

Классификация и номенклатура органических соединений

Лекция №1

Предмет органической химии

- **Органическая химия** – это химия соединений углерода с другими элементами (Ф.А. Кекуле, середина XIX в.).
- **Органическая химия** – это химия углеводородов и их производных (К. Шорлеммер, 1889 г.).
- **Органогены** – это химические элементы, входящие в состав молекул органических соединений (C, H, N, P, O, S).

Причины выделения органической химии в отдельную науку

- ✓ **четырёхвалентность атома углерода;**
- ✓ **способность атомов углерода образовывать длинные цепи и кольца;**
- ✓ **способность атомов углерода образовывать устойчивые химические связи с другими атомами элементов-органогенов;**
- ✓ **из всех элементов периодической системы именно атом углерода играет главную и определяющую роль в биологическом мире.**

Особенности органических соединений

↓

Низкая полярность
ковалентных связей

↓

Низкая реакционная
способность молекул

↓

Необратимость
большинства
химических реакций

↓

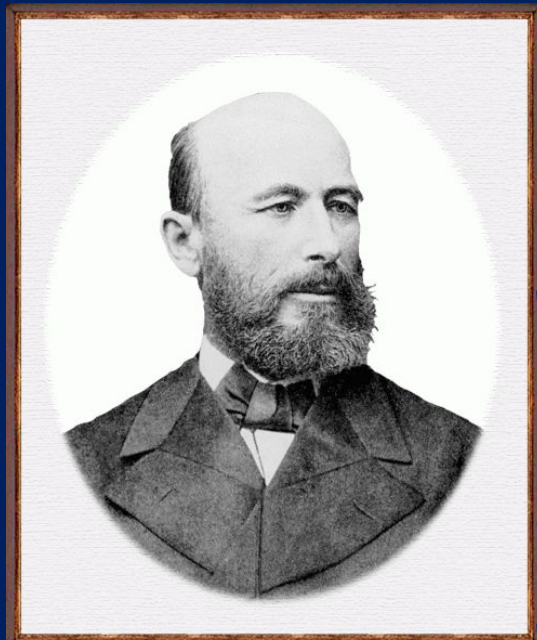
Явление изомерии

↓

Неограниченная
сложность и бесконечное
многообразие молекул

Основные положения теории химического строения органических соединений

А.М. Бутлерова



Атомы в молекулах органических соединений связаны друг с другом химическими связями в соответствии с их валентностью.

Свойства органических соединений зависят не только от числа и природы входящих в их состав атомов, но и от химического строения молекул;

В молекулах органических соединений существует взаимное влияние атомов как связанных, так и непосредственно друг с другом не связанных.

Изомерия органических соединений

Изомеры - это соединения, имеющие одинаковый состав, но отличающиеся последовательностью соединения атомов в молекуле или расположением их в пространстве, и поэтому обладающие различными свойствами.

Классификация изомеров

ИЗОМЕРЫ

```
graph TD; A[ИЗОМЕРЫ] --> B[Структурные]; A --> C[Пространственные]; B --> D[Изомеры углеродного скелета]; B --> E[Изомеры положения кратных связей и функциональных групп]; B --> F[Изомеры функциональных групп]; C --> G[Геометрические]; C --> H[Оптические];
```

Структурные

Изомеры углеродного скелета

Изомеры положения кратных связей и функциональных групп

Изомеры функциональных групп

Пространственные

Геометрические

Оптические

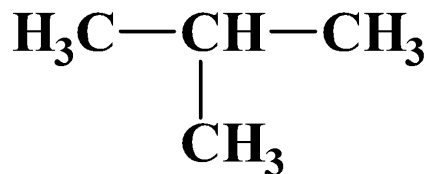
Признаки классификации органических соединений

- **Строение углеродного скелета молекулы;**
- **Наличие в молекуле функциональных групп.**

Классификация по строению

углеродного скелета

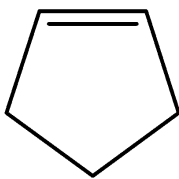
Ациклические



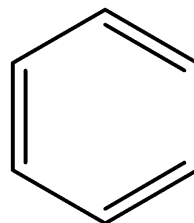
2-метилпропан



Карбоциклические

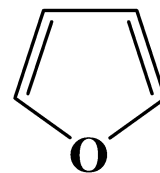


циклопентен

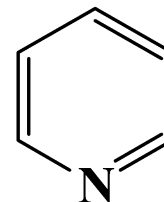


бензол

Гетероциклические



фуран



пиридин

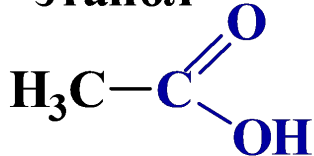
Функциональная группа – это атом или группа атомов, определяющие химические свойства соединения и принадлежность его к определенному классу.

Классификация по наличию функциональных групп

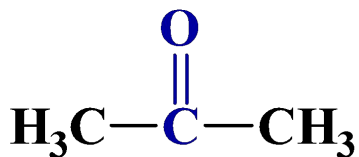
Монофункциональные



этанол



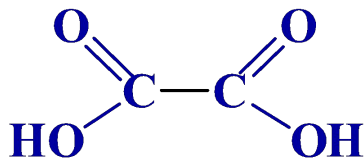
уксусная кислота



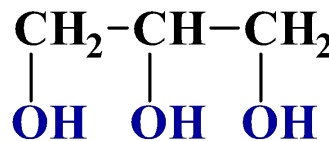
ацетон

Гетерофункциональные

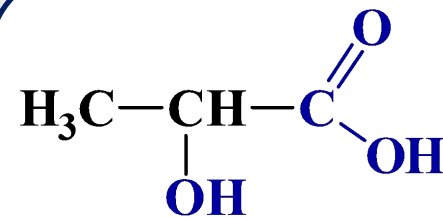
Полифункциональные



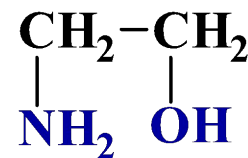
щавелевая
кислота



глицерин



молочная кислота



коламин

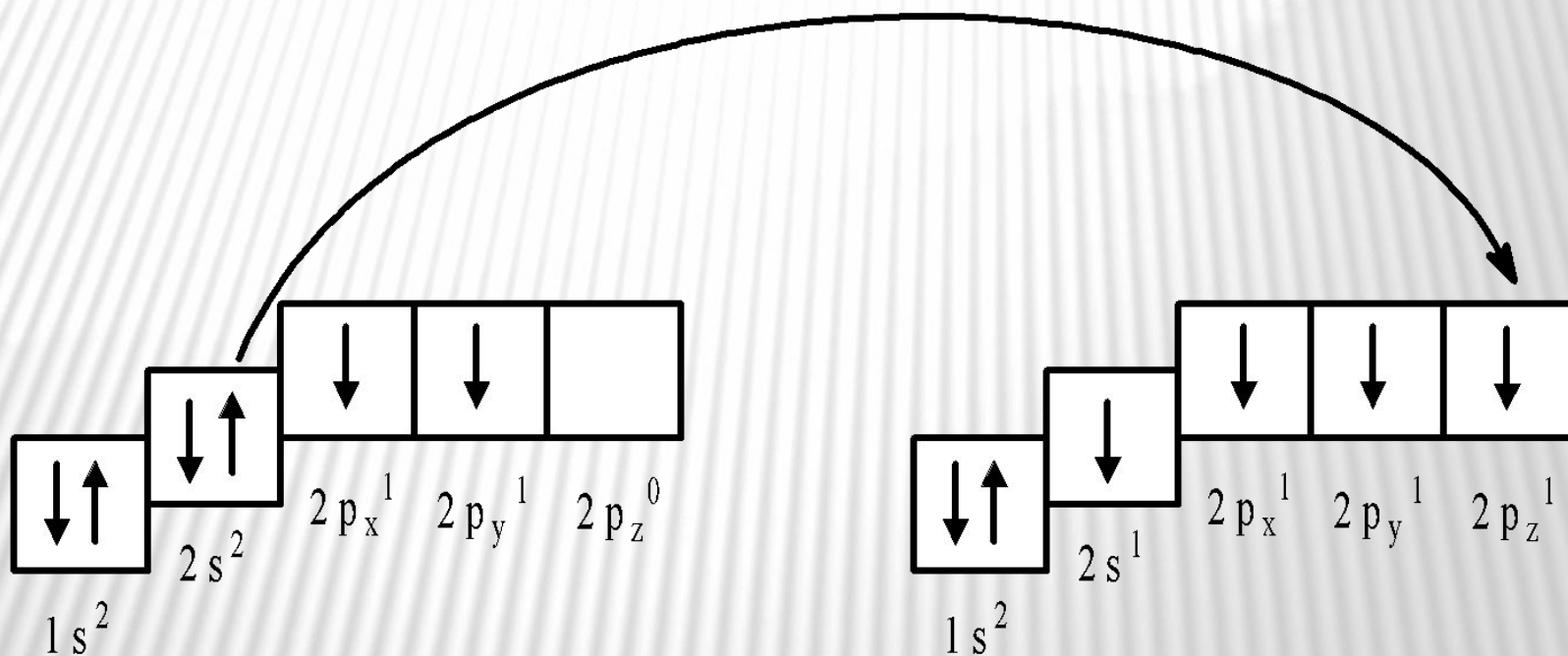
Номенклатура органических соединений

Номенклатура – это система терминов, обозначающих строение веществ и пространственное расположение атомов в их молекулах.

- тривиальная номенклатура
- радикально-функциональная номенклатура
- заместительная номенклатура ИЮПАК

Химические связи и взаимное влияние атомов в органических соединениях

Электронная структура атома углерода в органических соединениях

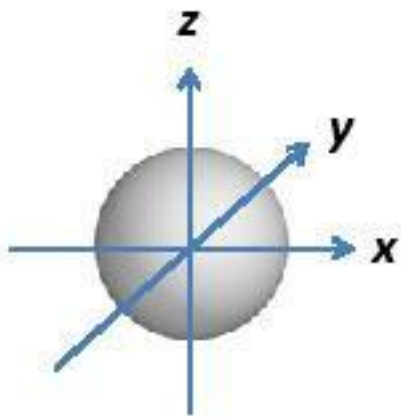


основное состояние

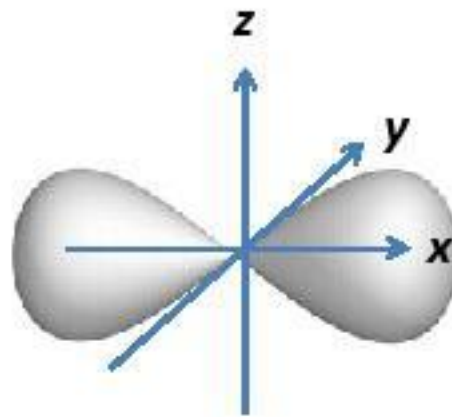
возбужденное состояние

Строение атомных орбиталей

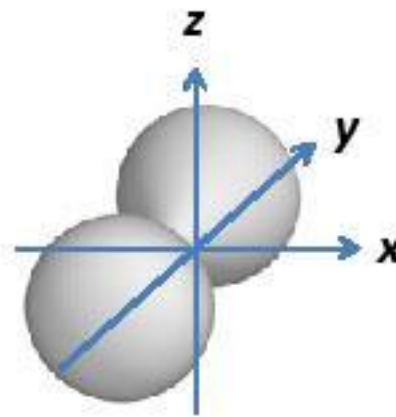
Атомная орбиталь - это часть пространства, в которой вероятность нахождения электрона максимальна.



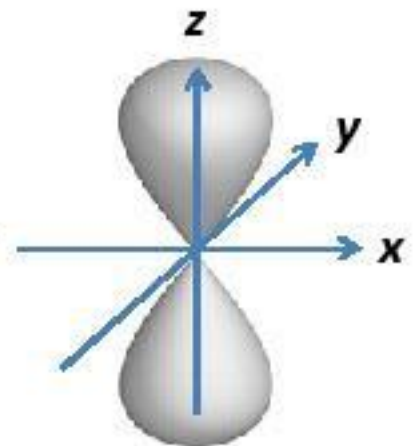
s



p_x



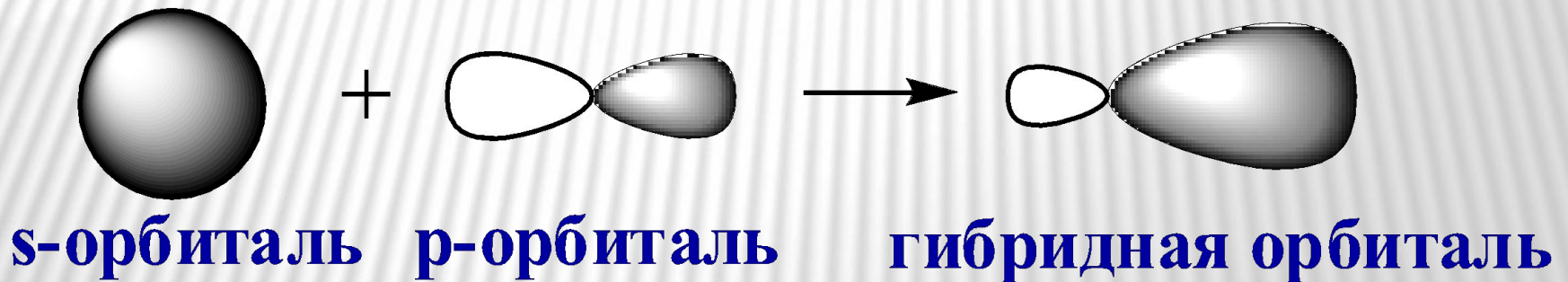
p_y



p_z

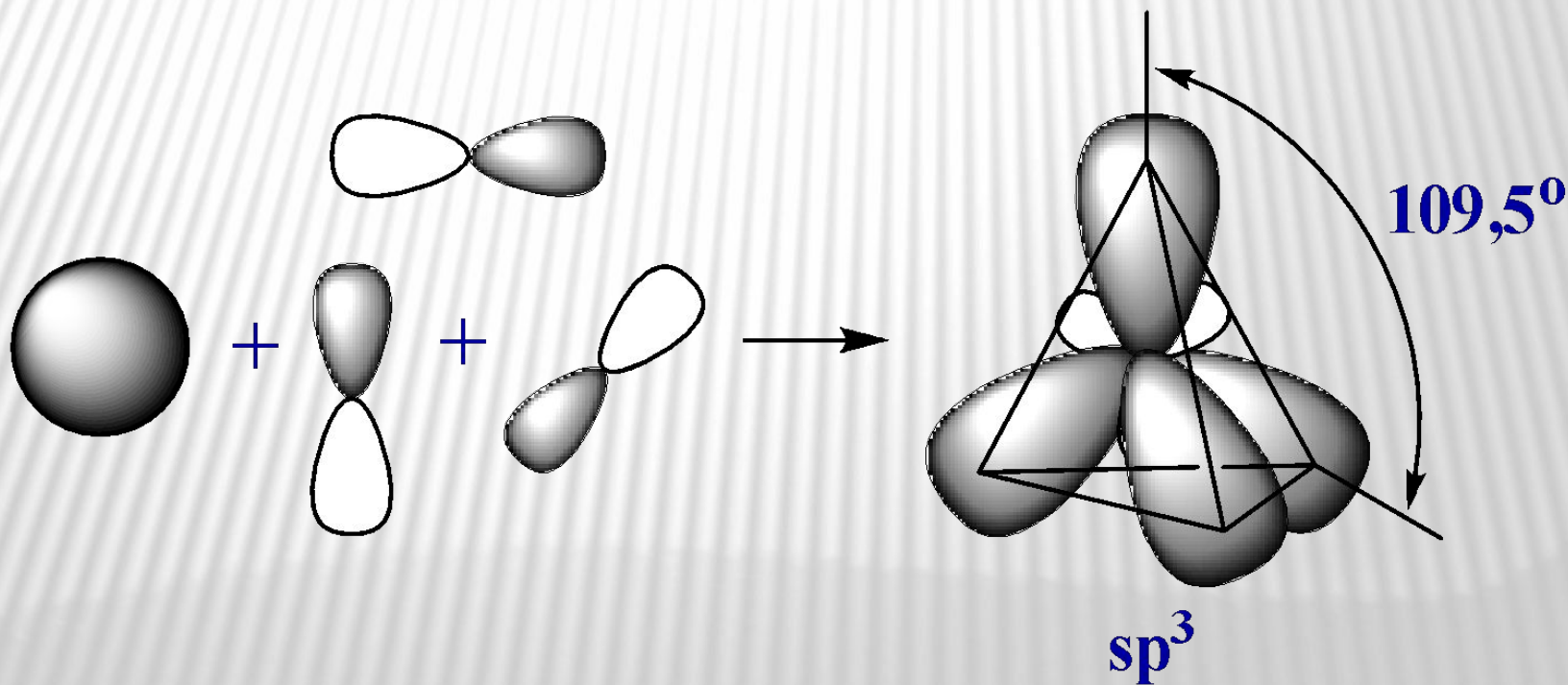
Гибридизация атомных орбиталей

Гибридизация – это процесс выравнивания атомных орбиталей по форме и энергии.



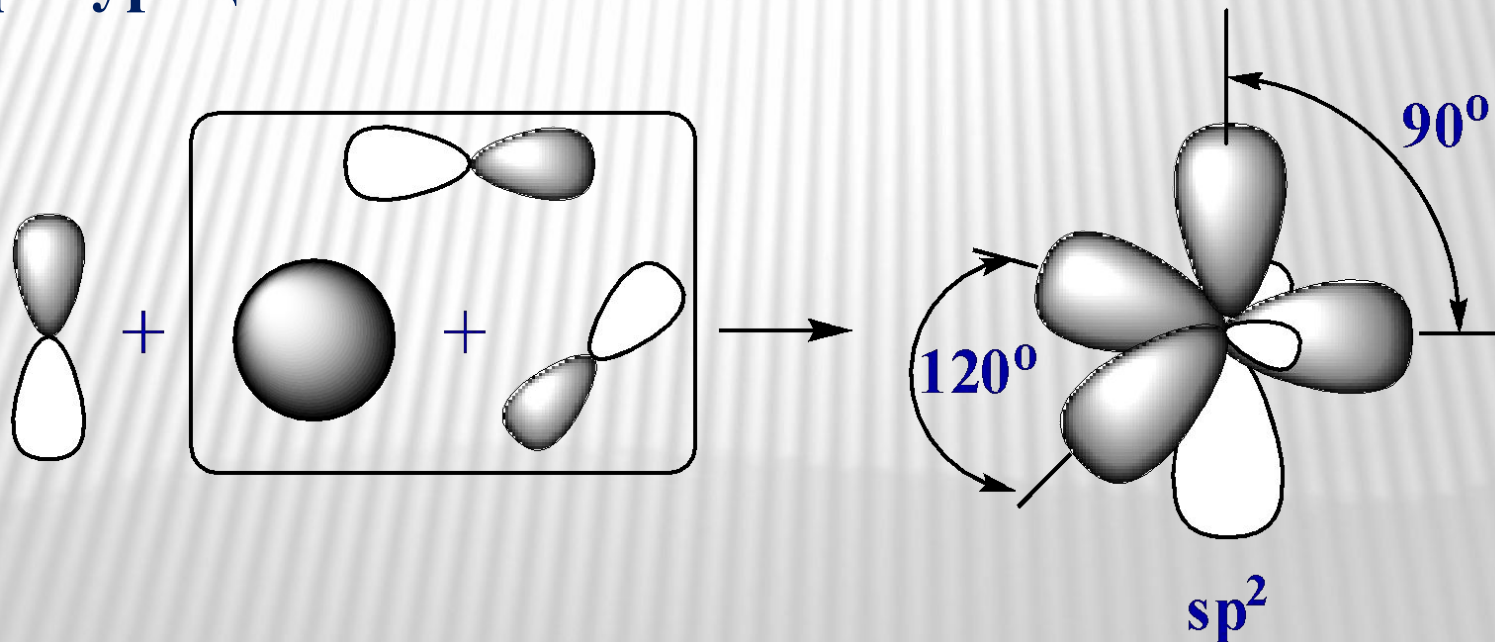
sp^3 -Гибридизация

Происходит смешение одной 2s- и трех 2p-орбиталей. Характерна для атомов углерода в насыщенных углеводородах. Атом углерода в состоянии sp^3 -гибридизации имеет *тетраэдрическую* конфигурацию.



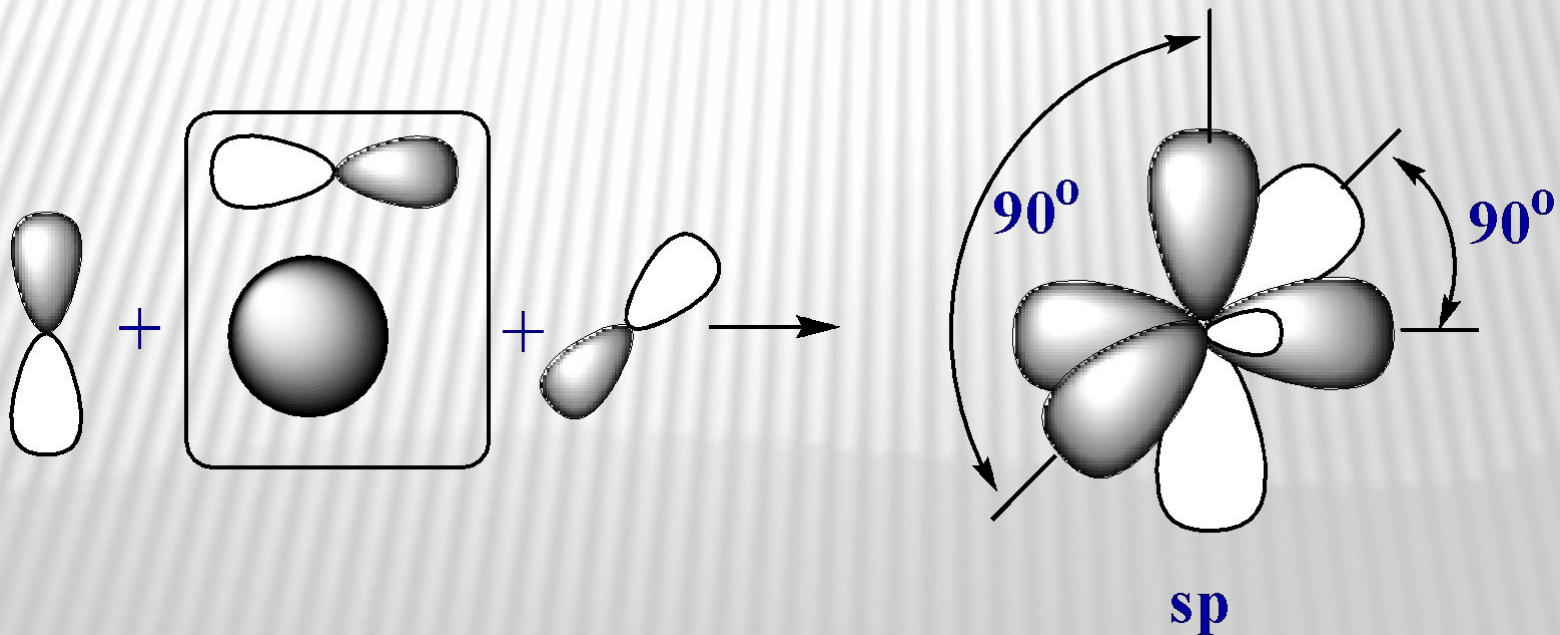
sp^2 -Гибридизация

Происходит смешение одной $2s$ - и двух $2p$ -орбиталей. Одна $2p$ -орбиталь остается негибридизованной. Такая гибридизация характерна для атомов углерода в соединениях, имеющих двойную связь. Атом углерода в состоянии sp^2 -гибридизации имеет *тригональную* конфигурацию.



sp-Гибридизация

Происходит смешение одной $2s$ - и одной $2p$ -орбиталей. Две $2p$ -орбитали остаются негибридованными. Такая гибридизация характерна для атомов углерода в соединениях, имеющих тройную связь. Атом углерода в состоянии sp -гибридизации имеет *линейную* конфигурацию.



Химическая связь в органических молекулах

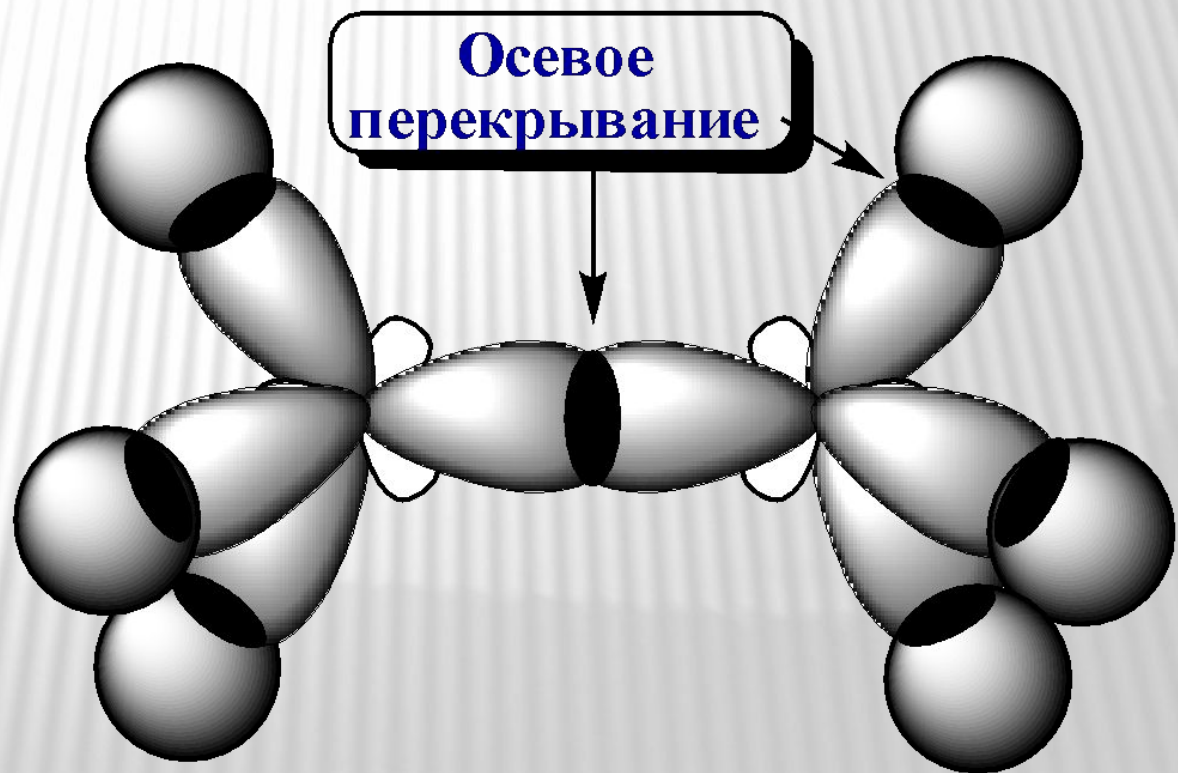
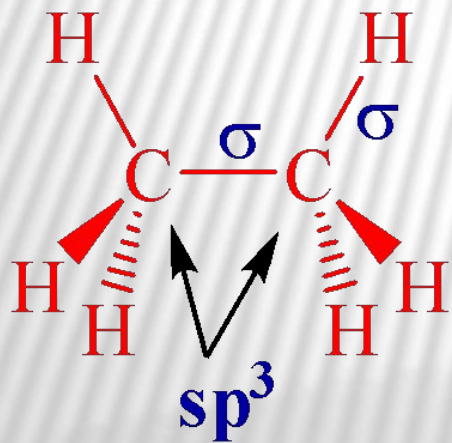
В органических соединениях преимущественно встречаются **ковалентные связи** – химические связи, образованные в результате обобществления электронов связываемых атомов.

Ковалентные связи бывают двух видов:

- **σ - связи;**
- **π - связи.**

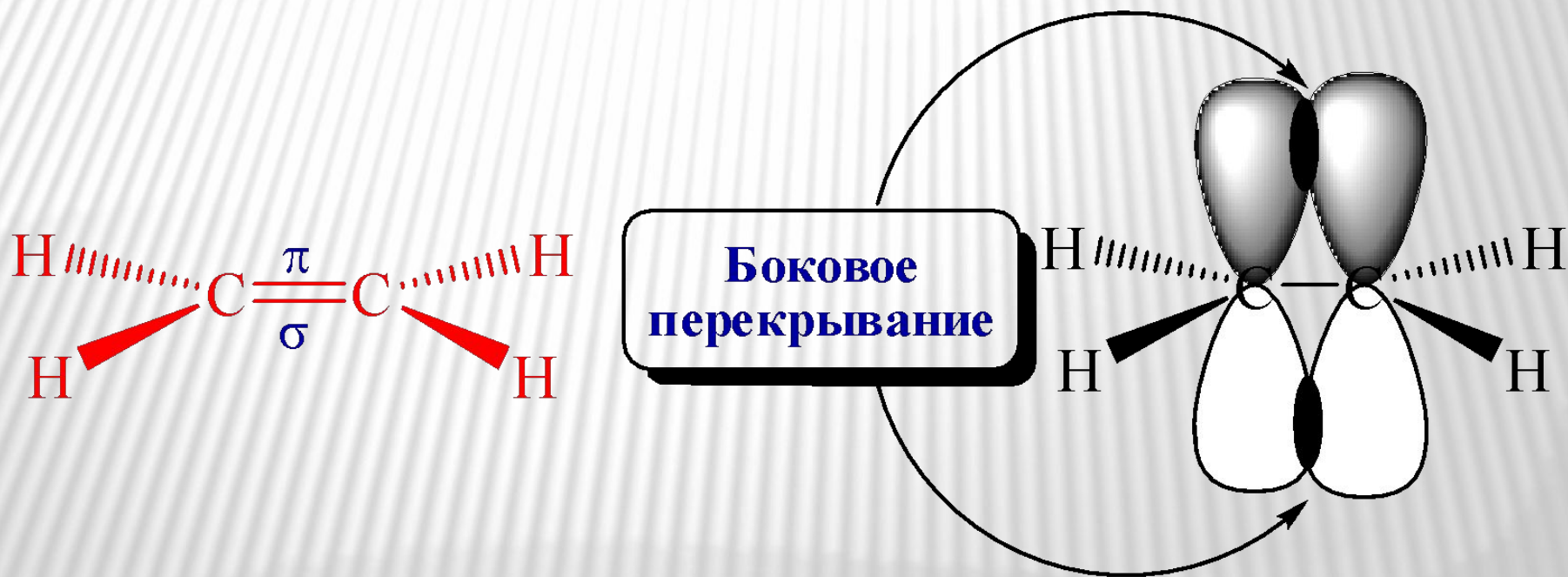
σ-СВЯЗЬ

Образуется при перекрывании атомных орбиталей по прямой (оси), соединяющей ядра двух связываемых атомов.

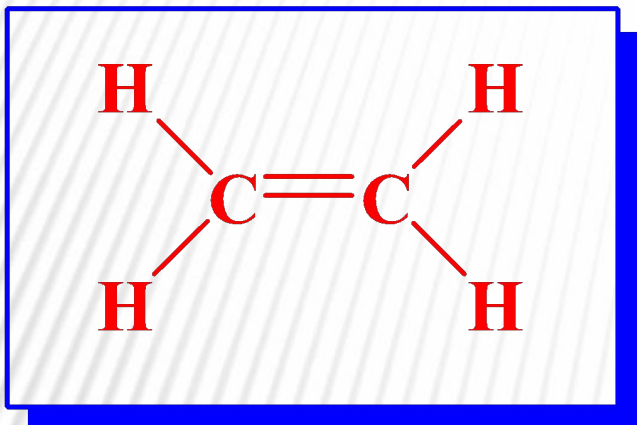


π -СВЯЗЬ

Образуется при боковом перекрывании негибридизированных p-орбиталей.



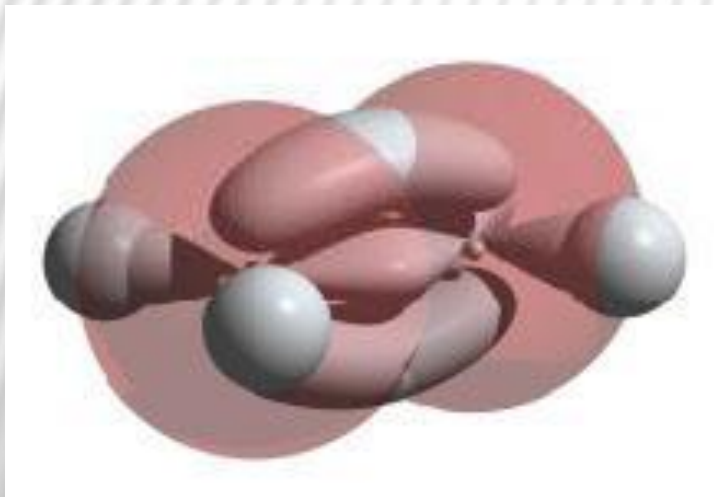
Химические связи в молекуле этилена



Структурная формула



Шаростержневая
модель

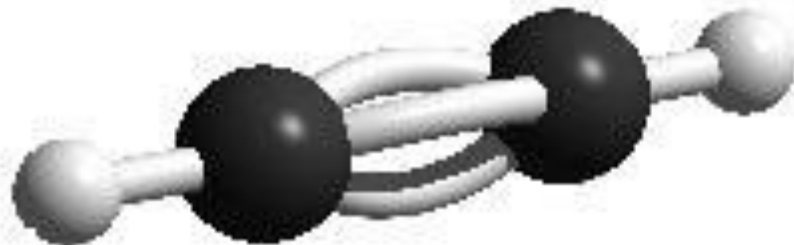
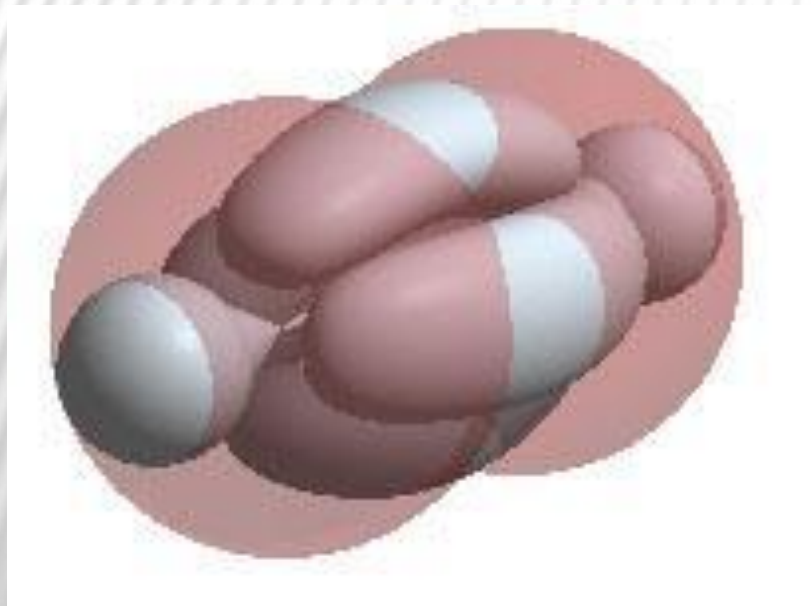


Пространственная
конфигурация
σ- и π-связей

Химические связи в молекуле ацетилена



Структурная формула



Шаростержневая
модель

Пространственная
конфигурация
 σ - и π -связей

Основные характеристики ковалентной связи

Энергия связи – теплота, выделяющаяся при образовании связи или затрачиваемая на ее разрыв.

Длина связи – расстояние между центрами связанных атомов.

Тип связи	Энергия связи, кДж/моль	Длина связи, нм
C–C	348	0,154
C=C	620	0,134
C≡C	814	0,120

Полярность ковалентной связи

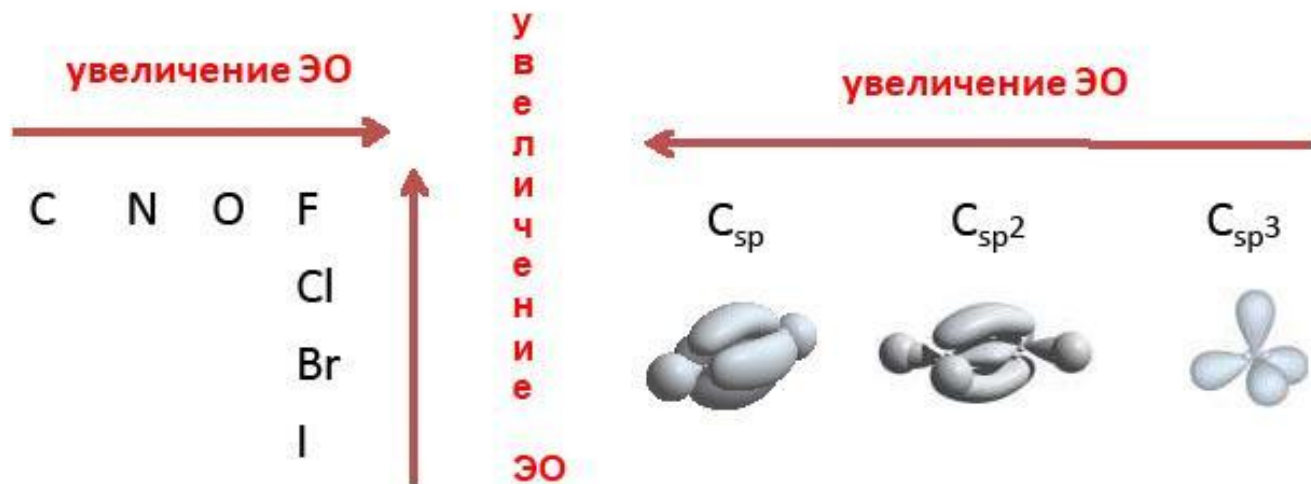
Электроотрицательность – это способность атома в молекуле притягивать электроны, участвующие в образовании химической связи.



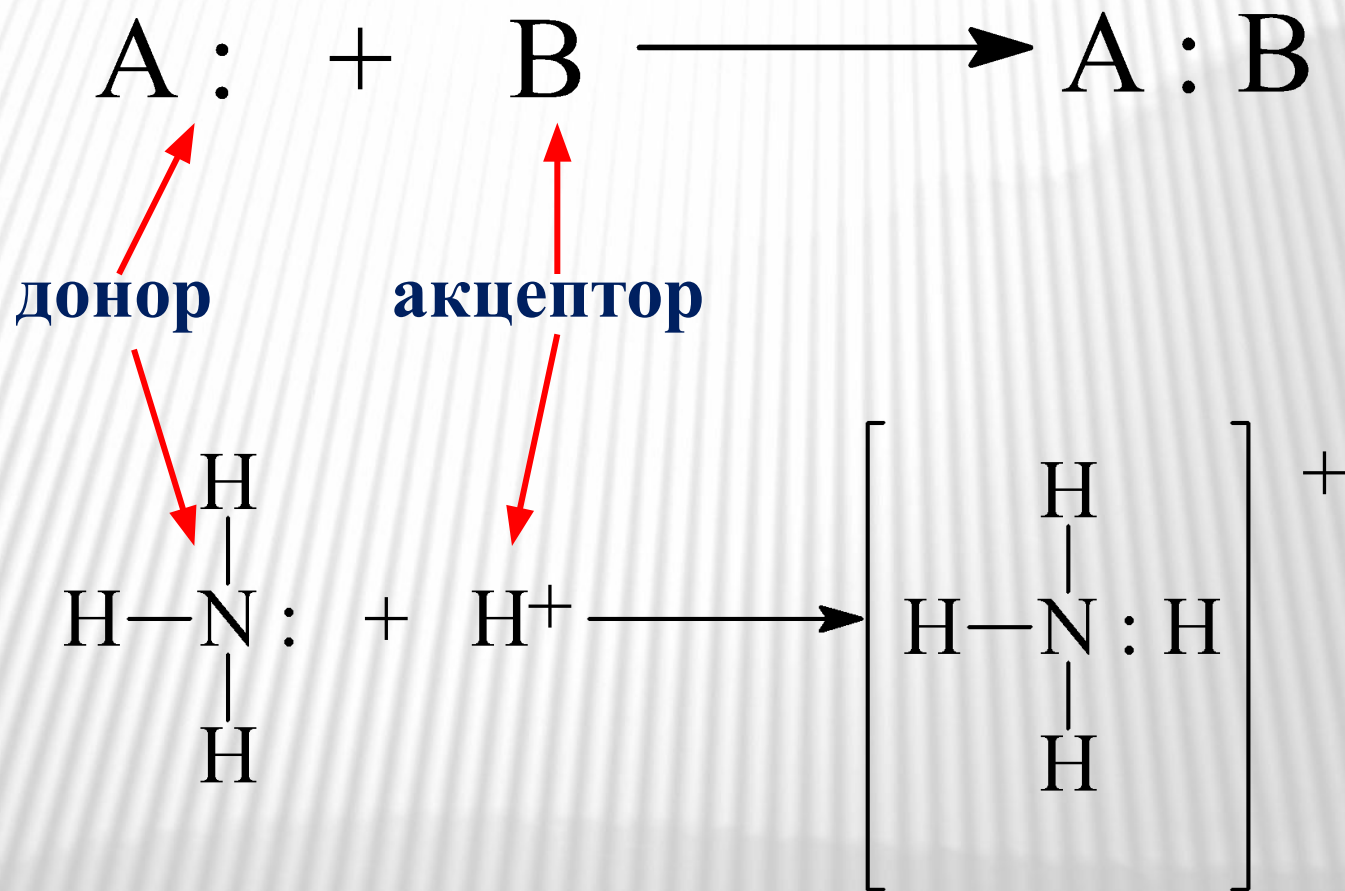
Лайнус
Полинг

ШКАЛА ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТИ ПОЛИНГА

Na	Li	H	S	C _{sp³}	I	Br	C _{sp²}	Cl	C _{sp}	O	F
0.9	1.0	2.1	2.5	2.5	2.6	2.8	2.8	3.0	3.1	3.5	4.0



Донорно-акцепторный механизм образования ковалентной связи



Водородная связь

Характерна для органических соединений, имеющих атомы водорода, связанные с сильно электроотрицательными атомами (фтора, азота, кислорода).



Энергия водородной связи — 12,5 - 20 кДж/моль

Сопряжение

Локализованная связь – это ковалентная связь, электронная пара которой находится в поле двух ядер и охватывает только два атома.

Делокализованная связь – это ковалентная связь, молекулярные орбитали которой охватывают более двух атомов.

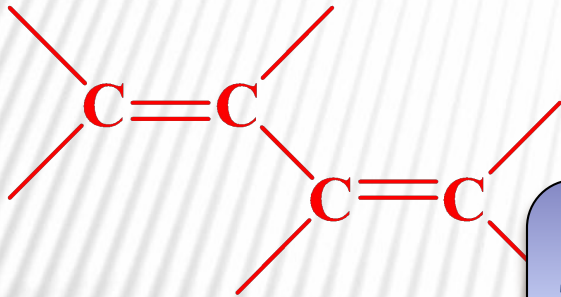
Сопряжение – это образование в молекуле единого делокализованного электронного облака в результате перекрывания *p*-орбиталей.

Условия, необходимые для образования сопряженных систем

- Все атомы, участвующие в образовании сопряженной системы, находятся в sp^2 -гибридизации;
- p_z -орбитали всех атомов, образующих сопряженную систему, перпендикулярны плоскости σ -скелета, т. е. параллельны друг другу.

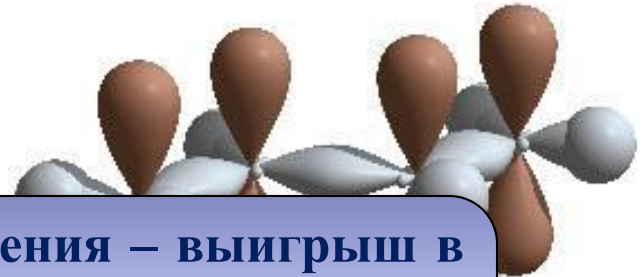
π,π-Сопряжение

Наблюдается при чередовании в системе простых и кратных связей.

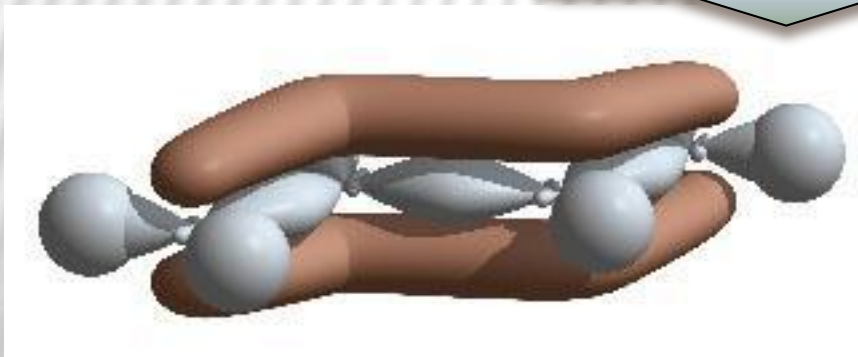


бутадиен-1,3

Энергия сопряжения – выигрыш в энергии, получаемый за счет сопряжения; для бутадиена-1,3 составляет 15 кДж/моль.



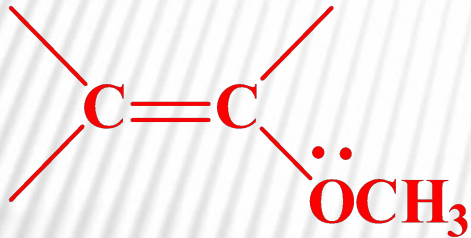
структура



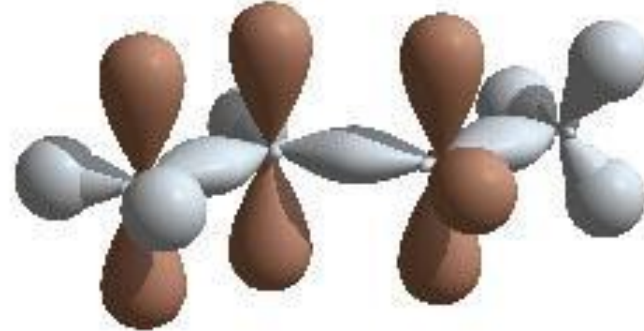
Выравнивание связей и зарядов за счет сопряжения

р,π-Сопряжение

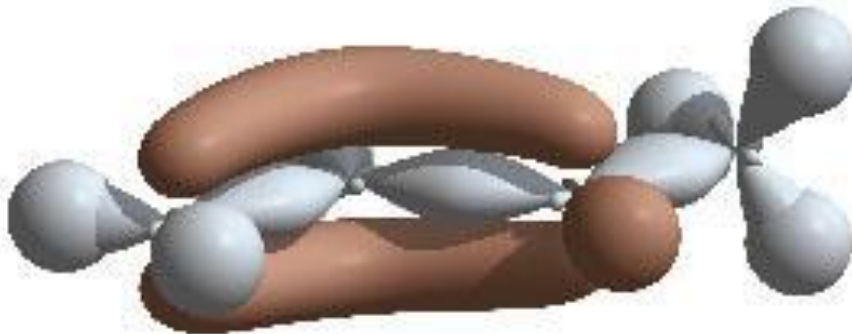
Наблюдается при взаимодействии кратной связи с расположенной по соседству *p* орбиталью.



Метилвиниловый эфир



Гипотетическая структура



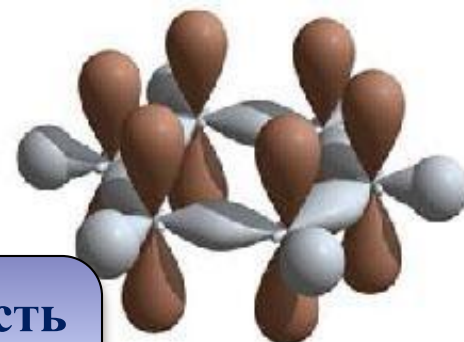
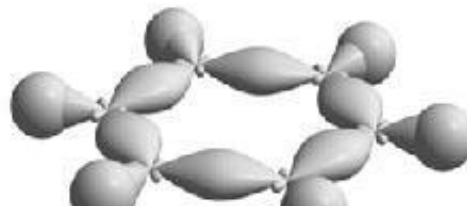
Выравнивание связей и зарядов за счет сопряжения

Ароматичность

Это особое свойство некоторых химических соединений, благодаря которому сопряженное кольцо ненасыщенных связей проявляет аномально высокую стабильность; большую чем ту, которую можно было бы ожидать только при одном сопряжении.



бензол



Термодинамическая стабильность бензола (его энергия сопряжения) составляет 151 кДж/моль.

структуры

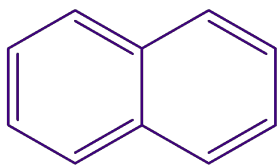


Выравнивание связей и зарядов

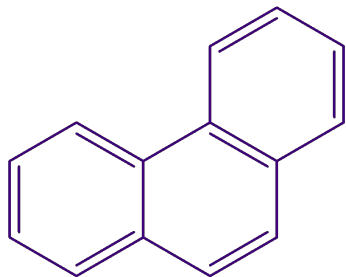
Типы ароматических систем

Ароматические соединения

бензоидные

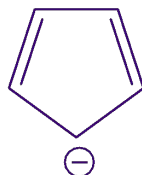


нафталин



фенантрен

небензоидные

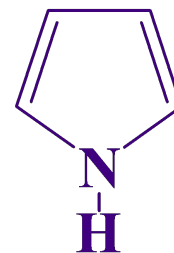


циклопентадиенильный
анион

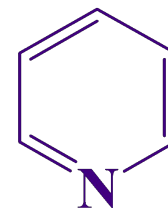


циклопропенильный
катион

гетероциклические



пиррол



пиридин

Критерии ароматичности

Наличие плоского цикла

Наличие замкнутой системы сопряжения

Выполнение правила Хюккеля: $N = 4n + 2$,
где N – число π – электронов,
участвующих в сопряжении; n – целое
число, $n = 0, 1, 2, 3$

Взаимное влияние атомов в молекуле

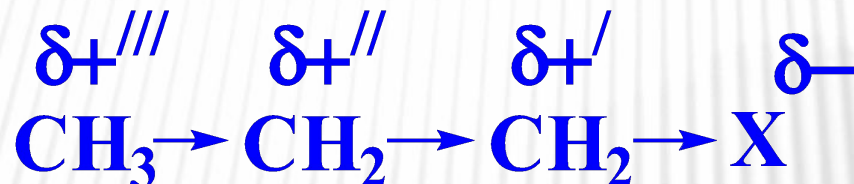
Взаимное влияние атомов в молекулах передается с помощью *электронных и пространственных эффектов*:

- ✓ *Индуктивный эффект*
- ✓ *Эффект поля*
- ✓ *Мезомерный эффект*

Индуктивный эффект

Индуктивный эффект (I) – передача электронного влияния заместителя в результате смещения электронов σ -связей.

- ✓ присутствует в любой полярной молекуле;
- ✓ является затухающим (распространяется не более чем на три связи).



-I-эффект



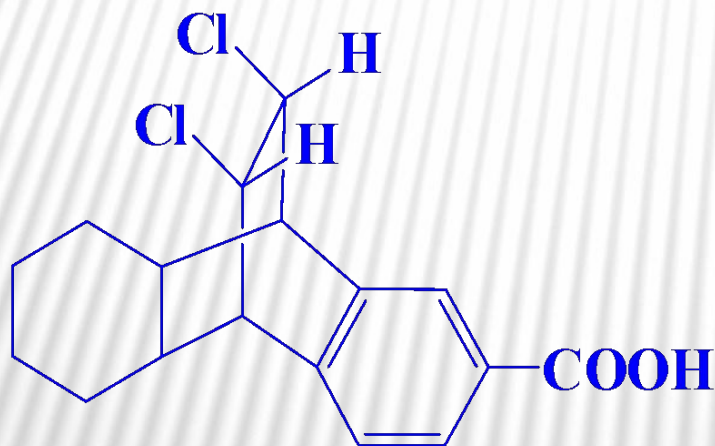
+I-эффект

Заместитель, притягивающий электронную плотность σ -связи сильнее, чем атом водорода, проявляет **отрицательный индуктивный эффект (-I)**.

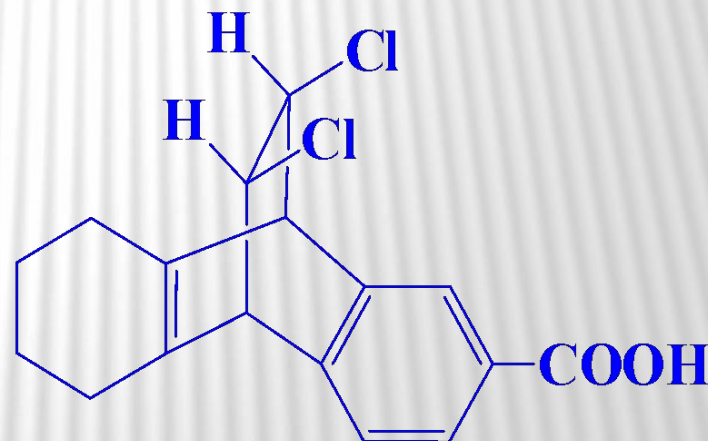
Заместитель, смещающий электронную плотность σ -связи от себя, проявляет **положительный индуктивный эффект (+I)**.

Эффект поля

Эффект поля – передача электронного влияния заместителя непосредственно через пространство или через молекулы растворителя по механизму диполь-дипольного взаимодействия.



$$pK_a = 6.07$$



$$pK_a = 5.67$$

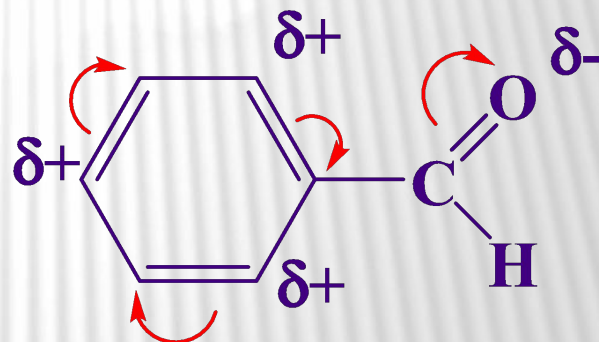
Мезомерный эффект

Мезомерный эффект (M) – передача электронного влияния заместителя по цепи сопряжения.

- ✓ проявляется лишь при наличии сопряженной системы;
- ✓ является незатухающим (распространяется по всей сопряженной системе).



+M-эффект



-M-эффект

Заместитель, повышающий электронную плотность в сопряженной системе, проявляет **положительный мезомерный эффект (+M)**.

Заместитель, понижающий электронную плотность в сопряженной системе, проявляет **отрицательный мезомерный эффект (-M)**.

Электродонорные и электроакцепторные группы

Заместитель	Электронные эффекты		Суммарное электронное влияние заместителя
	индуктивный	мезомерный	
Алкил- (R)	$+I$	-	электродонор
$-\text{NH}_2, -\text{NHR}, -\text{NR}_2,$ $-\text{OH}, -\text{OR}$	$-I$	$+M$	$+M > -I$ электродонор
Галогены	$-I$	$+M$	$-I > +M$ электроакцептор
$-\text{NO}_2, -\text{COOH},$ $-\text{CN}, -\text{SO}_3\text{H}, >\text{C}=\text{O}$	$-I$	$-M$	электроакцептор