

配向性についての考察

配向性とは

ベンゼン環に置換基が結合していると、その影響があるため、位置によって付加反応の反応性に差が生じる。これを配向性といい、置換する基によってオルト・パラ配向性とメタ配向性があり、以下のように分類される。

配向性

オルト・パラ $-\text{OH}$, $-\text{OCH}_3$, $-\text{NH}_2$, $-\text{NHCOCH}_3$, $-\text{Cl}$ (ハロゲン), $-\text{CH}_3$ (アルキル基)

メタ $-\text{COOH}$, $-\text{COOR}$, $-\text{CHO}$, $-\text{COR}$, $-\text{NO}_2$, $-\text{CN}$, $-\text{SO}_3\text{H}$

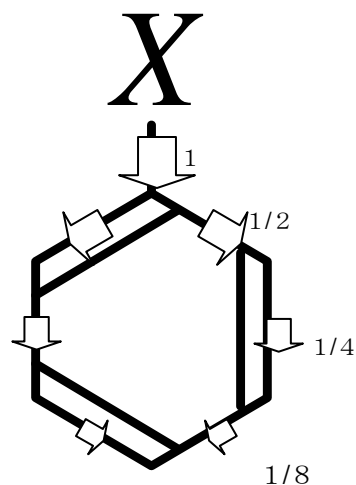
・配向性はなぜ生じるのか？

配向性はベンゼン環の位置によって反応性に差が出るということである。では、なぜ、1つのベンゼン環で一より反応性が異なるのであろうか？ベンゼン環と置換基との結合は基本共有結合なので、結合性に対して電子の状態が重要となる。つまり置換基によって他の部分の電子の状態が変化していると考えられる。

・オルト・パラ配向性→電子を押し出す基が結合したとき

ここでは一つのモデルとして電子がどのように押し出されるのかを考えてみる。ここでのポイントは

- ・押し出す力は左右に分散される
- ・押し出す力は初めの基から遠くなるほど弱くなる



仮に左図のように基 X が電子を 1 の力で押し出すと仮定し、その押し出す力が遠くなるに従い半減するモデルを考える。

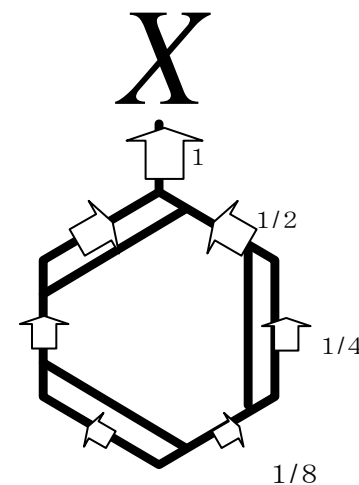
オルト… $+1/2 - 1/4 = +1/4$

メタ … $+1/4 - 1/8 = +1/8$

パラ … $+1/8 + 1/8 = +1/4$

このように考えられ、結果としてすべての位置で電子の密度が高くなっていると考えられるが、その中でもオルトとパラの場所がより電子の密度が高くなっていると考えられる。

・メタ配向性→電子を引き付ける基が結合したとき



仮に左図のように基 X が電子を 1 の力で引き付けると仮定し、その引き付ける力が遠くなるに従い半減するモデルを考える。

オルト… $-1/2 + 1/4 = -1/4$

メタ … $-1/4 + 1/8 = -1/8$

パラ … $-1/8 - 1/8 = -1/4$

このように考えられ、結果としてすべての位置で電子の密度が低くなっていると考えられるが、その中でもオルトとパラの場所がより電子の密度が低くなっていると考えられる。つまり、メタ配向性では、すべての位置で電子の密度が低くなっているため、基本的には反応性は低くなっているが、オルトとメタの位置でより低くなっているため、メタの位置が相対的に反応性が高いといえる程度である。

以上のことより、一般的にはオルト・パラ配向性は基本的に反応性の高くなる配向性であり、メタ配向性は反応性の低くなる配向性であることがわかる。