLƏ VİZUALLAŞMASI****A.A.Nağıyeva<sup>1</sup>, V.M.Həsənova<sup>2</sup>, F.Ə.Mustafayeva<sup>2</sup>, M.S.Salahov<sup>2</sup>***Bakı Dövlət Universiteti<sup>1</sup>**AZ 1148 Bakı, Z.Xəlilov küç., 23; e-mail: adela.nagiyeva@mail.ru**Polimer Materiallar İnstitutu<sup>2</sup>**AZ 5004 Sumqayıt, S.Vurğun küç., 124; e-mail: ipoma@science.az*

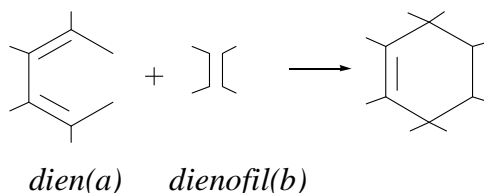
*Fundamental fəzavi quruluşa ən çox tabe olan Dils-Alder reaksiyasıdır ki, bu reaksiya dien və dienofillər arasında qapalı quruluşlu birləşmə reaksiyası olub, başlangıç molekulların ilkin konfiqurasiyalarını saxlamaqla başa çatır. Buna əsaslanaraq işdə biz butadienlə sis-buten-2 nin Dils-Alder reaksiyası nəticəsində alınan sis-4,5 dimetil tsikloheksenin, trans-buten-2 ilə isə transtsikloheksenin yaranmasını daha əyani şəkildə göstərilməsinə nail olmaq məqsədi ilə tetraedrik modellərlə vizuallaşdırmışıq.*

**Açar sözlər:** *sis- və trans- konfiqurasiyalar, sərt rabitəli birləşmə, hərəkətli rabitəli birləşmə, aralıq komplekslər, tetraedrik modellərlə vizuallaşma.*

Fəzavi kimya elmində coxsaylı sözünü şəkilçilərdən istifadə olunmasının azərbaycan dilində semantik izahı 2006-cı ildə kitab halında verilmişdir [1]. Bunlar icərisində dərsləklərdə geniş istifadə olunan və molekulların konfiqurasiyalarını ifadə edən sis- və trans- fəzavi sözünü şəkilçilərin molekul modellərlə şərhli fəzavi kimya kursunun əyani şəkildə dərk olunması üçün böyük əhəmiyyət kəsb edir.

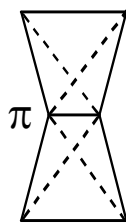
Məlumdur ki, sis- və trans-konfiqurasiyalarının realizə olunması ilk növbədə molekulun sərt, gövdəli quruluşunda əvəzedicilərin fəzada eyni və əks istiqamətli düzülüşünü göstərir. Bu tipə mənsub olan sis- və trans- konfiqurasiyalı molekullar eyni tərkibli olmaqla, fərqli fiziki və kimyəvi

xassələr daşıyırlar. Bu xassələrin fərqlənməsi bəzən hətta molekulların adlarında sərbəst kimyəvi ifadələrlə əks olunurlar: məsələn malein və fumar turşuları fərqli fiziki-kimyəvi xassələrə görə belə sərbəst adları almışlar. Fəza səciyyəli bu tip xassələr bir çox molekulların hibrid orbitallarında da öz ifadəsini tapır və fəzavi kimya sahəsində tetraedrik modellərdə molekulun xassələrini birmənalı izah edir [2,3]. Qeyd etmək lazımdır ki, kimyəvi reaksiyalar icərisində fundamental fəzavi quruluşa ən çox tabe olan Dils-Alder reaksiyasıdır [4]. Bu reaksiya dien(a) və dienofillər(b) arasında qapalı quruluşlu birləşmə reaksiyası olub başlangıç molekulların əsasən ilkin konfiqurasiyalarını saxlamaqla başa çatır.



Alifatik sıra dien və dienofillərin Dils-Alder reaksiyasının tetraedrik modellərlə vizuallaşması sis- və trans- adduktların fəzavi quruluşlarının mənimsənilməsi üçün daha

münasibdir, çünki ikiqat rabitə ( $\pi$ ) tetraedrin tillərlə sərt birləşməsini, birqat rabitələr ( $\sigma$ ) isə tetraedrlərin təpələrlə fırlanma hərəkətli birləşməsini əyani şəkildə göstərir:



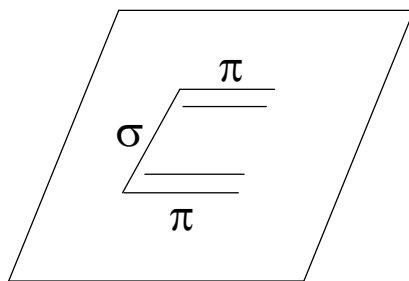
birlikdə olan  $\pi$  rabitələri



birlikdə olan  $\sigma$  rabitələri

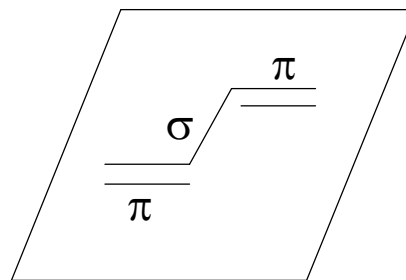
Qeyd etmək lazımdır ki, bu tip hərəkət  $\sigma$  rabitə ətrafında fırlanma nəticəsində molekullar müxtəlif konformasiyalar halında mövcud ola bilərlər [5]. Belə ki, butadien-1,3 molekulunda olan sərt birləşmiş iki  $\pi$  rabitəli karbon fraqmentləri bir-biri ilə təpələrlə

birləşmiş iki tetraedrlərin yaratdığı  $\sigma$  rabitələr ətrafında fırlanaraq müstəvi şəkilli daha dayanıqlı sisoid-planar və transoid-planar konformasiyalarda mövcud ola bilərlər ki, bunlardan yalnız sisoid konformasiya Dils-Alder reaksiyasına daxil olur.

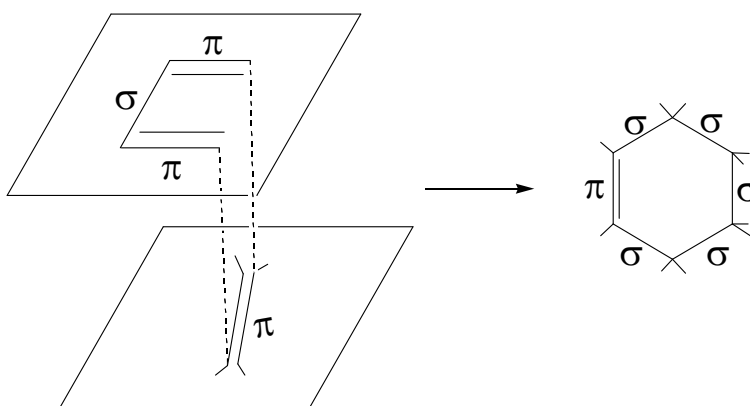


sisoid konformasiya

$\equiv$

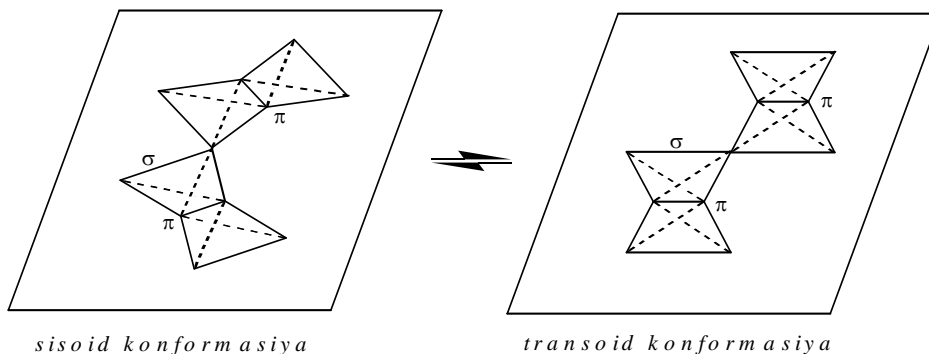


transoid konformasiya



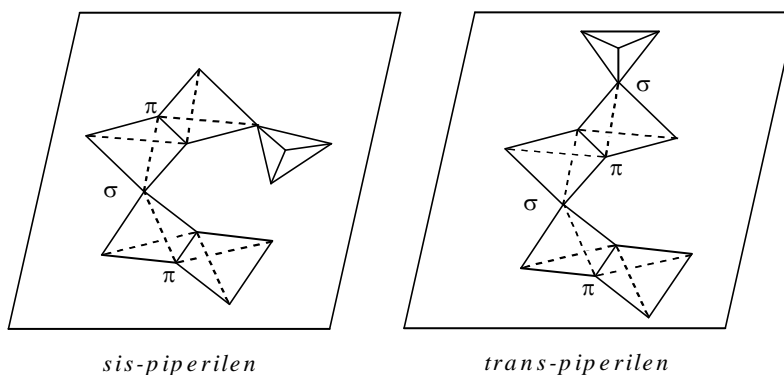
Əvvəlki  $\pi$  rabitələri  $\sigma$  rabitələri ilə birləşərək  $\pi$  rabitələri əmələ gətirir.

Bizim verdiyimiz tetraedrik modellərlə bu planar konformasiyaların daha dayanıqlı olduğu asanlıqla müşahidə olunur.



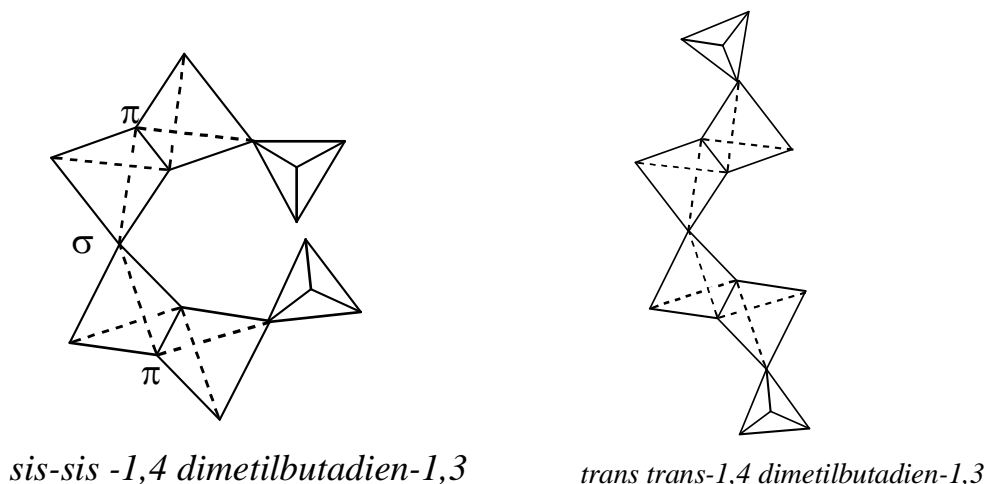
Alifatik dienlər sırasında metil əvəzli sisoid konformasiyalı planar piperilen fraqmentləri sis- və trans- quruluşların bu tetraedrik

modellərlə vizuallaşmasını aşağıdakı planar formalarda təsvir etmişik:



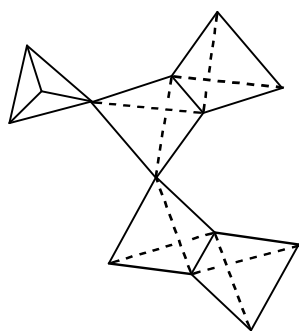
Bunlardan trans-piperilen dien sintezinə daxil ola bildiyi halda sis- piperilen tetraedrik metil qrupunun fəzavi maneəsi nəticəsində dienlə-dienofil arasında aralıq kompleks yarada bilmədiyindən addukta çevrilə bilmir. Eləcə də

sis-sis-1,4-dimetil butadien-1,3 hər iki metil qruplarının fəzavi maneəsi nəticəsində Dils-Alder adduktları yaratmır, halbuki trans-trans 1,4-dimetil butadien bu reaksiyada aktiv iştirak edir.

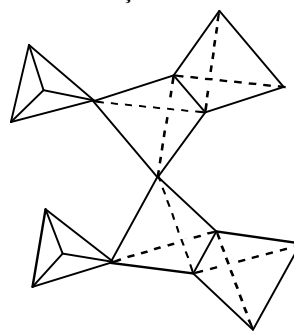


Bunlardan fərqli olaraq izopren və 2,3-dimetil butadien molekulları müxtəlif dienofillərlə asanlıqla adduktlar yaradırlar, çünki aralıq kompleksin əmələ gəlməsində

metil qruplarının fəza maneələri yoxdur. Bu faktların tetraedrik modellərlə əyani vizuallaşmasını biz aşağıdakı qrafiki təsvirlərdə vermişik.



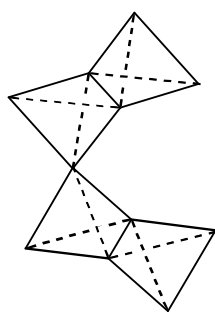
*izopren*



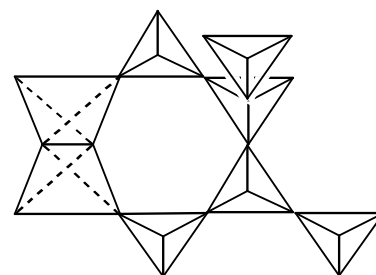
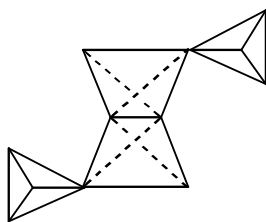
*2,3-dimetil butadien-1,3*

Sis- və trans-konfigurasiyalı dienofillər götürüldükdə də ilkin konfigurasiyaları saxlamaqla adduktlar alınır. Belə ki, butadienlə sis-buten-2 Dils-Alder reaksiyası

nəticəsində yalnız sis- 4,5-dimetil tsikloheksen yaradır. Bunların verdiyimiz tetraedrik modellərlə ifadəsi alınan birləşmələrin fəza quruluşunu daha aydın göstərir.

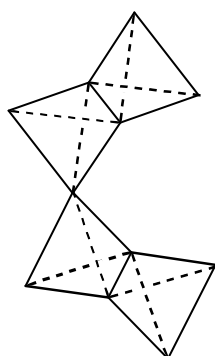


+

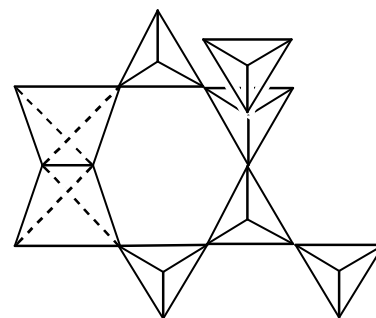
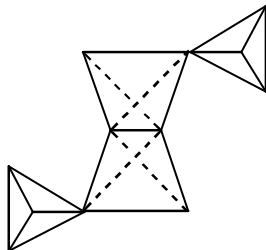


*trans-2,3-dimetilbuten-2*

*trans-4,5-dimetil tsikloheksen-2*



+



*trans-2,3-dimetilbuten-2*

*trans-4,5-dimetil tsikloheksen-2*

## ƏDƏBİYYAT

1. Salahov M.S., Əfəndiyev A.A., Məhərrəmov A.M., Salahova R.S. İzahlı fəzavi kimya terminləri. Bakı. "Elm"–2006, 164 s.
2. Salahov M.S., Bağmanov B.T., Yusifova N.İ., Bağmanlı L.B. Fəza səciyyəli kimyəvi terminlər və onların izahı. 16. Dinamiki molekullar // "Kimya məktəbdə" jurnalı, 2006, 1(13), s.64-71.
3. Salahov M.S., Abbasov V.M., Bağmanov B.T. və b.  $C_n$  – karbohidrogenləri, onların quruluşu, qrafiki təsvirləri və nomenklaturası. 5.  $C_3$ – $C_4$  tərkibli karbohidrogenlərdə izomerlik. // "Kimya məktəbdə" jurnalı, 2006, 3(15), s.3-18.
4. Онищенко А.С. Диеновый синтез. Издательство Академия Наук СССР, Москва, 1963, 566с.
5. Салахов М.С., Пашаев Ф.Г., Гасанов А.Г., Багманов Б.Т. Квантовохимические расчеты электронной структуры молекулы гексахлорбутадиена. // Azərbaycan kimya jurnalı, №4, 2007, s.53-57.  
(Salahov M.S., Pashaev F.G., Gasanov A.G., Bagmanov B.T. Kvantovohimicheskie rascheti jelektronnoj struktury molekuly geksahlorbutadiena. // Azərbaycan kimya jurnalı, №4, 2007, s.53-57).

**ОПИСАНИЕ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ТЕТРАЭДРИЧЕСКИМИ МОДЕЛЯМИ ЦИС- И ТРАНС- КОНФИГУРАЦИЙ В РЕАКЦИИ ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА**

**A.A.Nagiyeva<sup>1</sup>, V.M.Hasanova<sup>2</sup>, F.A.Mustafayeva<sup>2</sup>, M.S.Salahov<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Бакинский государственный университет

AZ 1148 Баку, ул. З.Халилова, 23; e-mail: [adela.nagiyeva@mail.ru](mailto:adela.nagiyeva@mail.ru)

Институт полимерных материалов Национальной АН Азербайджана

AZ 5004 Сумгайыт, ул. С. Вургуна, 124; e-mail: [ipoma@science.az](mailto:ipoma@science.az)

Реакция Дильса-Альдера является фундаментальной реакцией с точки зрения структурного строения, так как конечный продукт реакции сохраняет структуру исходных диенов и диенофилов. Исходя из этого, в данной работе мы провели более доступную визуализацию с помощью тетраэдрических моделей цис-4,5-диметилциклогексена, полученного по реакции Дильса-Альдера из цис-бутена-2 и бутадиена и соответственно, транс-4,5-диметилциклогексена из транс-бутена-2.

**Ключевые слова:** цис- и транс- конфигурации, соединение с жесткой связью, соединение с подвижной связью, промежуточный комплекс, визуализация тетраэдрическими моделями.

**EXPLANATION AND VISUALIZATION OF SIS-AND TRANS- CONFIGURATIONS IN THE REACTION OF DIELS ALDER BY TETRAHEDRAL MODELS**

**A.A.NAGIYEVA, V.M.HASANOVA, F.A.MUSTAFAYEVA, M.S.SALAHOV**

*Baku State University*

AZ 1148 Baku, Z.Khalilov str., 23; E-mail: [adela.nagiyeva@mail.ru](mailto:adela.nagiyeva@mail.ru)

Institute of Polymer Materials of the National Academy of Sciences of Azerbaijan

AZ 5004 Sumgait, S.Vurgun str., 124, E-mail: [ipoma@science.az](mailto:ipoma@science.az)

Diels-Alder reaction is a fundamental reaction from structural composition standpoint since a finished product preserves a structure of initial dienes and dienophiles. Hence, the work provides more accessible visualization with the help of tetrahedral models of cis-4,5-dimethyl cyclohexene obtained from the Diels-Alder reaction of butadiene and cis-butadiene-2 and trans 4,5 dimethylcyclohexene from trans-buten-2.

**Keywords:** cis- and trans- configurations, strong communication compound, intermediate complexes, visualization by tetrahedral models.

*Redaksiyaya daxil olub 13.02.2015.*