



лектор:
проф. Рохин Александр
Валерьевич

ОСНОВЫ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Лекция 2. Современные положения
теории А.М. Бутлерова.

E-mail: irkrav66@gmail.com



Современные положения теории химического

строения

- Атомы в молекулах соединены друг с другом в определенной последовательности согласно их валентностям.
- Последовательность межатомных связей в молекуле называется ее **химическим строением** и отражается одной структурной формулой (формулой строения).

Современные положения теории химического строения

- Химическое строение можно устанавливать химическими методами. (В настоящее время используются также современные физические методы).
- Свойства веществ зависят от их химического строения.

Современные положения теории химического

строения

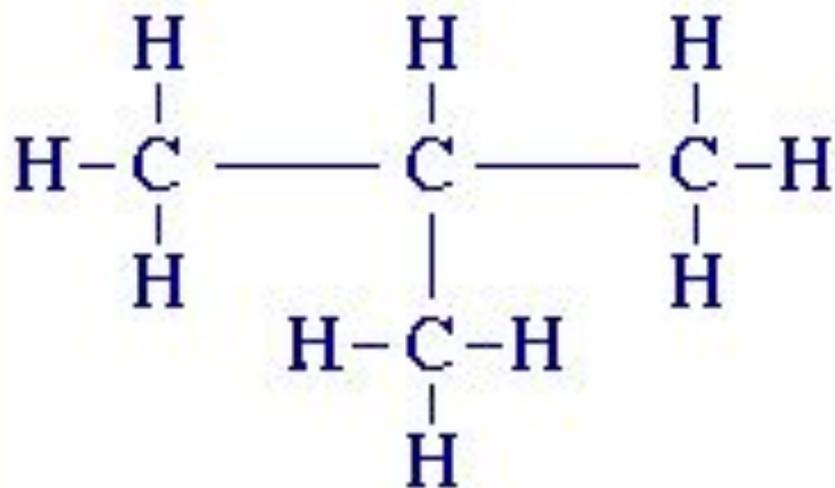
- По свойствам данного вещества можно определить строение его молекулы, а по строению молекулы - предвидеть свойства.
- Атомы и группы атомов в молекуле оказывают взаимное влияние друг на друга.

Формулы строения

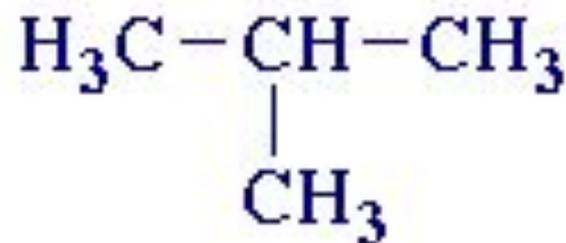
- Формула строения (структурная формула) описывает порядок соединения атомов в молекуле, т.е. ее химическое строение.
- Химические связи в структурной формуле изображаются черточками.
- Связь между водородом и другими атомами обычно не указывается (такие формулы называются сокращенными структурными)

изо-бутан C_4H_{10}

Структурные формулы изобутана (2-метилпропана)



Полная структурная
формула

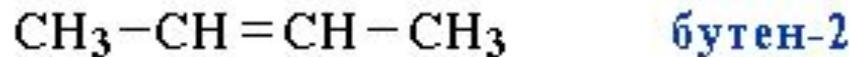
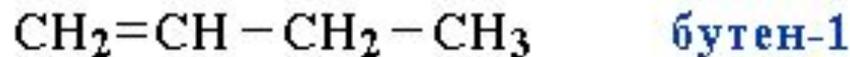


Сокращенная структурная
формула

Структурные изомеры

- соединения одинакового качественного и количественного состава, отличающиеся порядком связывания атомов, т.е. химическим строением.

Структурные изомеры C_4H_8



Стереοизомеры

- при одинаковом составе и одинаковом химическом строении различаются пространственным расположением атомов в молекуле.
- оптические (зеркальные) :



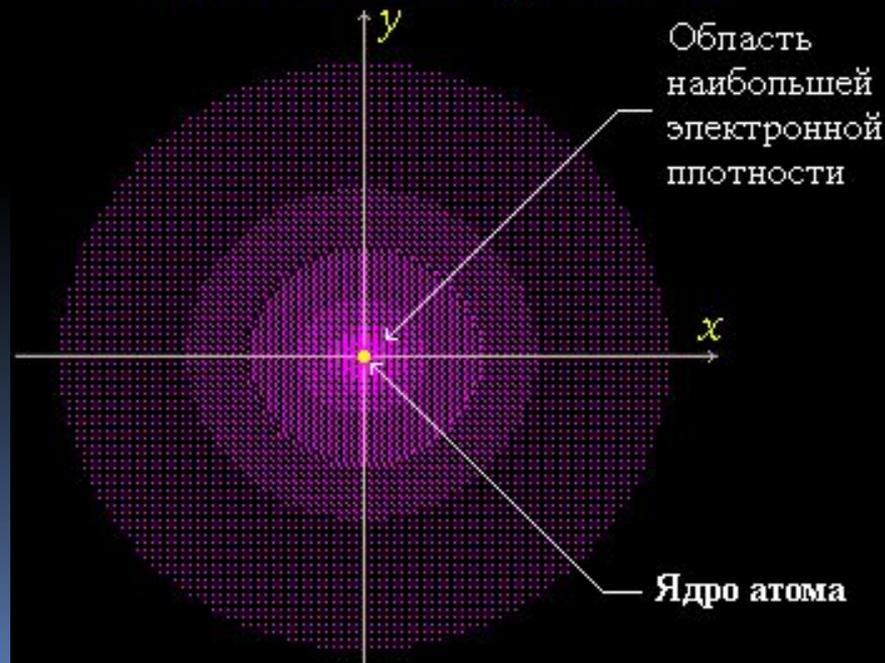
Свойства органических соединений определяются:

- природой и электронным строением атомов;
- типом атомных орбиталей и характером их взаимодействия;
- типом химических связей;
- химическим, электронным и пространственным строением молекул

Атомная орбиталь (АО)

- область наиболее вероятного пребывания электрона (электронное облако) в электрическом поле ядра атома.

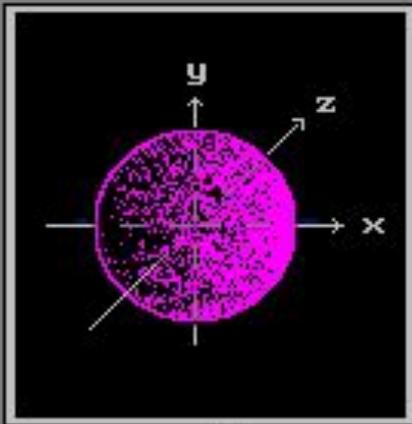
Атомная 1s-орбиталь



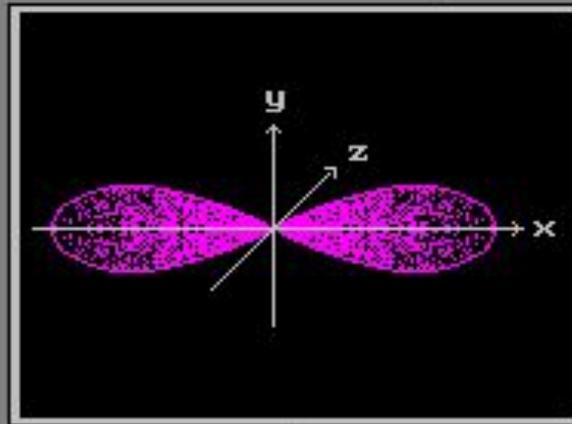
Типы атомных орбиталей

- Положение элемента в Периодической системе определяет тип орбиталей его атомов (s -, p -, d -, f -), различающихся энергией, формой, размерами и пространственной направленностью

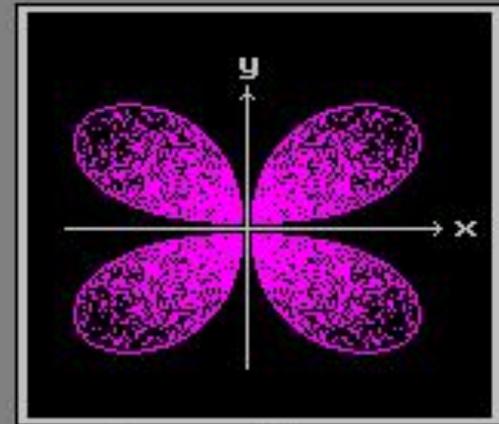
Типы атомных орбиталей



s -орбиталь



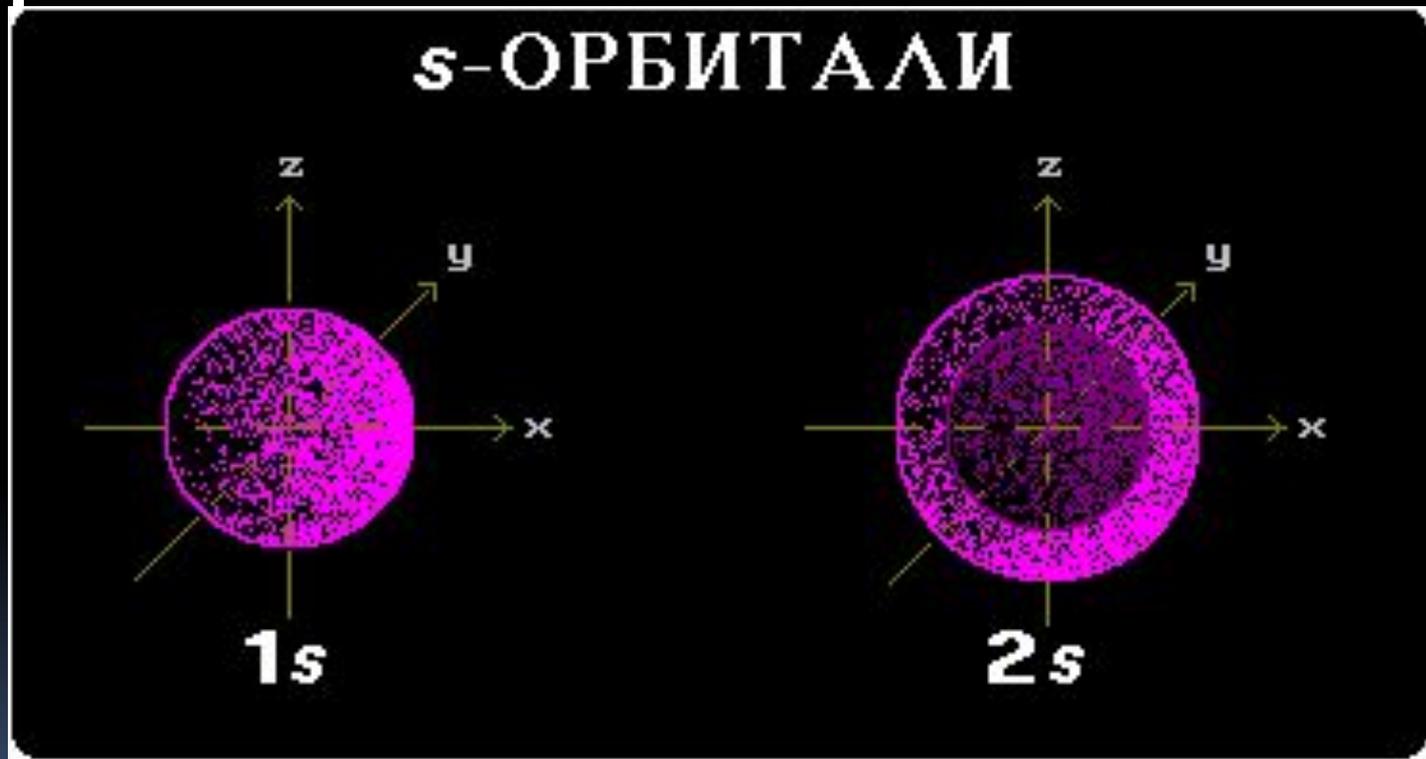
p_x -орбиталь



d_{xy} -орбиталь

Форма и энергия атомных орбиталей

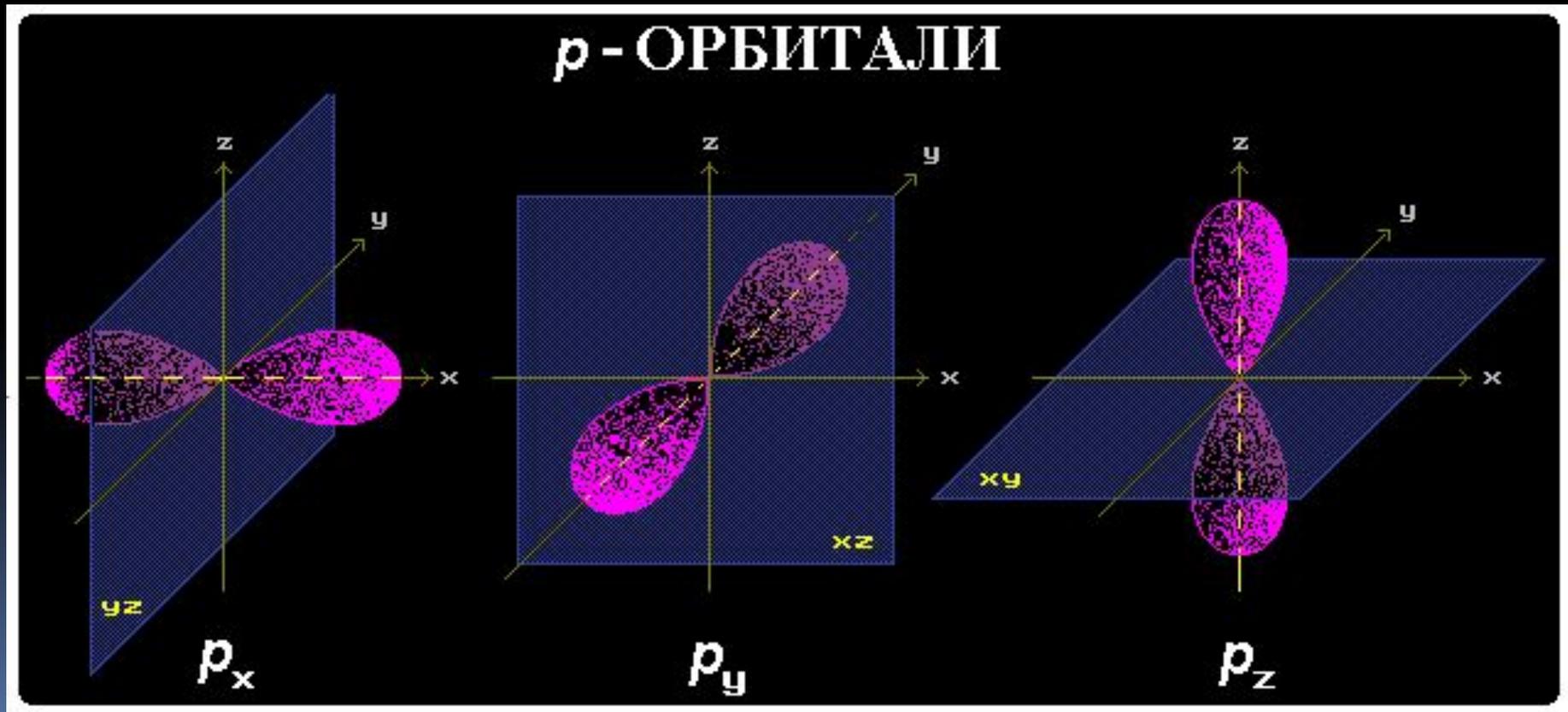
- Атомные орбитали s -типа имеют форму сферы:



Объем сферы увеличивается с ростом энергетического уровня: $1s < 2s < 3s$

Форма и энергия атомных орбиталей

- p -орбитали имеют форму объемной восьмерки (гантели), направленной по оси x , y или z :



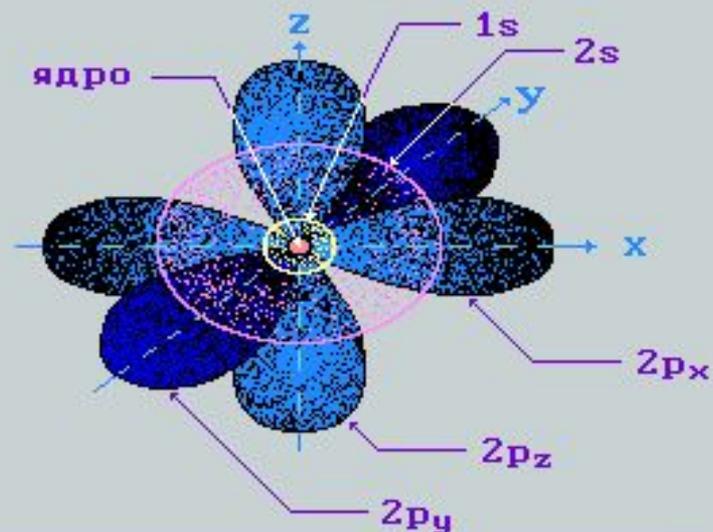
- В элементах второго периода электроны занимают пять АО на двух энергетических уровнях:
- первый уровень $1s$;
- второй уровень - $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$. (цифры обозначают номер энергетического уровня, буквы - форму орбитали)

Электронные орбитали атомов элементов 2-го периода

Электроны в атомах элементов 2-го периода распределены по двум энергетическим уровням.

Первому (внутреннему) уровню соответствует атомная орбиталь $1s$, второму (внешнему) - атомные орбитали:

$2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$.



Порядок изменения энергии АО:
 $1s \ll 2s < 2p_x = 2p_y = 2p_z$

Заполнение атомных орбиталей электронами

- **Принцип устойчивости.**

АО заполняются электронами в порядке повышения их энергетических уровней:



Принцип устойчивости

Заполнение орбиталей двух энергетических уровней

Основной энергетический уровень n	Максимальное число электронов $2n^2$	Символы орбиталей	
1	2	1s	
2	8	2s	2p _x , 2p _y , 2p _z

Электронная конфигурация элементов-органогенов

Элемент	Атомный номер	Заполнение орбиталей					Электронная конфигурация
		1s	2s	2p	3s	3p	
H	1	1					1s ¹
C	6	2	2	2			1s ² 2s ² 2p ²
N	7	2	2	3			1s ² 2s ² 2p ³
O	8	2	2	4			1s ² 2s ² 2p ⁴
P	15	2	2	6	2	3	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ³
S	16	2	2	6	2	4	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁴

Заполнение атомных орбиталей электронами

- **Принцип Паули.**

На одной АО могут находиться не более двух электронов с противоположными спинами.

Заполнение атомных орбиталей электронами

- **Правило Хунда.**

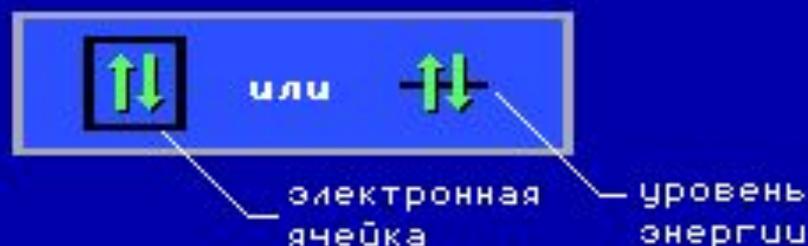
На АО с одинаковой энергией, так называемых вырожденных орбиталях, электроны стремятся расположиться по одному с параллельными спинами.

Разрешенные и неразрешенные электронные конфигурации

Разрешенная конфигурация

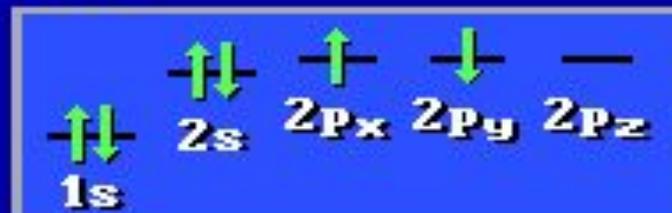
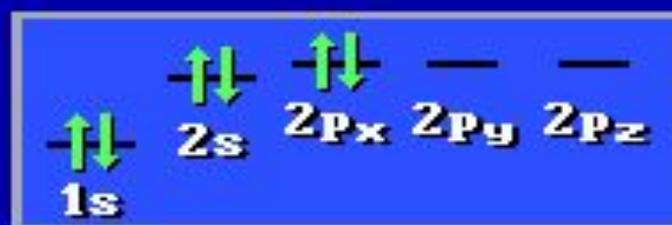
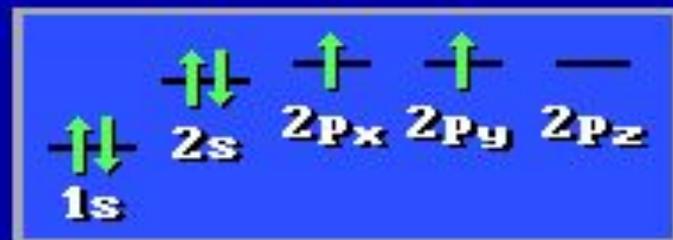
Неразрешенные конфигурации

Принцип Паули



Правило Хунда

(на примере атома углерода)



Квантовые числа

- энергетические параметры, определяющие состояние электрона и тип атомной орбитали, на которой он находится:

1. n - главное квантовое число
2. l - орбитальное квантовое число
3. m - магнитное квантовое число
4. s - спиновое квантовое число

Квантовые числа

- **Главное квантовое число n** определяет общую энергию электрона и степень его удаления от ядра (номер энергетического уровня);
- оно принимает любые целочисленные значения, начиная с 1 ($n = 1, 2, 3, \dots$)

Квантовые числа

- Орбитальное (побочное или азимутальное) квантовое число l определяет форму атомной орбитали.
- Оно может принимать целочисленные значения от 0 до $n-1$ ($l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$).
- Каждому значению l соответствует орбиталь особой формы.
 - $l = 0$ называются s-орбиталями,
 - $l = 1$ - p-орбиталями (3 типа, отличающихся магнитным квантовым числом m),
 - $l = 2$ - d-орбиталями (5 типов),
 - $l = 3$ - f-орбиталями (7 типов).

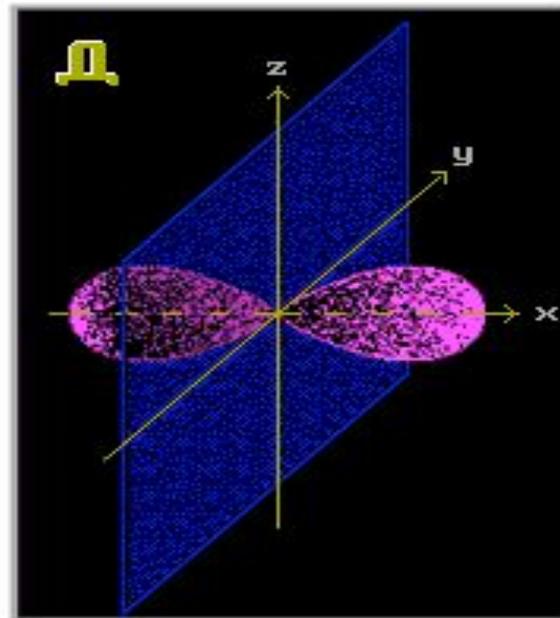
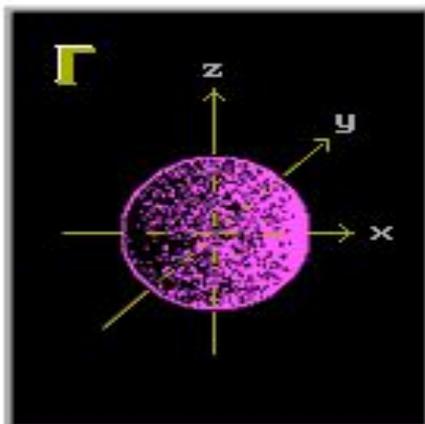
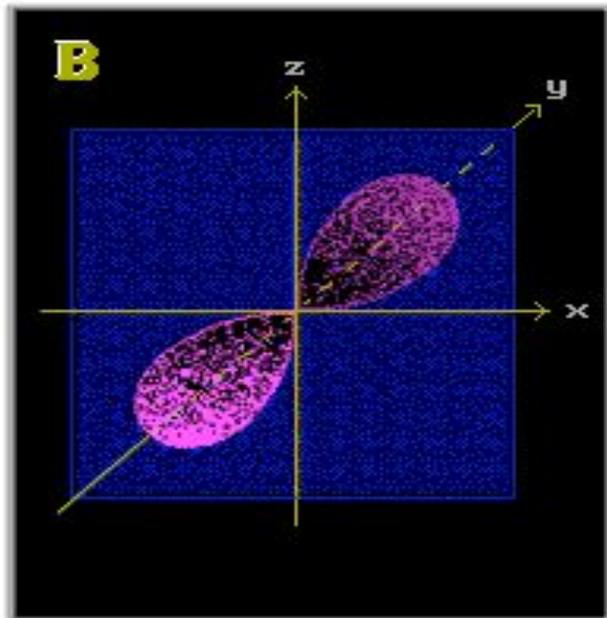
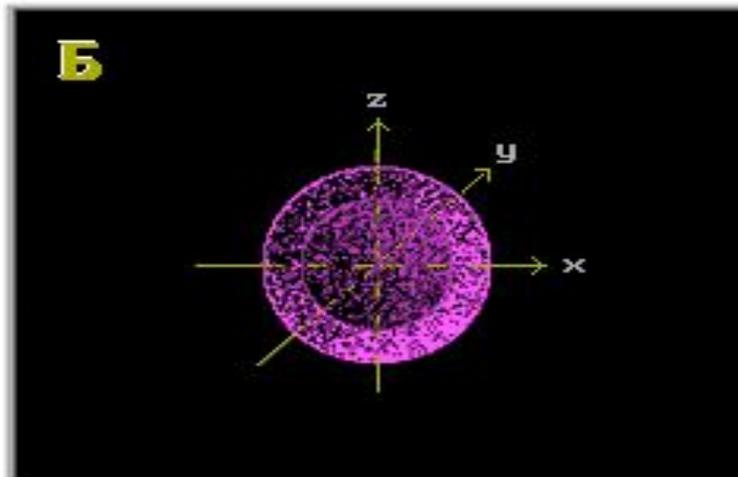
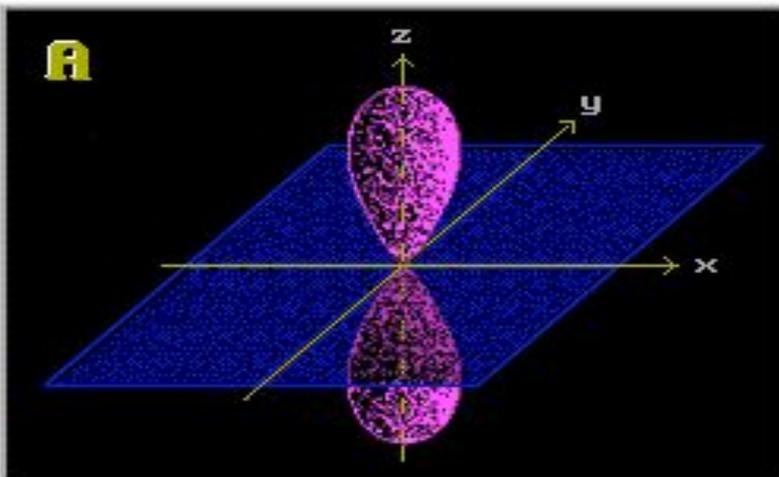
Квантовые числа

- **Магнитное квантовое число m** определяет направление орбитали в пространстве.
- Его значения изменяются от $+l$ до $-l$, включая 0.
- например, при $l = 1$ число m принимает 3 значения: $+1, 0, -1$,
- поэтому существуют 3 типа р-АО: p_x, p_y, p_z .

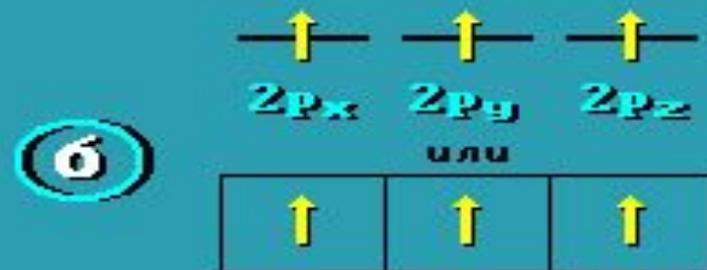
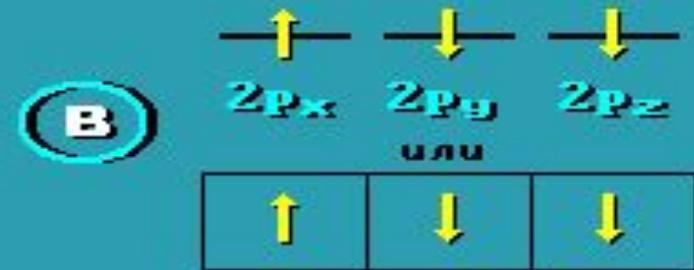
Квантовые числа

- **Спиновое квантовое число s** может принимать лишь два возможных значения $+1/2$ и $-1/2$.
- Они соответствуют двум возможным и противоположным друг другу направлениям собственного магнитного момента электрона

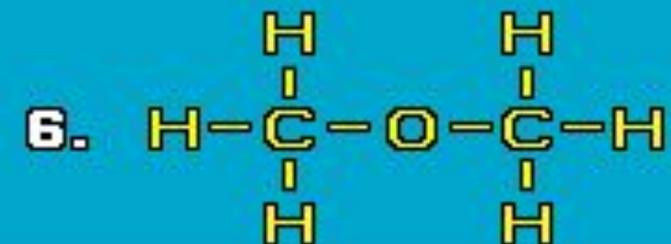
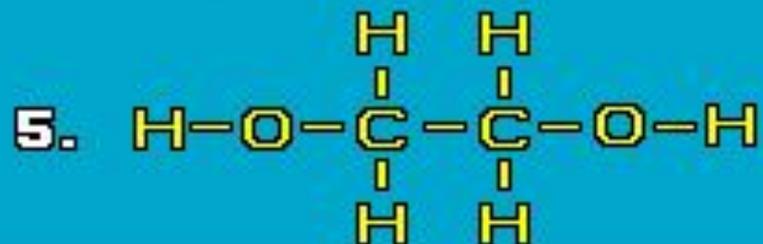
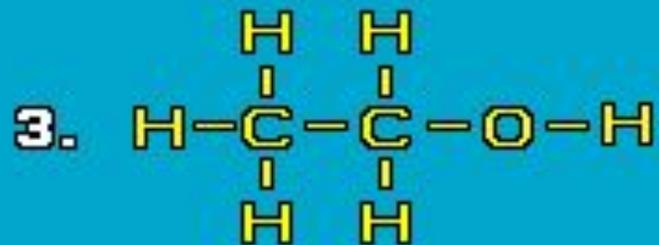
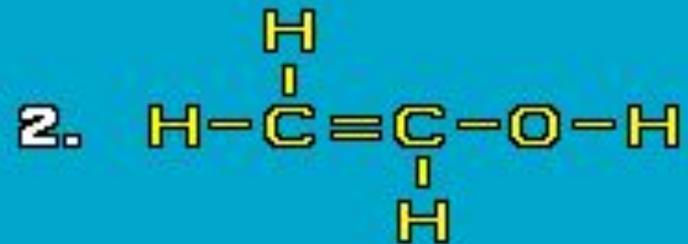
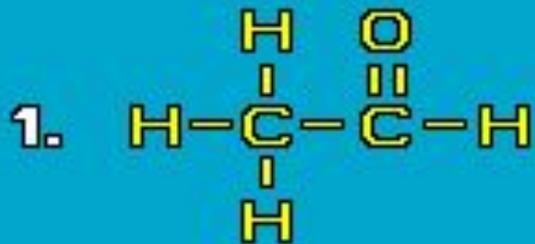
Укажите типы орбиталей



Неправильное заполнение атомных орбиталей электронами выражено схемой:



Какие из представленных на рисунке соединений являются изомерами?



Какое из положений теории А.М. Бутлерова объясняет различие в реакциях соединений одинакового состава:



$\text{CH}_3\text{-O-CH}_3 + \text{Na}$ — реакция не идет

1. Атомы в молекулах соединены друг с другом в определенной последовательности согласно их валентностям. Последовательность межатомных связей в молекуле называется ее химическим строением и отражается одной структурной формулой (формулой строения).
2. Химическое строение можно устанавливать химическими методами.
3. Свойства веществ зависят от их химического строения.
4. По свойствам данного вещества можно определить строение его молекулы, а по строению молекулы - предвидеть свойства.
5. Атомы и группы атомов в молекуле оказывают взаимное влияние друг на друга

Контрольные вопросы

1. . В теорию химического строения органических веществ в XIXв. не входило положение

- о валентном состоянии углерода
- о зависимости свойств веществ от качественного и количественного состава
- об оптической изомерии
- о зависимости свойств веществ от порядка соединения атомов в молекуле

2. . Свойства каждого атома в молекуле органического вещества зависят

- только от его природы
- от его природы и его окружения
- только от его ковалентности
- от его валентности и атомной массы

Контрольные вопросы

3. . Согласно теории химического строения свойства веществ зависят

- только от их количественного и качественного состава
- только от ковалентности элементов в молекуле
- от наличия функциональных групп в молекуле и агрегатного состояния вещества
- от количественного, качественного состава и химического строения вещества

4. Какое положение теории А.М. Бутлерова объясняет существование неидентичных веществ с одинаковым составом?

- Ответ:** атомы в молекулах соединены друг с другом в определенной последовательности согласно их валентности.
- Ответ:** химическое строение можно устанавливать химическими методами.
- Ответ:** свойства веществ зависят от их химического строения и взаимного влияния атомов в молекуле.
- Ответ:** по свойствам данного вещества можно определить строение его молекулы, а по строению молекулы – предсказать свойства.

Контрольные вопросы

5. Теория химического строения органических соединений А.М.Бутлерова стала отправной точкой для развития

- 1) физической химии
- 2) аналитической химии
- 3) стереохимии
- 4) геохимии

6. Изомерами называются . . .

-  **Ответ:** вещества, имеющие сходное строение и сходные химические свойства, но разный количественный состав
-  **Ответ:** вещества, имеющие одинаковый качественный состав, но различные свойства
-  **Ответ:** вещества, имеющие одинаковый качественный и количественный состав, но различное строение молекул
-  **Ответ:** вещества, молекулы которых содержат одинаковое количество атомов углерода, но разное количество атомов других элементов

