

# ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ



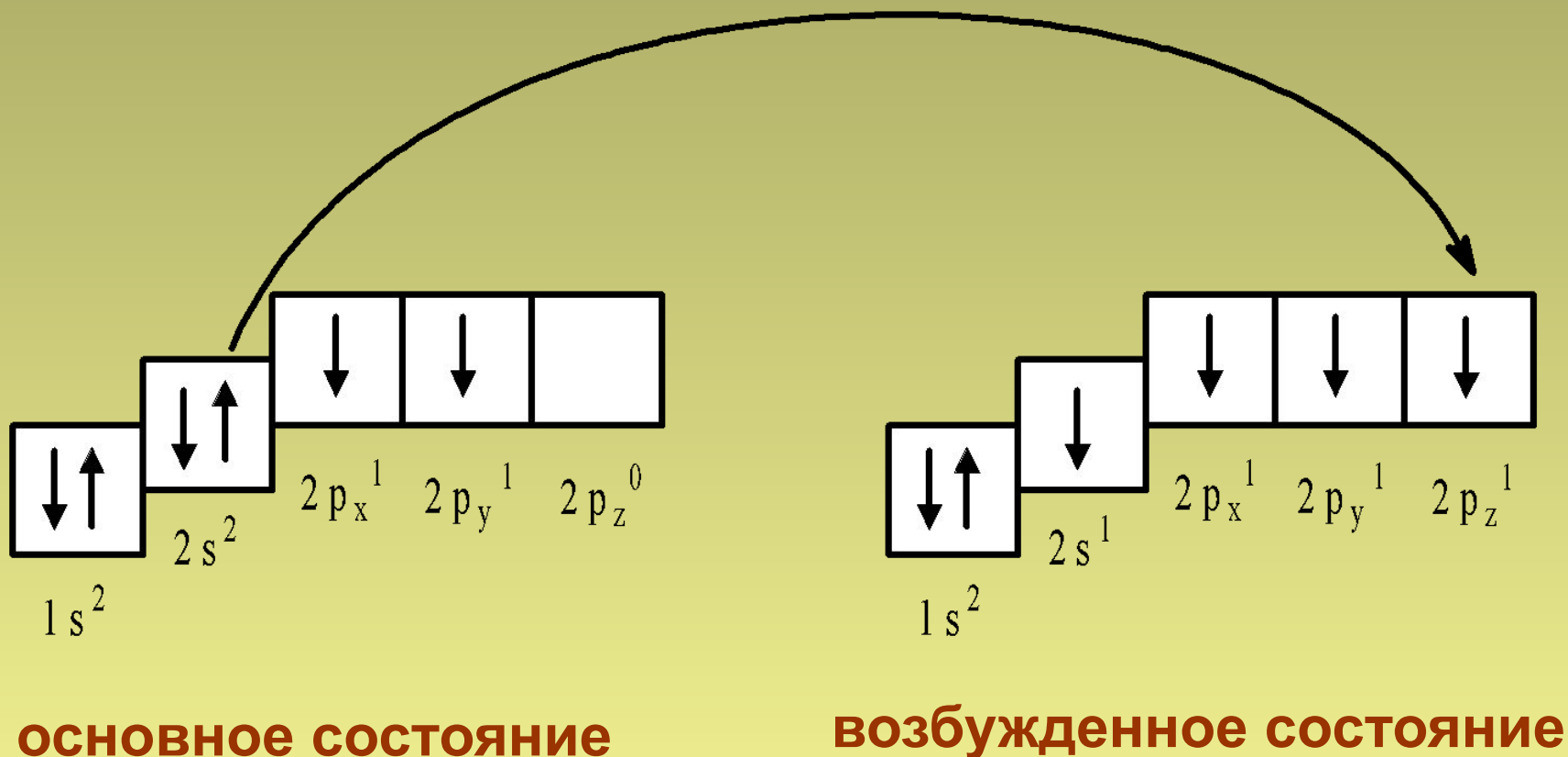
## Часть II

# Электронная структура атома углерода в органических соединениях

ГРУППА ПЕРИОД		ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА																
		A I B		A II B			B III A		B IV A		B V A		B VI A		B VII A		A VIII B	
1	1s	{H}		A II B		B III A		B IV A		B V A		B VI A		1 H	2 He			
														2,10 1,01 1 0,05	ВОДОРОД 2 0,029	ГЕЛИЙ 4,0		
2	2s 2p	Li 3	Be 4	5 B		6 C		7 N		8 O		9 F		10 Ne				
		6,9 0,97 ЛИТИЙ 0,159	9,0 1,47 БЕРИЛЛИЙ 0,104	2,01 10,8 3 0,078		2,50 12,0 4 0,062		3,07 14,0 5 0,052		3,50 16,0 6 0,045		4,10 19,0 7 0,040		20,2 8 0,035		НЕОН		
3	3s 3p	Na 11	Mg 12	13 Al		14 Si		15 P		16 S		17 Cl		18 Ar				
		23,0 0,93 НАТРИЙ 0,171	24,3 1,23 МАГНИЙ 0,128	3 1,47 27,0 8 0,131		4 1,74 28,1 8 0,107		5 2,1 31,0 8 0,092		6 2,60 32,1 8 0,081		7 2,83 35,5 8 0,073		8 0,066		АРГОН		
4	4s 3d 4p	K 19	Ca 20	Sc 21	Ti 22		V 23		Cr 24		Mn 25		Fe 26		Co 27		Ni 28	
		39,1 0,91 КАЛИЙ 0,216	40,1 1,04 КАЛЬЦИЙ 0,169	45,0 1,20 СКАНДИЙ 0,157	47,9 1,32 ТИТАН 0,148		50,9 1,45 ВАНАДИЙ 0,140		52,0 1,56 ХРОМ 0,145		54,9 1,60 МАРГАНЕЦ 0,128		55,9 1,64 ЖЕЛЕЗО 0,123		58,9 1,70 КОБАЛЬТ 0,118		58,7 1,75 НИКЕЛЬ 0,114	
5	5s 4d 5p	Rb 37	Sr 38	Y 39	Zr 40		Nb 41		Mo 42		Tc 43		Ru 44		Rh 45		Pd 46	
		85,5 0,89 РУБИДИЙ 0,229	87,6 0,99 СТРОНЦИЙ 0,184	88,9 1,11 ИТРИЙ 0,170	91,2 1,22 ЦИРКОНИЙ 0,159		92,9 1,23 НИОБИЙ 0,159		95,9 1,30 МОЛИБДЕН 0,152		[99] 1,36 ТЕХНЕЦИЙ 0,139		101,0 1,42 РУТЕНИЙ 0,141		102,9 1,45 РОДИЙ 0,136		106,4 1,35 ПАЛЛАДИЙ 0,057	
6	6s (4f) 5d 6p	Cs 55	Ba 56	La* 57	Hf 72		Ta 73		W 74		Re 75		Os 76		Ir 77		Pt 78	
		132,9 0,86 ЦЕЗИЙ 0,252	137,3 0,97 БАРИЙ 0,206	138,9 1,08 ЛАНТАН 0,192	178,5 1,23 ГАФНИЙ 0,148		181,0 1,33 ТАНТАЛ 0,141		183,9 1,40 ВОЛЬФРАМ 0,135		186,0 1,46 РЕНИЙ 0,131		190,0 1,52 ОСМИЙ 0,127		192,0 1,55 ИРИДИЙ 0,123		195,1 1,44 ПЛАТИНА 0,122	
7	7s (5f) 6d	Fr 87	Ra 88	Ac** 89	Rf 104		Db 105		Sg 106		Bh 107		Hs 108		Mt 109			
		[223] 0,86 ФРАНЦИЙ 0,245	[226] 0,97 РАДИЙ 0,204	[227] 1,00 АКТИНИЙ 0,190	[261] 32 РЕЗЕРФОРДИЙ 8		[262] 32 ДУБИЙ 8		[263] 32 СИБОРГИЙ 8		[262] 32 БОРИЙ 8		[265] 32 КАССИЙ 8		[266] 32 МЕЙТНЕРИЙ 8			
ВЫСШИЕ ОКСИДЫ		R <sub>2</sub> O		RO		R <sub>2</sub> O <sub>3</sub>		RO <sub>2</sub>		R <sub>2</sub> O <sub>5</sub>		RO <sub>3</sub>		R <sub>2</sub> O <sub>7</sub>		RO <sub>4</sub>		
ЛЕТУЧИЕ ВОДОРОДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ						RH <sub>4</sub>		RH <sub>3</sub>		H <sub>2</sub> R		HR						



# Электронная структура атома углерода в органических соединениях



# Электронная структура атома углерода в органических соединениях

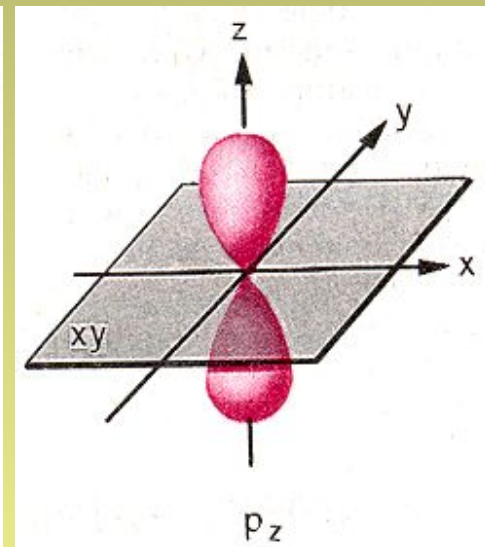
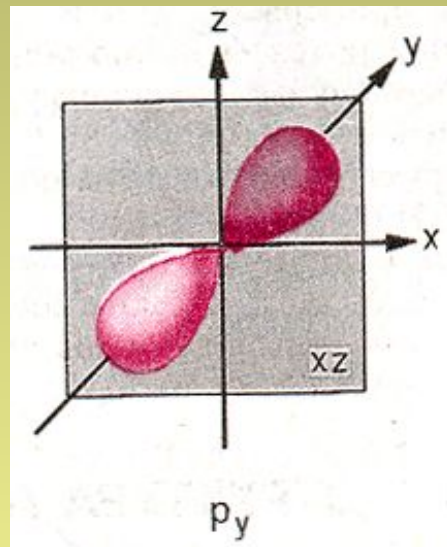
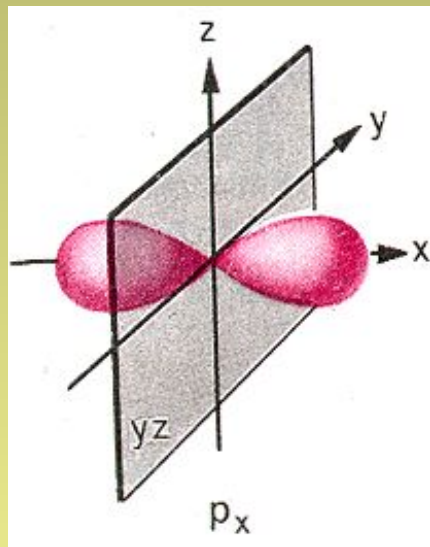
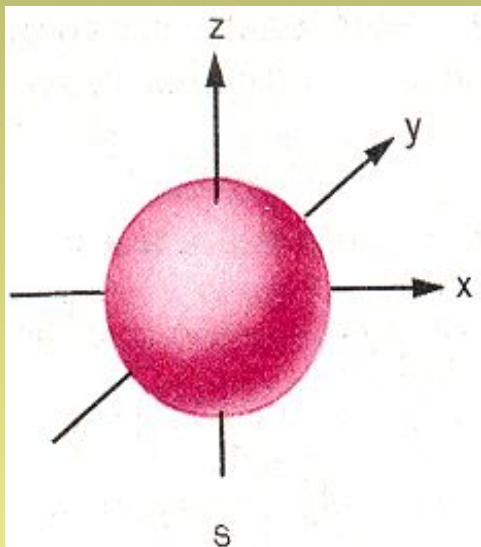
---

---



# Гибридизация

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



# Гибридизация

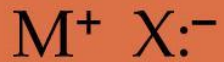
## Гибридные орбитали и характер углеродных атомов

Состояние углеродного атома	Орбитали				Валентное состояние атома углерода	Тип гибридизации и строение молекулы
	$2s$	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$		
Возбужденное, исходное состояние					—	—
Возбужденное, в алканах	$2sp^3$	$2sp^3$	$2sp^3$	$2sp^3$	I	( $sp^3$ ) Тетраэдрическое 
Возбужденное, в алкенах	$2sp^2$	$2sp^2$	$2sp^2$	$2p$	II	( $sp^2$ ) Тригональное (плоскостное) 
Возбужденное, в алкинах	$2sp$	$2sp$	$2p$	$2p$	III	( $sp$ ) Дигональное (линейное) 

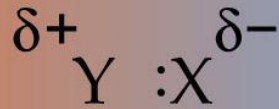
# Типы химической связи

---

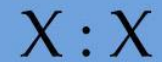
---



**Ионная связь**  
(полные заряды)



**Ковалентная полярная связь**  
(частичные заряды)

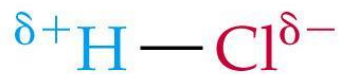
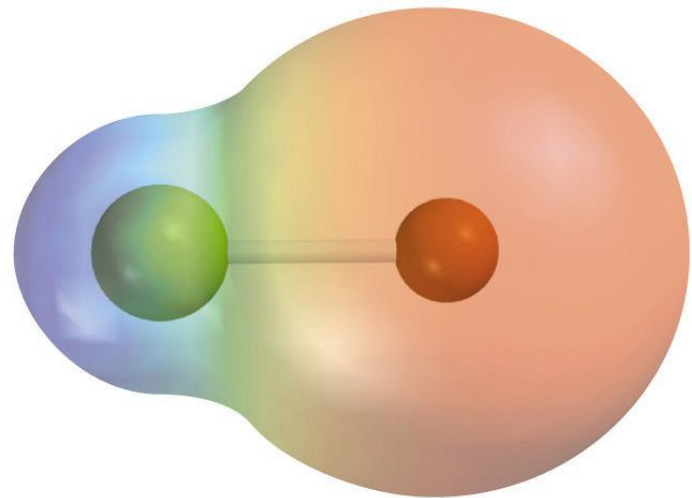


**Неполярная ковалентная связь**

# Типы химической связи

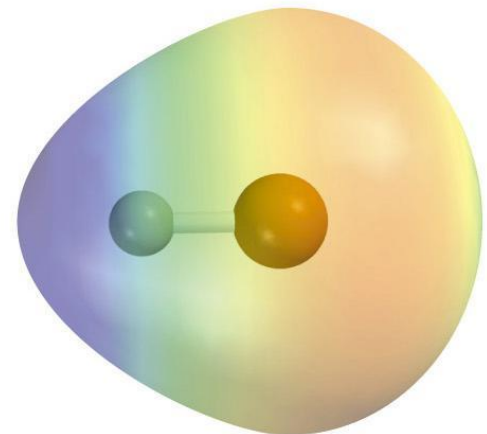


Ионная связь



Ковалентная полярная связь

Пара электронов смещена  
в сторону атома хлора



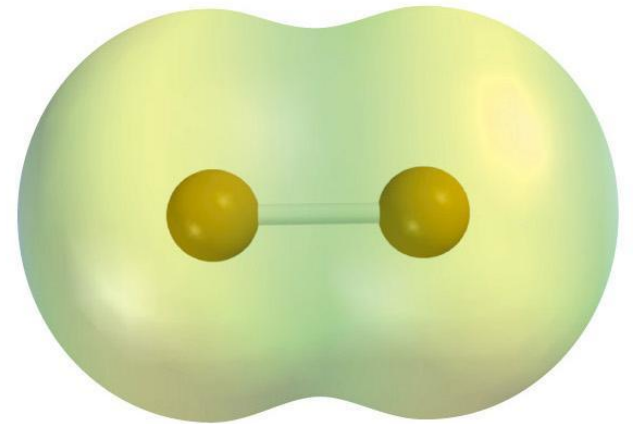


# Типы химической связи

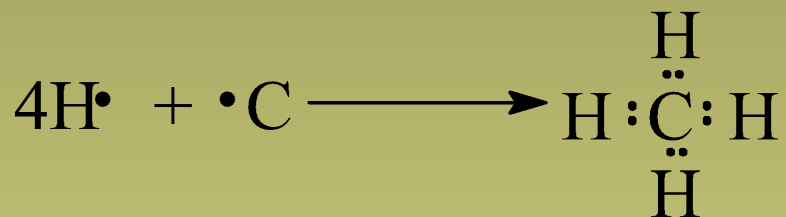
---



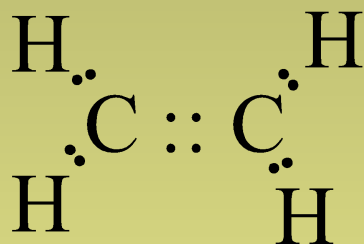
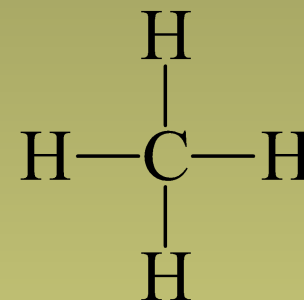
Ковалентная неполярная связь



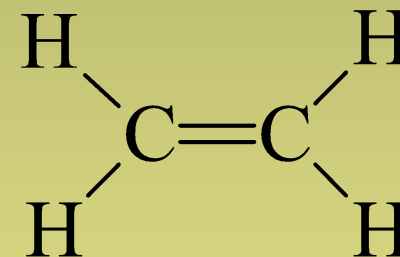
# Типы химической связи



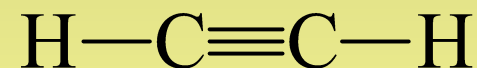
**метан**



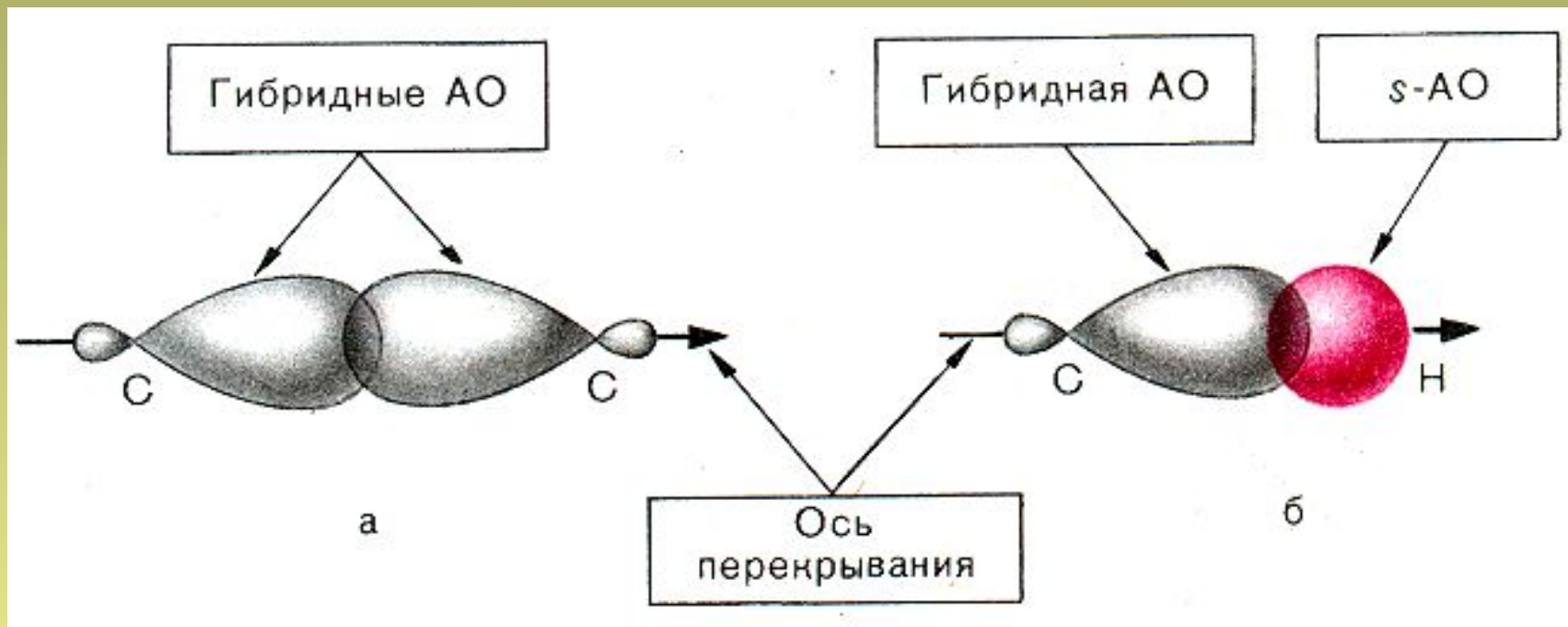
**этилен**



**ацетилен**

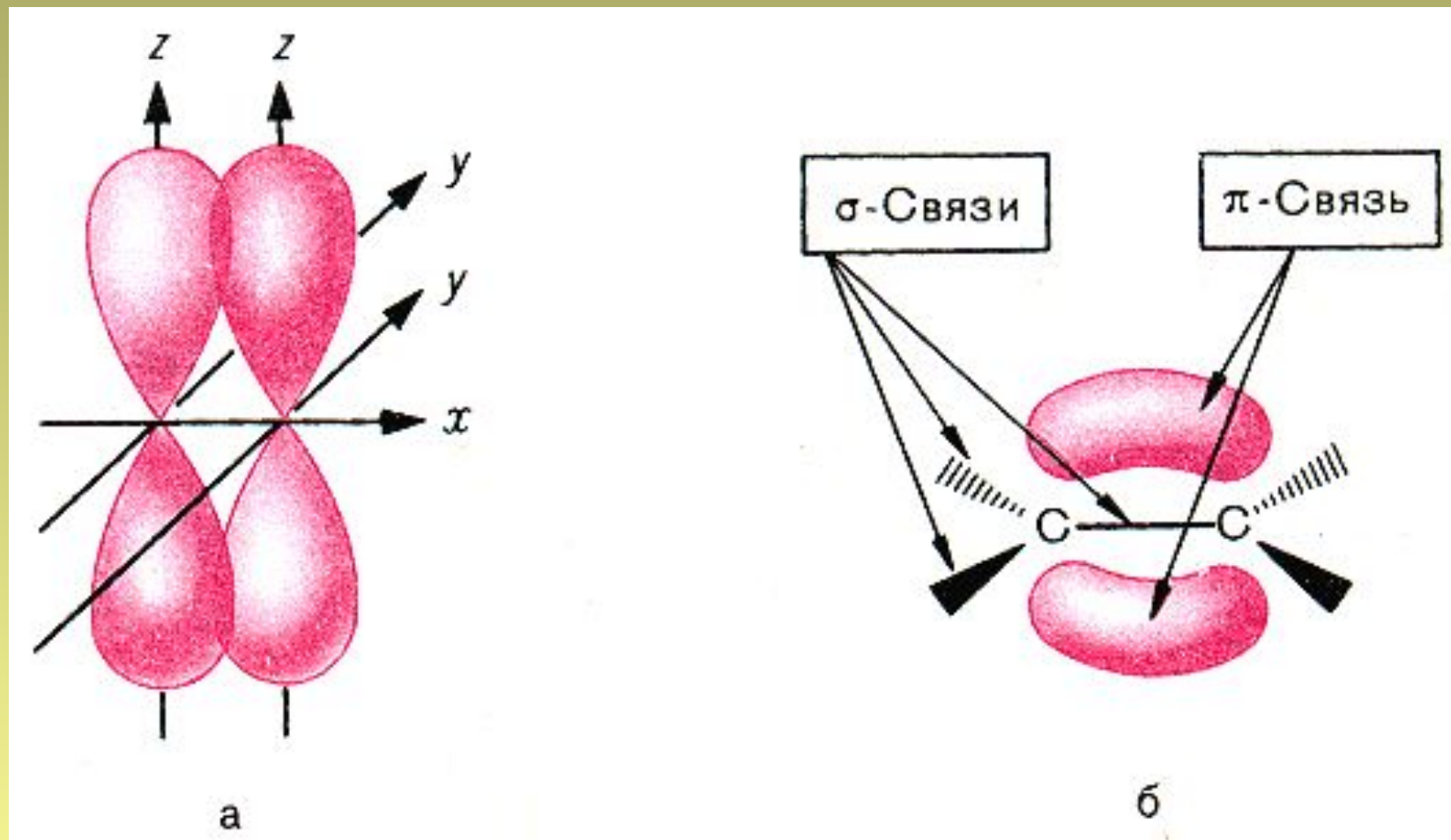


# Различные виды перекрывания орбиталей



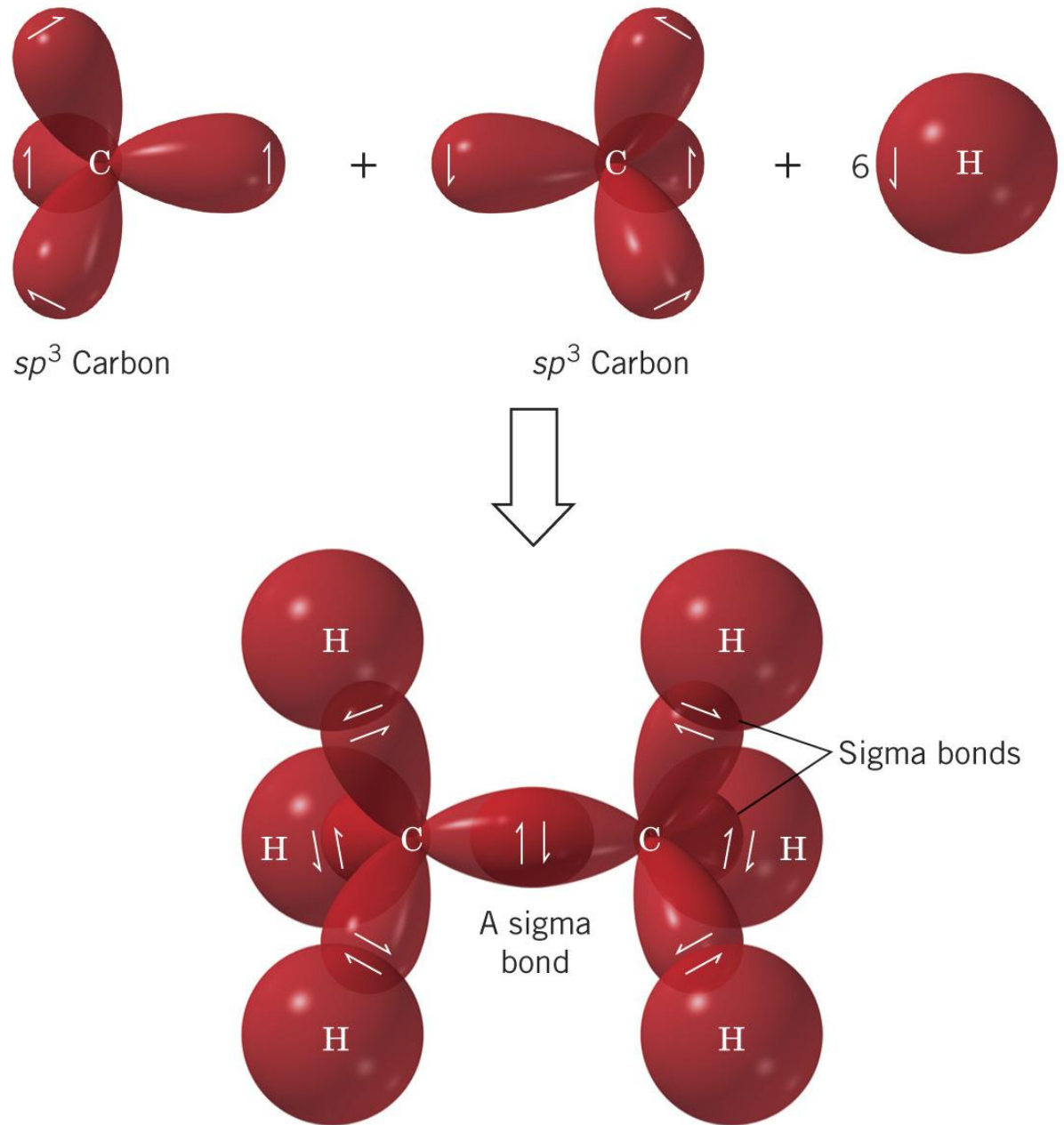
**$\sigma$ -связь**

# Различные виды перекрывания орбиталей



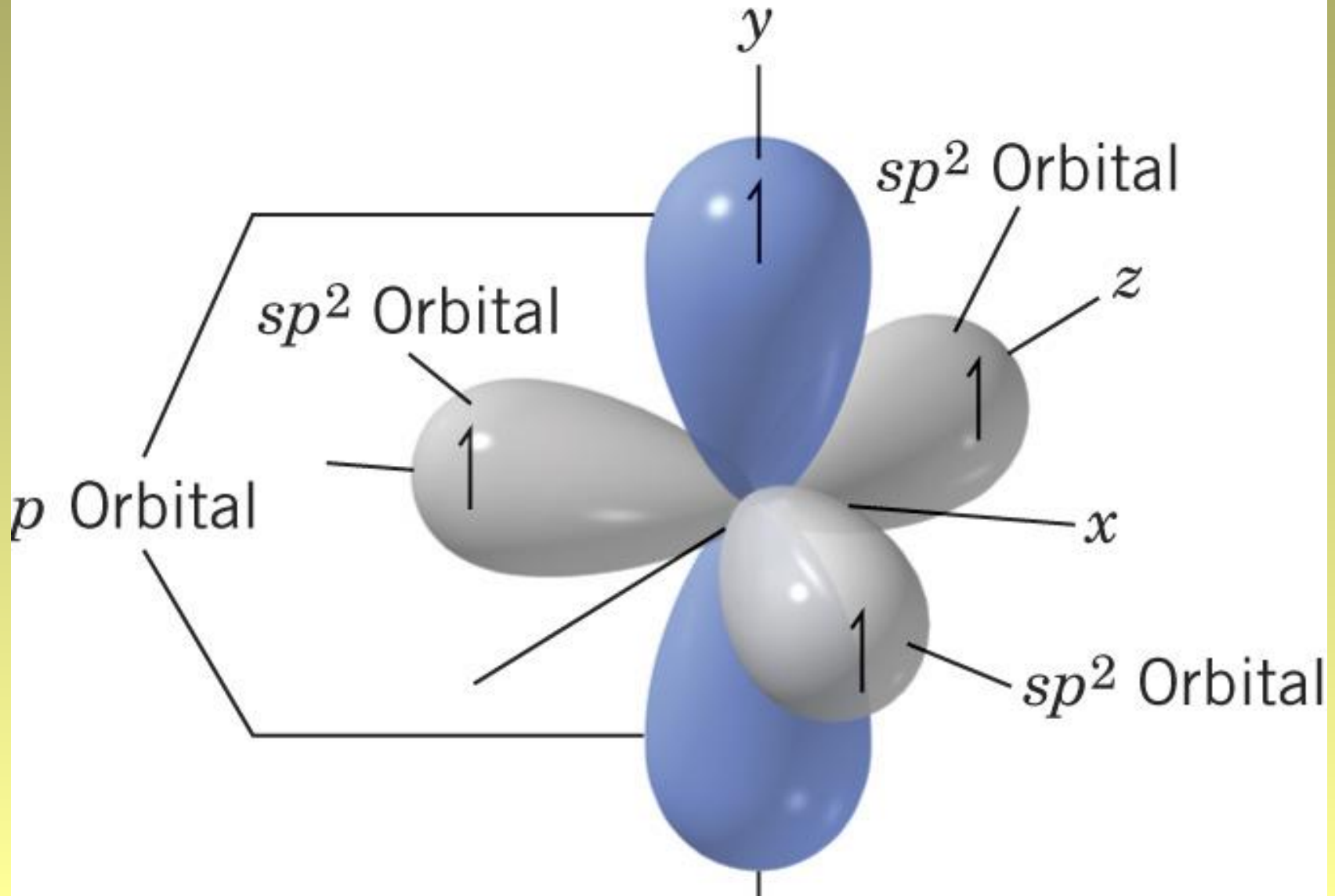
**π-СВЯЗЬ**

# Различные виды перекрывания орбиталей

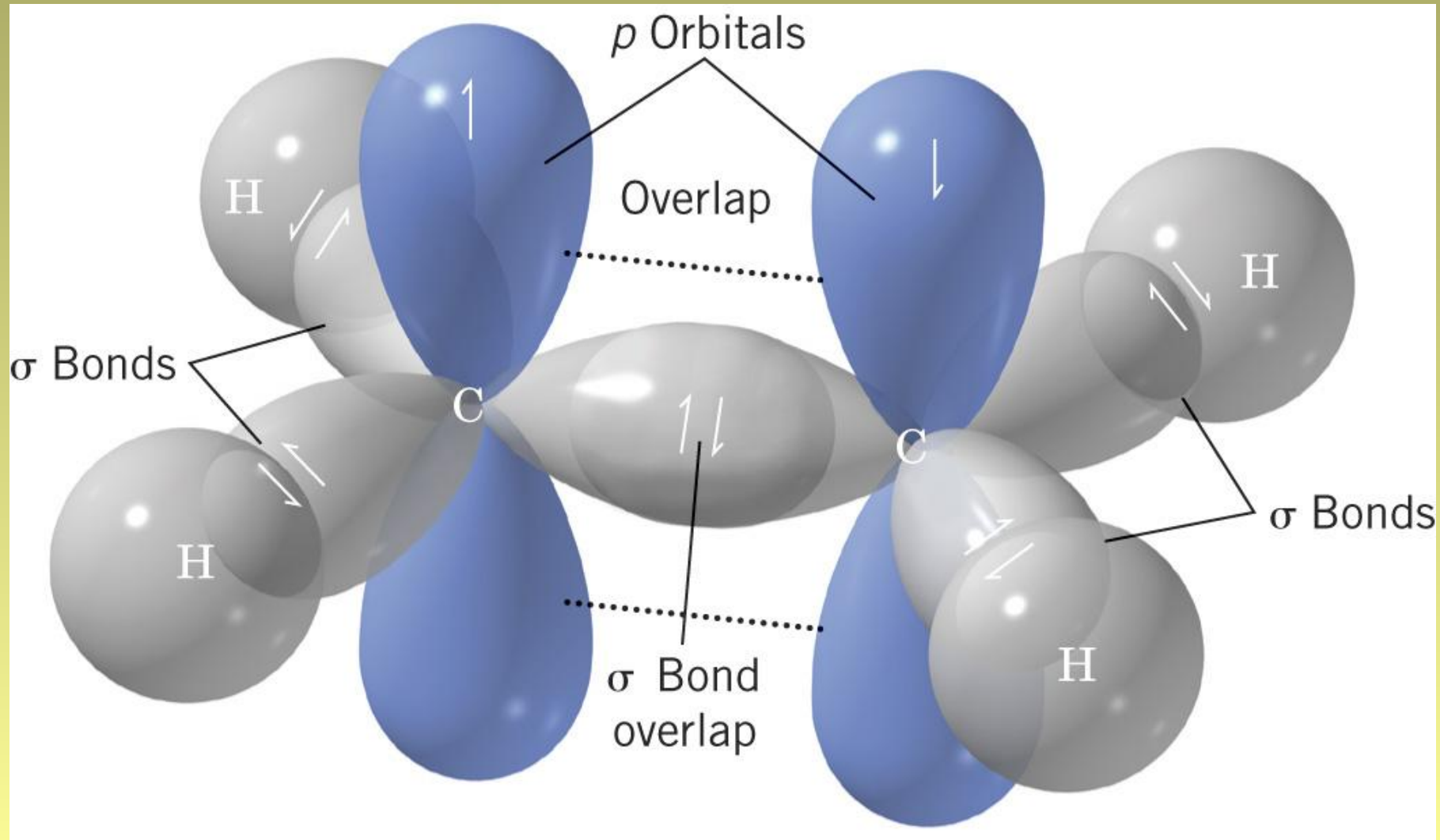




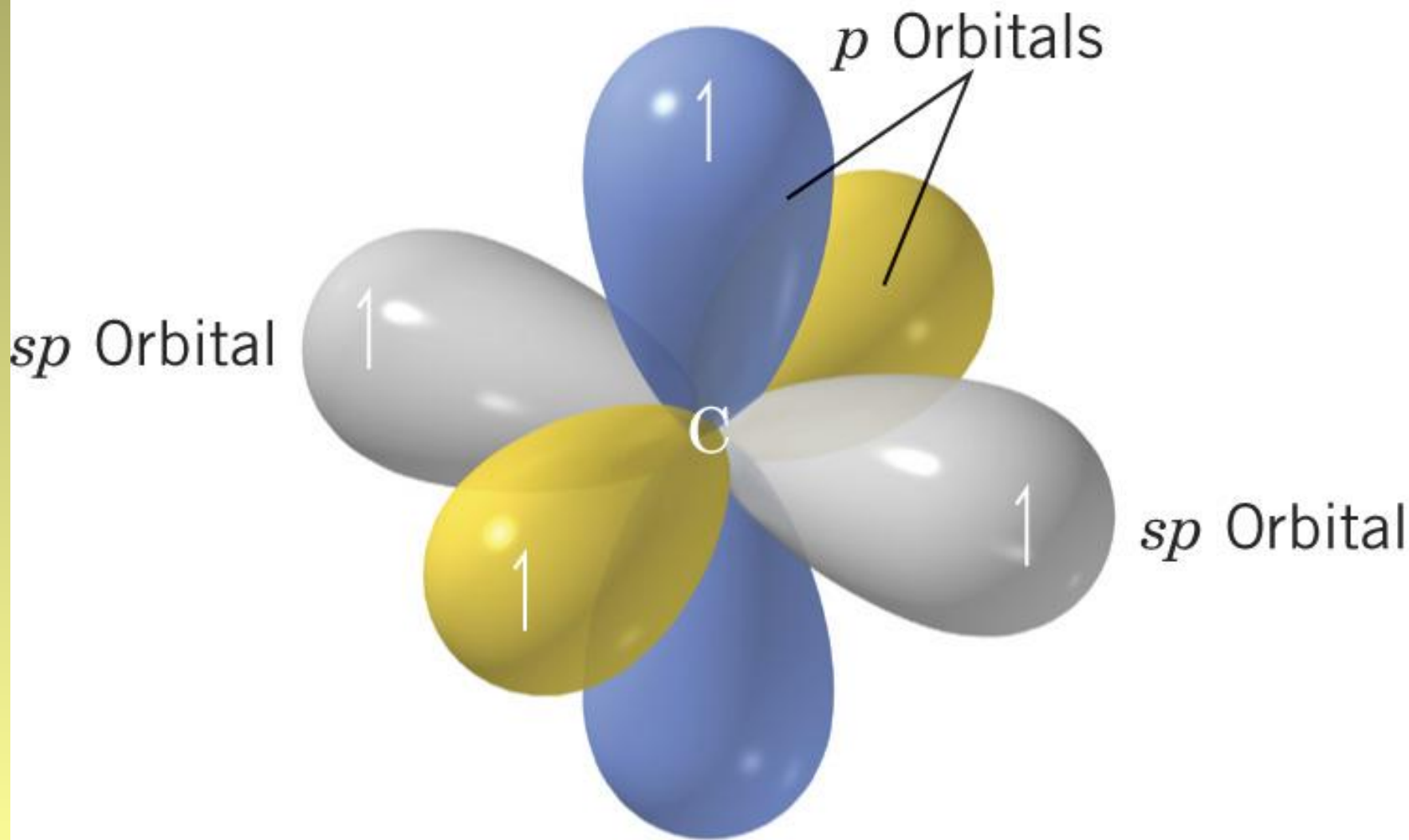
# Различные виды перекрывания орбиталей



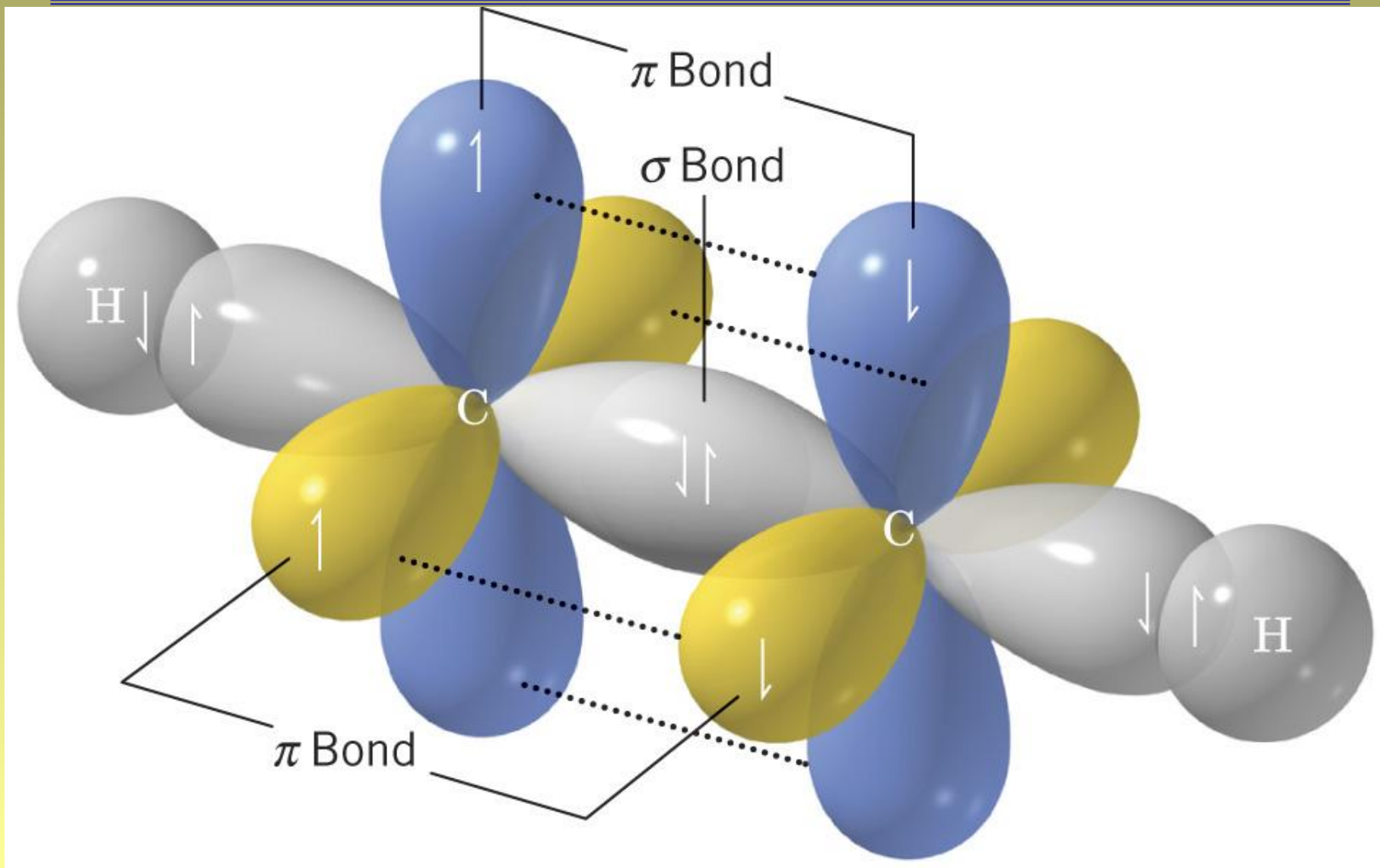
# Различные виды перекрывания орбиталей



# Различные виды перекрывания орбиталей



# Различные виды перекрывания орбиталей



# Свойства ковалентной связи

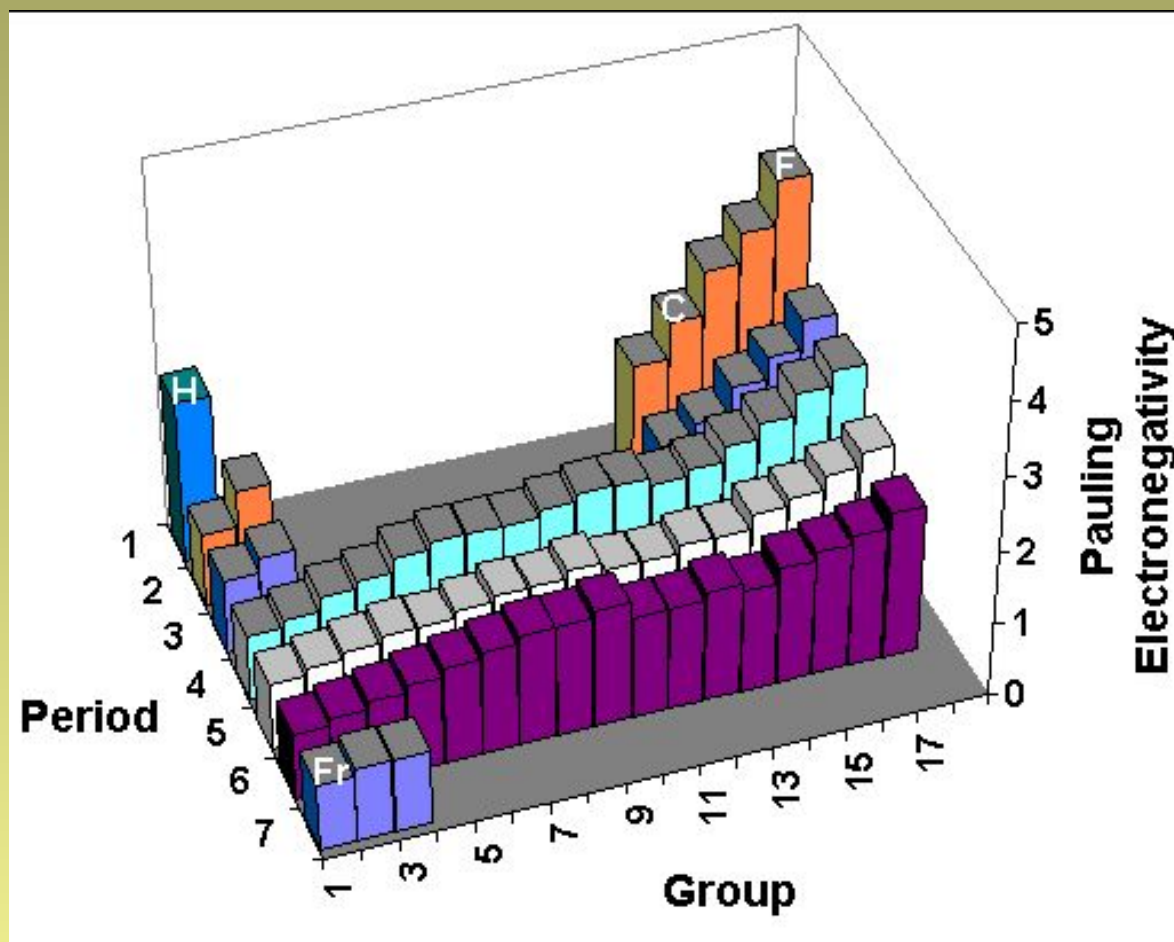
---

Ковалентная связь характеризуется несколькими параметрами:

*полярностью, длиной, энергией и направленностью в пространстве (углами между связями).*



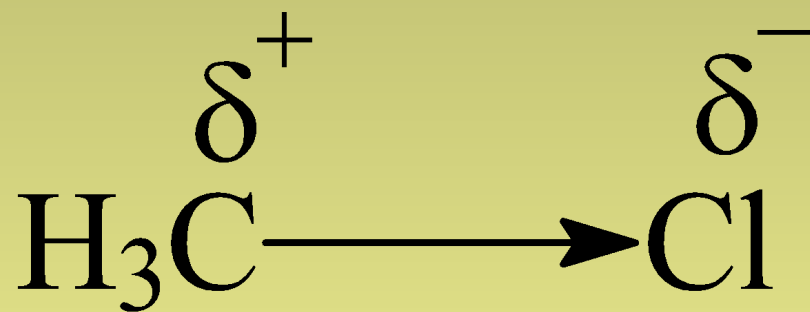
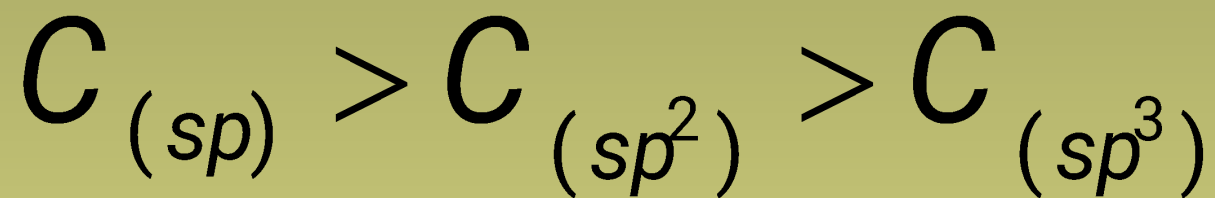
# Полярность



**F > O > Cl > N > Br > C > H**

# Полярность

---



# Поляризуемость

---

Ковалентная связь обладает **поляризуемостью** — способностью изменять свою полярность, например, под влиянием внешнего воздействия.

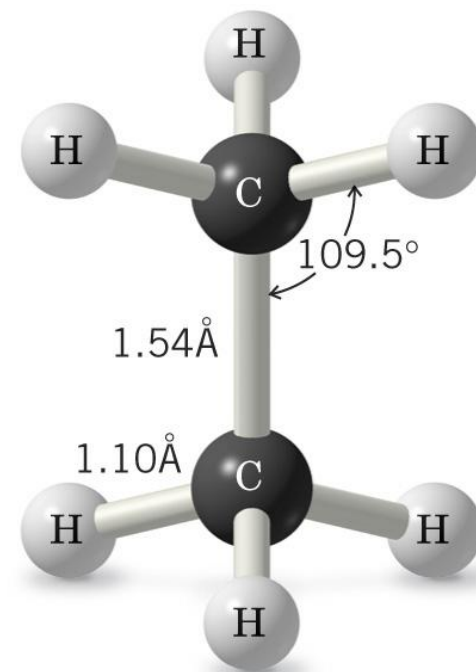
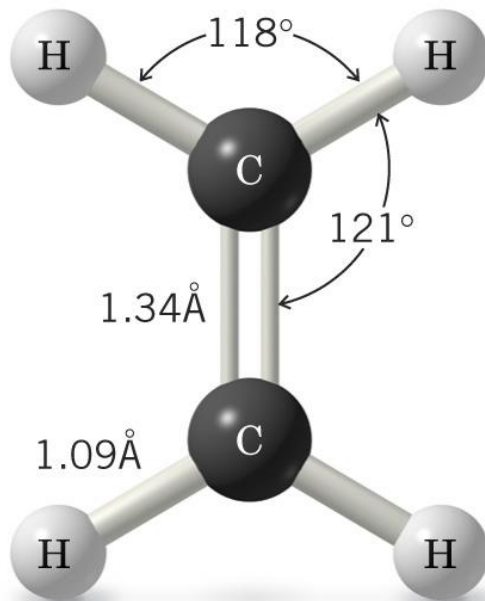
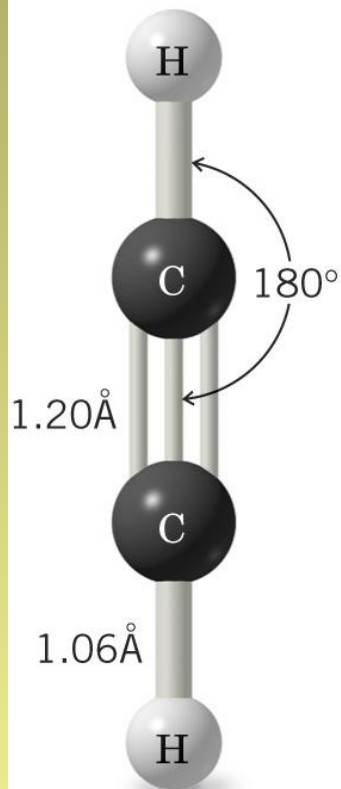
$\pi$ -связи поляризуются гораздо легче, чем  $\sigma$ -связи

# Длина связи и энергия

Некоторые параметры ковалентных углерод-углеродных связей

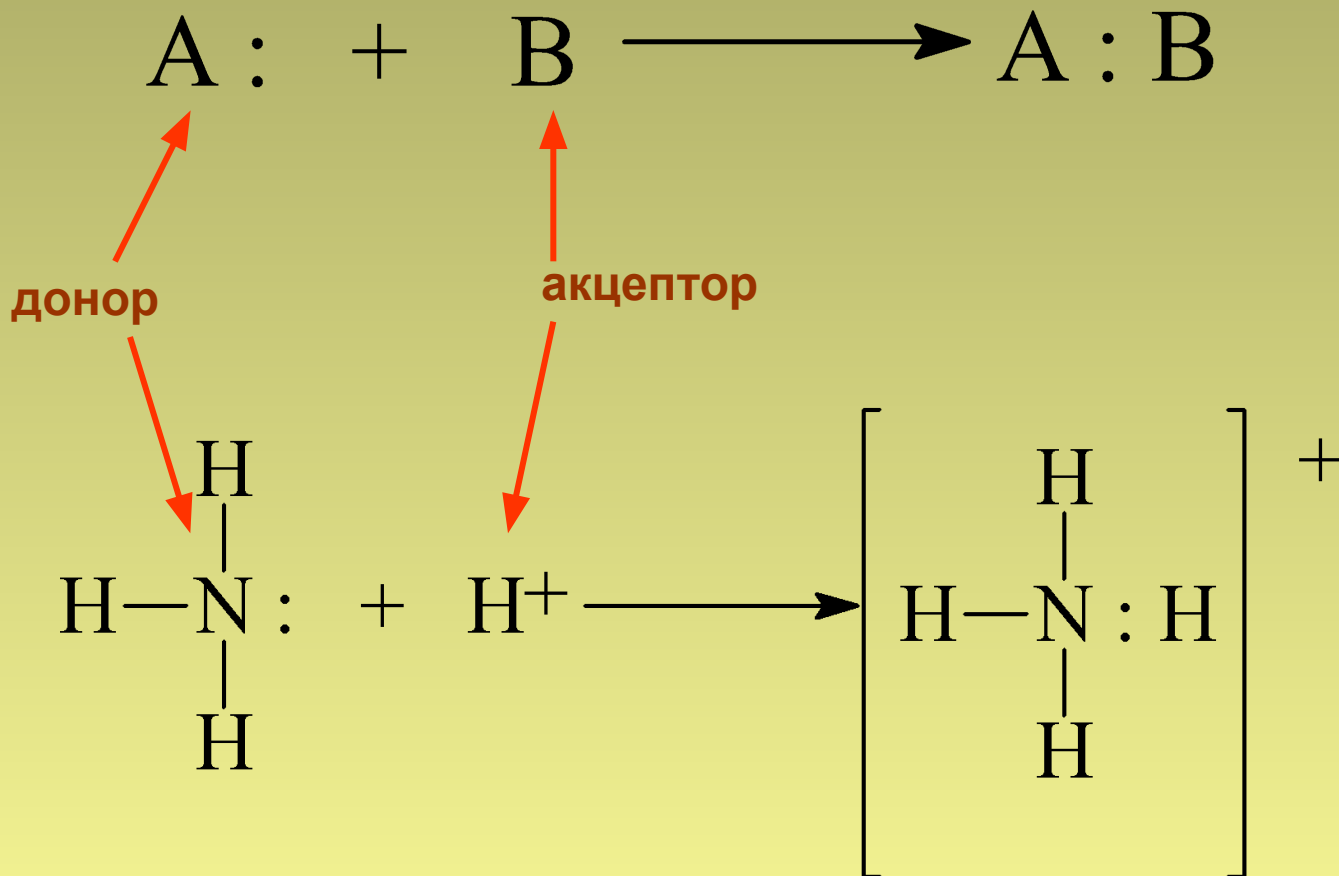
Ковалентная связь	Тип гибридизации атома углерода	Длина связи, нм	Угол между гибридными орбиталями (межвалентные углы)	Энергия связи, кДж/моль	Форма молекулы
$\text{C—C}$	$sp^3$	0,154	$109^\circ 28'$	350	Тетраэдрическая
$\text{C=C}$	$sp^2$	0,134	$120^\circ$	610	Плоскостная
$\text{C}\equiv\text{C}$	$sp$	0,120	$180^\circ$	830	Линейная

# Направленность ковалентной связи

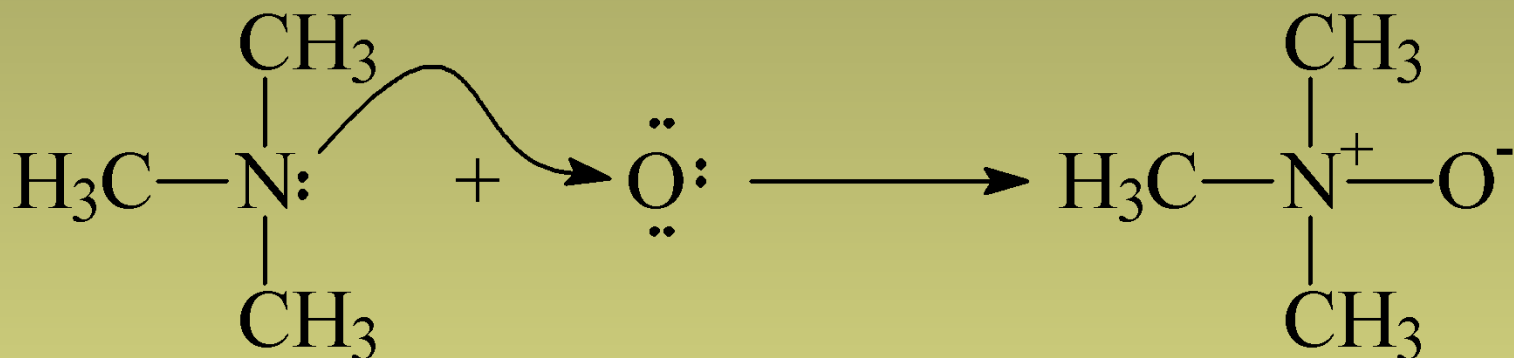




# Донорно-акцепторный механизм образования ковалентной связи



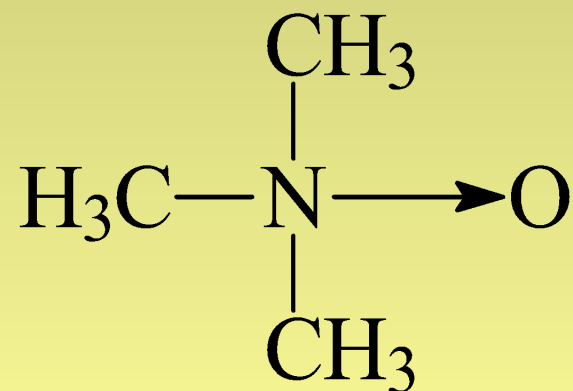
# Донорно-акцепторный механизм образования ковалентной связи



триметиламин

оксид триметиламина

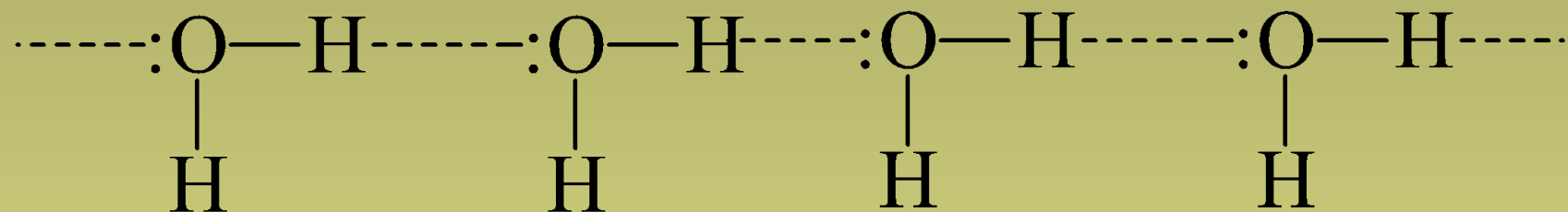
*семиполярная  
ковалентная связь*



# Водородная связь

---

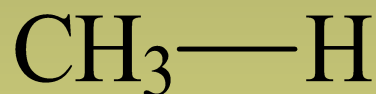
---



**12,5—20 кДж/моль**

# Взаимное влияние атомов в молекуле

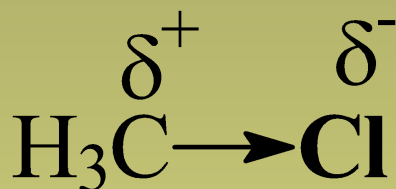
## Индуктивный эффект



метан

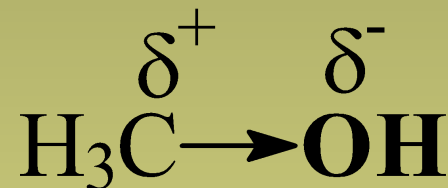
Связь С–Н

малополярна



хлорметан

Связь С–Cl полярна



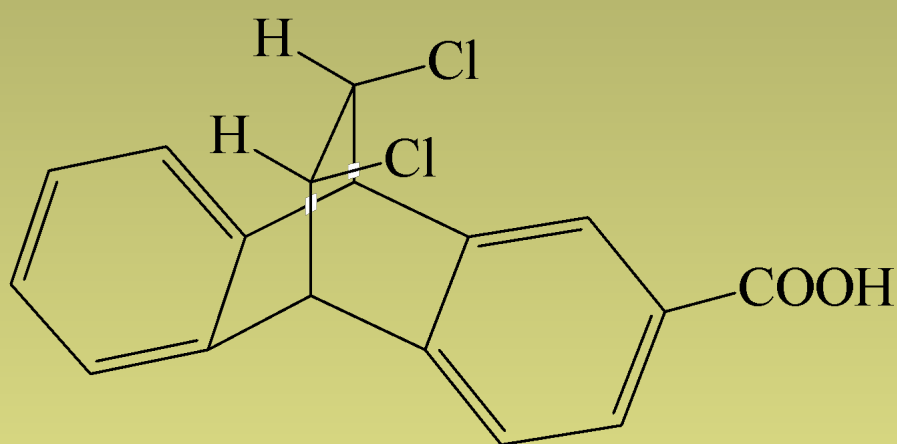
метанол

Связь С–О полярна

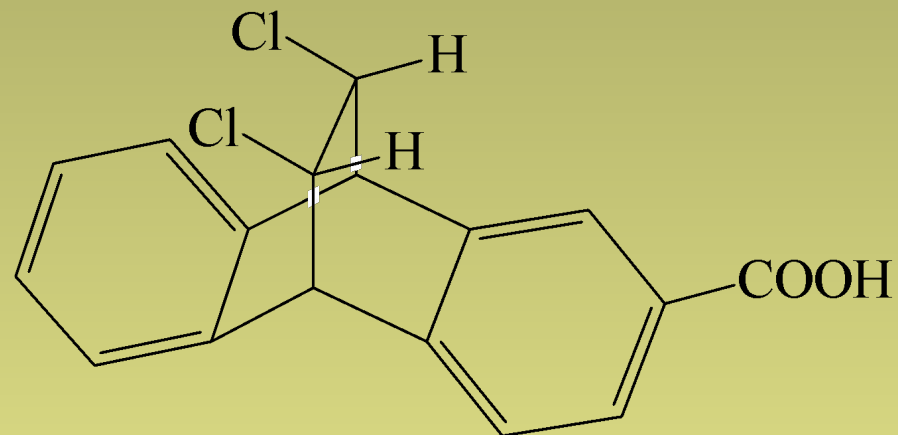
Смещение электронной плотности по цепи  $\sigma$ -связей называется **индуктивным эффектом** и обозначается буквой **I**.

# Взаимное влияние атомов в молекуле

## Индуктивный эффект



I



II



# Взаимное влияние атомов в молекуле

---

## *Индуктивный эффект*

*Электроноакцепторные заместители*, т.е. атом или группа атомов, смещающие электронную плотность  $\sigma$ -связи от атома углерода, проявляют *отрицательный индуктивный эффект (-I-эффект)*.

*Электронодонорные заместители*, т. е. атом или группа атомов, смещающие электронную плотность к атому углерода, проявляют *положительный индуктивный эффект (+I-эффект)*.

# Взаимное влияние атомов в молекуле

---

---

## Индуктивный эффект

**+I-Эффект** проявляют алифатические углеводородные радикалы, т.е. алкильные радикалы ( $-\text{CH}_3$ ,  $-\text{C}_2\text{H}_5$  и т. д.).

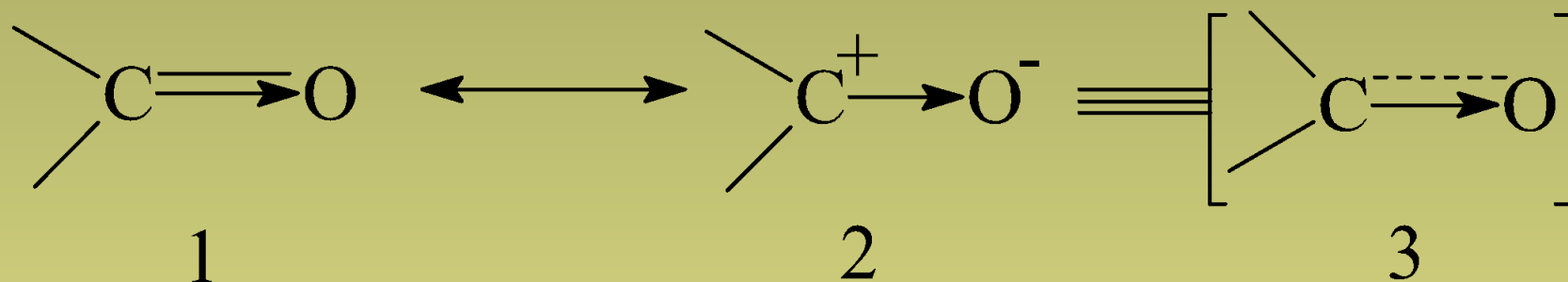
Большинство функциональных групп проявляют **-I-эффект**:  $-\text{Hal}$ ,  $-\text{NH}_2$ ,  $-\text{OH}$ ,  $>\text{C}=\text{O}$ ,  $-\text{COOH}$ .



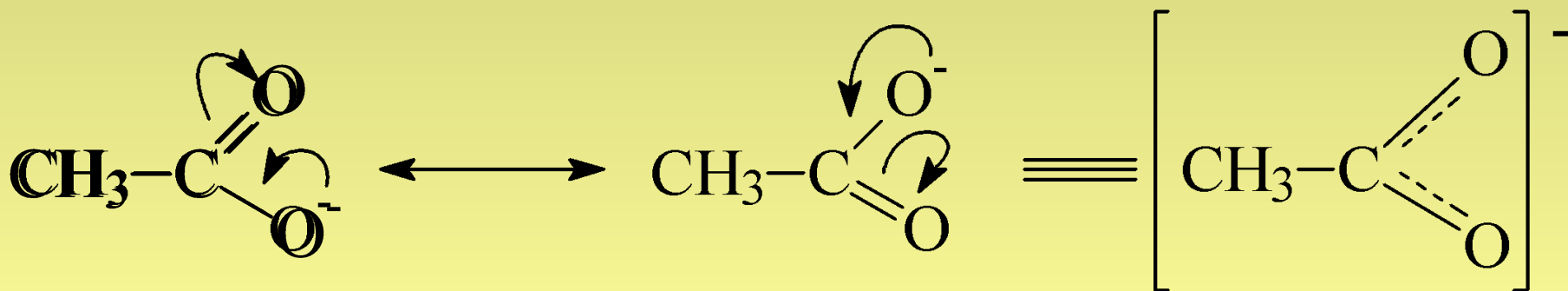
пропен

# Взаимное влияние атомов в молекуле

## Мезомерный эффект (эффект сопряжения)



## Делокализованная связь

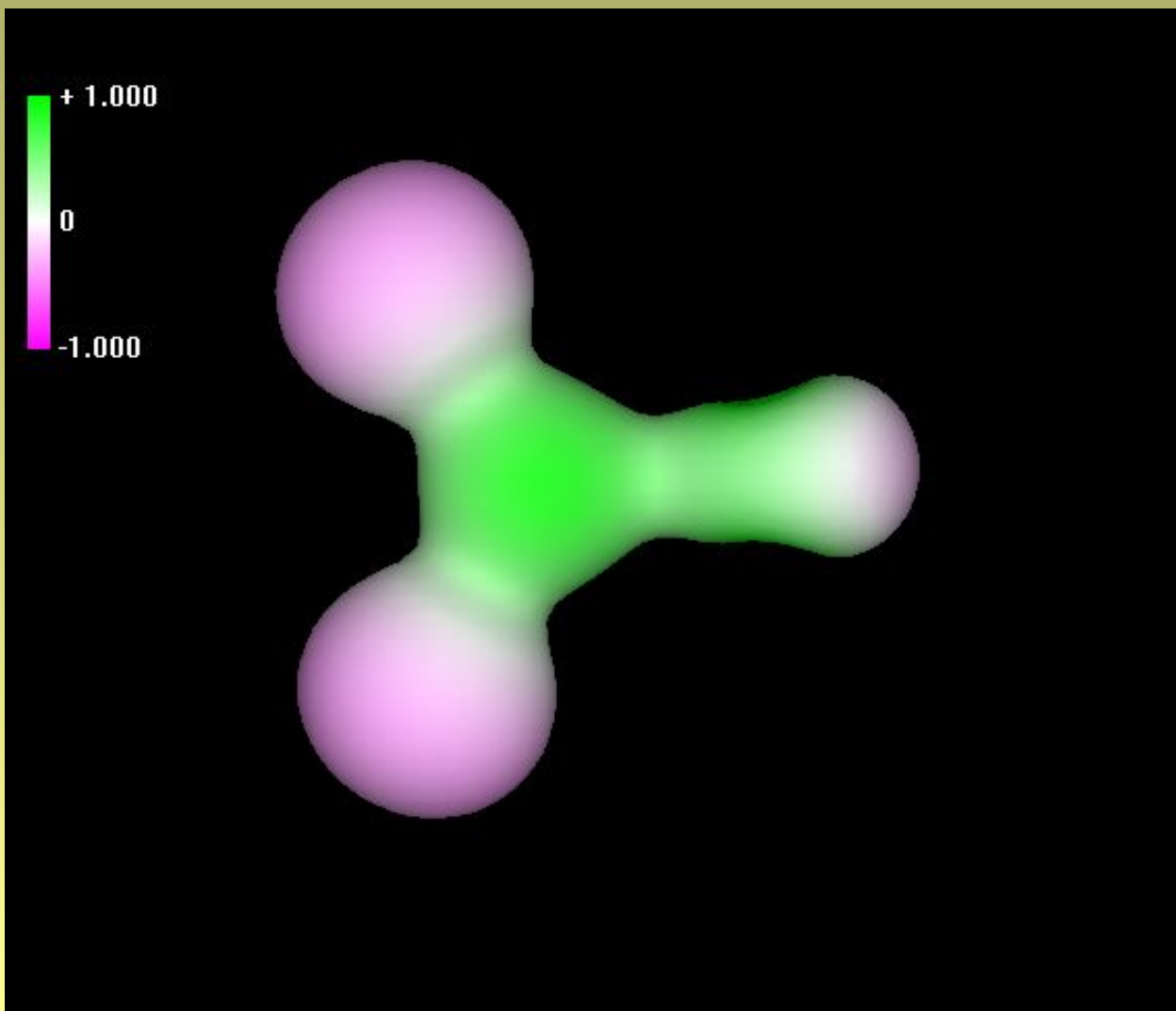


# Взаимное влияние атомов в молекуле

---

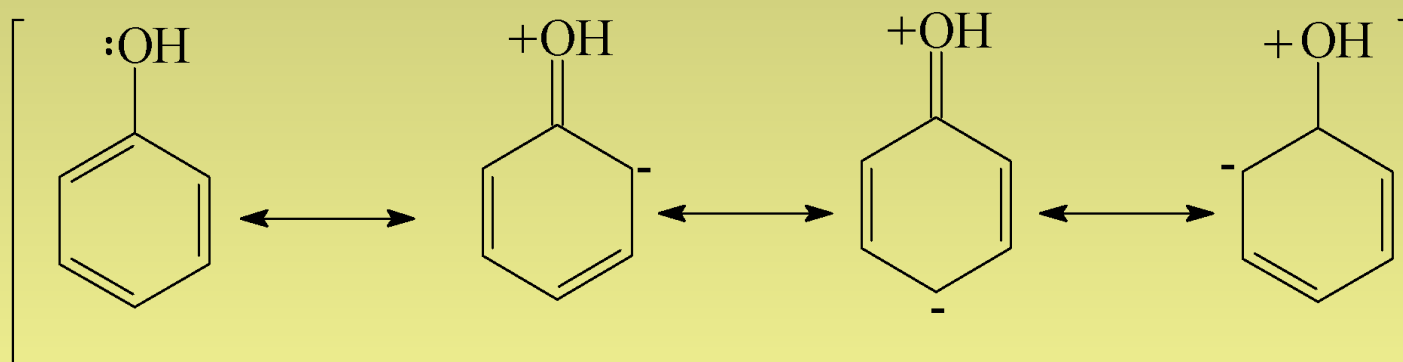
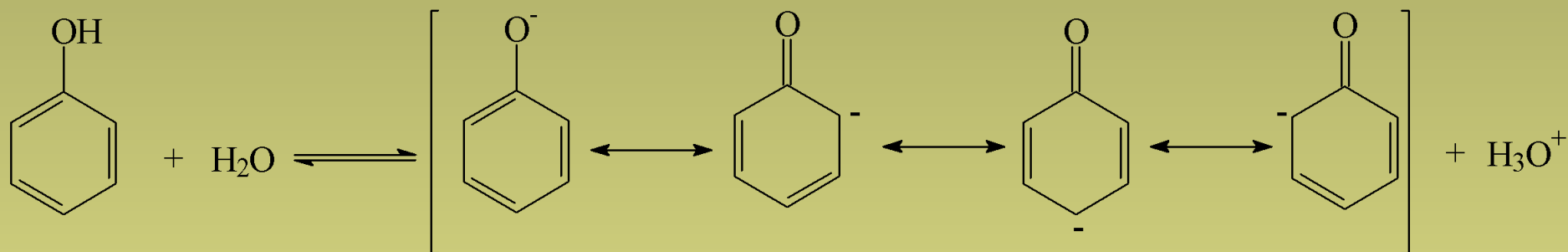
---

## Мезомерный эффект (эффект сопряжения)



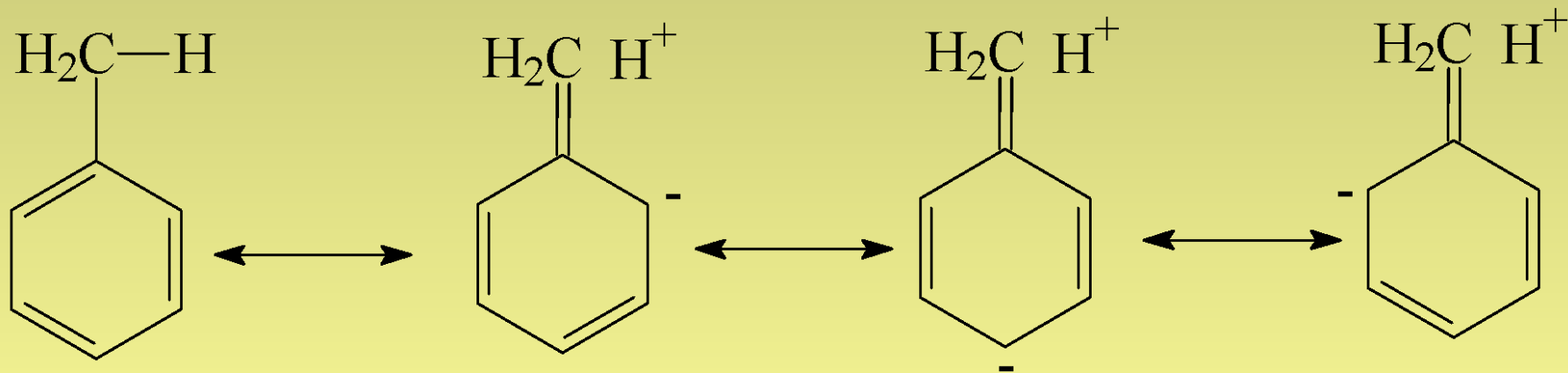
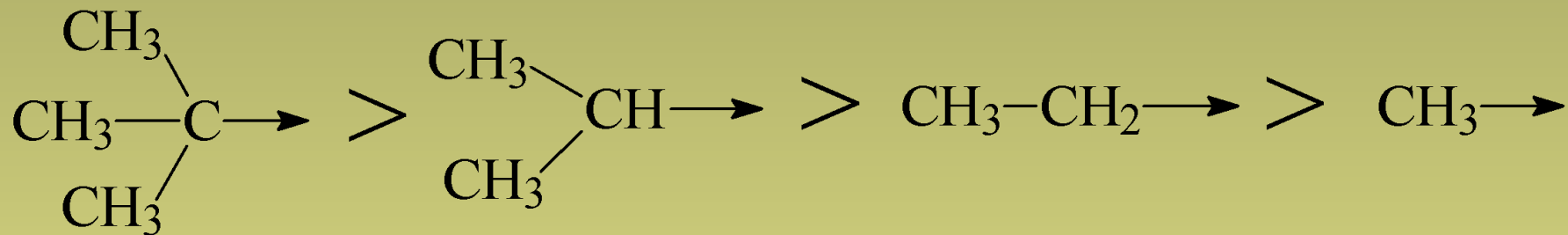
# Взаимное влияние атомов в молекуле

## Мезомерный эффект (эффект сопряжения)



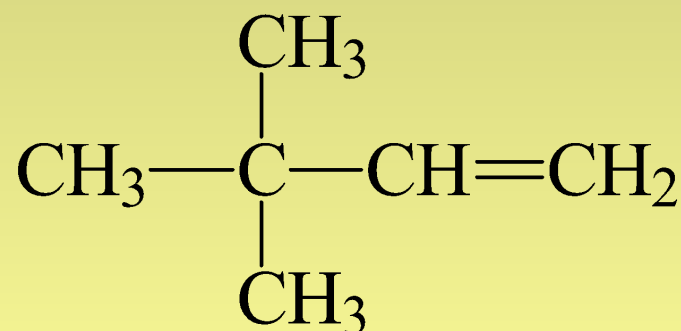
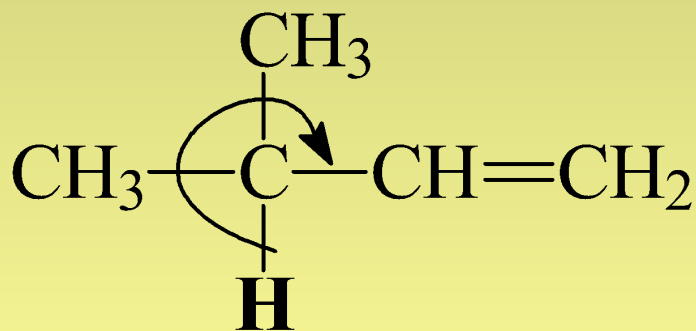
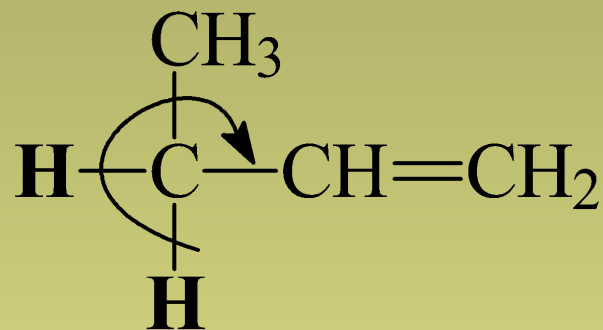
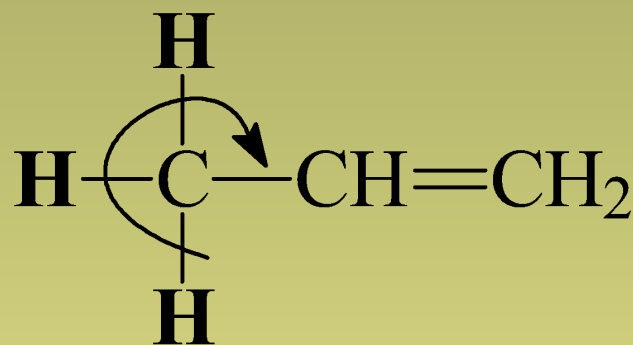
# Взаимное влияние атомов в молекуле

## Сверхсопряжение (гиперконъюгация)



# Взаимное влияние атомов в молекуле

## Сверхсопряжение (гиперконъюгация)



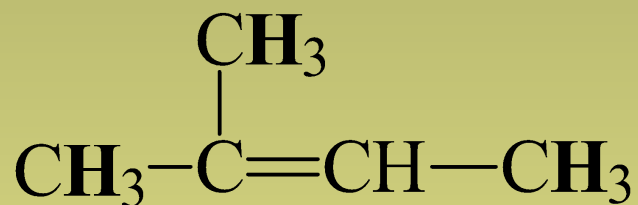


# Взаимное влияние атомов в молекуле

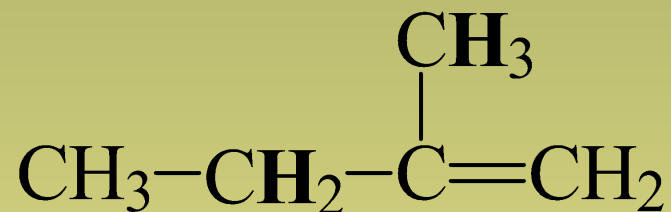
---

---

## Сверхсопряжение (гиперконъюгация)



2-метилбут-2-ен



2-метилбут-1-ен