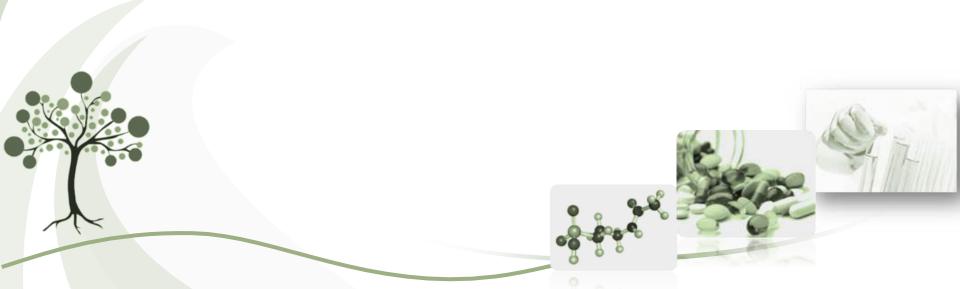


药用基础化学/芳香烃 苯环的定位规则



即业教育药学专业国家资源库

$$CH_3$$
 + HNO₃ (浓) $\frac{$ 浓H₂SO₄ $}{20 \sim 30 \, ^{\circ}\text{C}}$ + $\frac{CH_3}{NO_2}$ + \frac

$$NO_2$$
 $+ HNO_3(\cdot \not \in \tilde{N})$
 NO_2
 NO_2

第二个取代基进入的位置是受苯环上原有基团的影响,这种现象称为定位效应。苯环上原有基团称为定位基。

一、定位效应

1、邻对位定位基

$$-NHCH_3 > -NH_2 > -OH > -OCH_3 > -R > -X$$

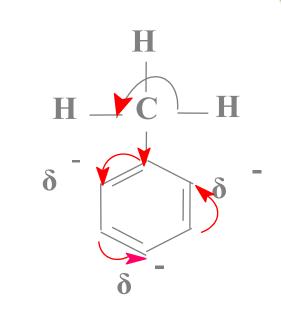
2、间位定位基

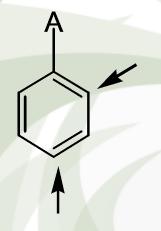
 $-N^{+}(CH_3)_3 > -NO_2 > -SO_3H > -CHO > -COOH$

二、定位效应的解释

1、邻对位基的定位效应

-CH₃使苯环电子云密度升高,而 活化苯环, 为邻、对位定位基。





A μÄŢ"λÄÜĦ'Î ĐὄόÖª £" 'ÓÇ¿μ½Èõ£©

⊖ -O £¬-NR₂£¬-NHR£¬ -NH₂£¬-OH£¬-OR£¬-NHCOR

-OCOR£ \neg -R£ \neg -CH₃, -X

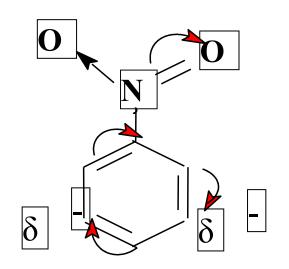
合电子基团

二、定位效应的解释

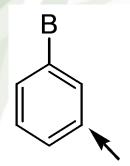
2、间位定位基的定位效应

存在着:

吸电子诱导效应(-I) 吸电子共轭效应(-C)



间位取代基使苯环上电子云密度下降,苯环钝化,亲电试剂难于进攻。



B μÄ l'λÄÄİ'Î ĐὄόÖª £"'ÓÇ;μ½ἔ䣩

$$-NR_3$$
£ $-NO_2$ £ $-CF3$ £ $-CCl_3$ £ $-CN$ £ $-SO_3$ H£

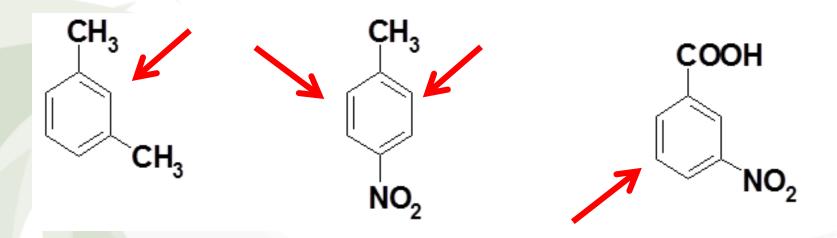
-CHO£¬-COR£¬COOH£¬-CONH2;£



三、定位效应的应用

1、预测反应产物

(1)两个定位基对于引入第三取代基的定位效应一致:

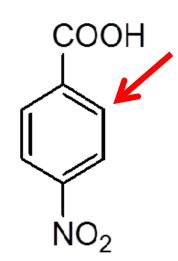


三、定位效应的应用

1、预测反应产物

(2) 两个定位基对于引入第三取代基的定位效应不一致

a.同类型—定位效应 强的取代基所决定



定位基 强弱

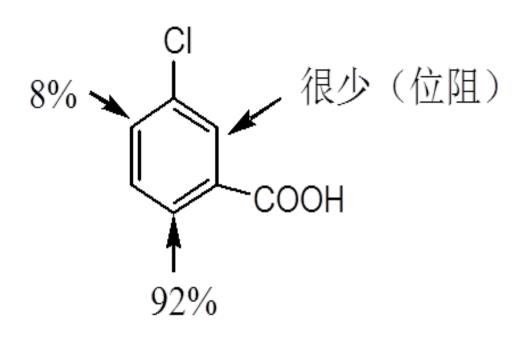
 $-NO_2 > -COOH$

三、定位效应的应用

1、预测反应产物

(2) 两个定位基对于引入第三取代基的定位效应不一致

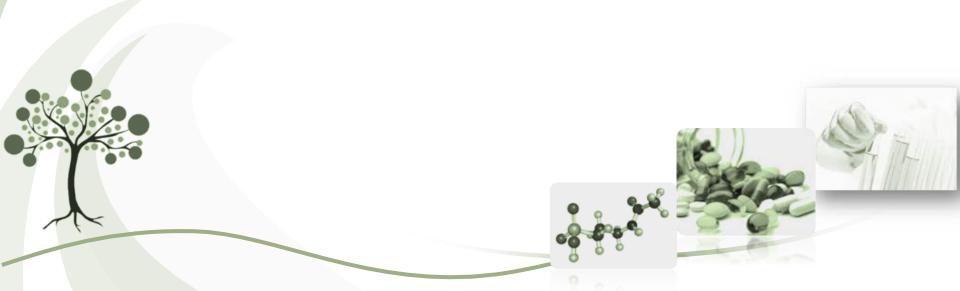
b.不同类型-由邻 对位定位基决定





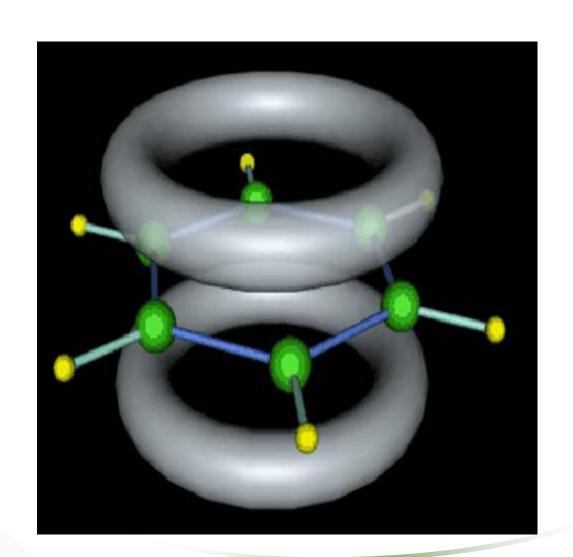
药用基础化学/芳香烃

苯环上的亲电取代反应

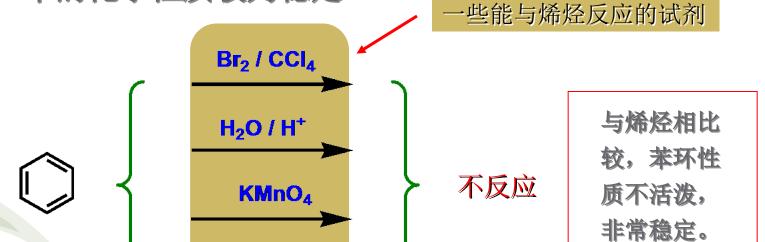


苯的结构

杂化轨道理论:



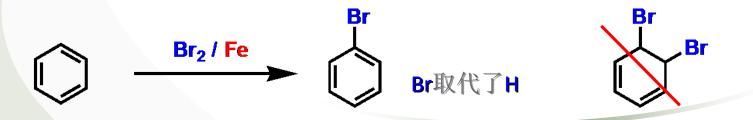
> 苯的化学性质较为稳定



•与亲电试剂发生取代反应,而不发生加成反应

H₂ / Pt or Ni

常温常压



亲电取代反应

1、卤代反应

◆烷基苯的卤代反应比苯容易,主要生成邻、对位取代产物。例如:

邻溴甲苯

对溴甲苯

亲电取代反应

1、卤代反应

■ 如果没有催化剂存在,在紫外线照射或加热条件下,甲苯侧链上的氢原子也会被卤素取代:

以上内容仅为本文档的试下载部分,为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文,请访问: https://d.book118.com/755124102114011240