

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ



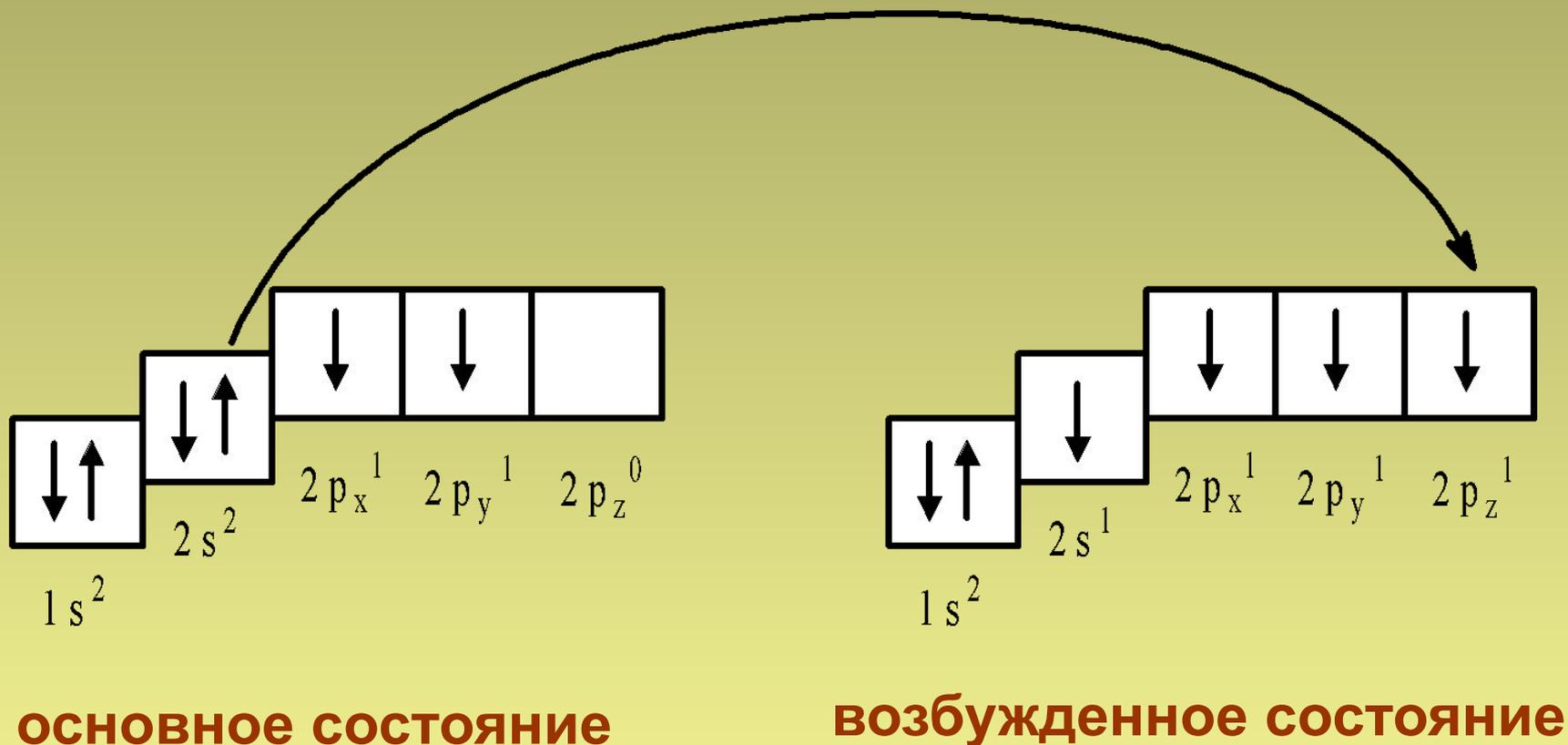
Часть II

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}																	
2	2s 2p	Li 3 6,9 ЛИТИЙ	Be 4 9,0 БЕРИЛЛИЙ	5 B 2,01 10,8 БОР		6 C 2,50 12,0 УГЛЕРОД		7 N 3,07 14,0 АЗОТ		8 O 3,50 16,0 КИСЛОРОД		9 F 4,10 19,0 ФТОР		10 Ne 20,2 НЕОН					
3	3s 3p	Na 11 23,0 НАТРИЙ	Mg 12 24,3 МАГНИЙ	13 Al 1,47 27,0 АЛЮМИНИЙ		14 Si 1,74 28,1 КРЕМНИЙ		15 P 2,1 31,0 ФОСФОР		16 S 2,60 32,1 СЕРА		17 Cl 2,83 35,5 ХЛОР		18 Ar 39,9 АРГОН					
4	4s 3d 4p	K 19 39,1 КАЛИЙ	Ca 20 40,1 КАЛЬЦИЙ	Sc 21 45,0 СКАНДИЙ		Ti 22 47,9 1,32 10,8 ТИТАН		V 23 50,9 1,45 11,8 ВАНАДИЙ		Cr 24 52,0 1,56 13,8 ХРОМ		Mn 25 54,9 1,60 13,8 МАРГАНЕЦ		Fe 26 55,9 1,64 14,8 ЖЕЛЕЗО		Co 27 58,9 1,70 15,8 КОБАЛЬТ		Ni 28 58,7 1,75 16,8 НИКЕЛЬ	
		Cu 29 63,5 МЕДЬ		Zn 30 65,4 ЦИНК		Ga 31 69,7 ГАЛЛИЙ		Ge 32 72,6 ГЕРМАНИЙ		As 33 74,9 АРСЕН		Se 34 79,0 СЕЛЕН		Br 35 80,0 БРОМ		Kr 36 83,8 КРИПТОН			
5	5s 4d 5p	Rb 37 85,5 РУБИДИЙ	Sr 38 87,6 СТРОНЦИЙ	Y 39 88,9 ИТРИЙ		Zr 40 91,2 1,22 10,8 ЦИРКОНИЙ		Nb 41 92,9 1,23 11,8 НИОБИЙ		Mo 42 95,9 1,30 13,8 МОЛИБДЕН		Tc 43 [99] 1,36 13,8 ТЕХНЕЦИЙ		Ru 44 101,0 1,42 14,8 РУТЕНИЙ		Rh 45 102,9 1,45 15,8 РОДИЙ		Pd 46 106,4 1,35 16,8 ПАЛЛАДИЙ	
		Ag 47 107,9 СЕРЕБРО		Cd 48 112,4 КАДМИЙ		In 49 114,8 ИНДИЙ		Sn 50 118,7 ОЛОВО		Sb 51 121,8 СУРЬМА		Te 52 127,6 ТЕЛЛУР		I 53 127,0 ИОД		Xe 54 131,3 КСЕНОН			
6	6s (4f) 5d 6p	Cs 55 132,9 ЦЕЗИЙ	Ba 56 137,3 0,97 БАРИЙ	La* 57 138,9 1,08 18,8 ЛАНТАН		Hf 72 178,5 1,23 32,8 ГАФНИЙ		Ta 73 181,0 1,33 32,8 ТАНТАЛ		W 74 183,9 1,40 32,8 ВОЛЬФРАМ		Re 75 186,0 1,46 32,8 РЕНИЙ		Os 76 190,0 1,52 32,8 ОСМИЙ		Ir 77 192,0 1,55 32,8 ИРИДИЙ		Pt 78 195,1 1,44 32,8 ПЛАТИНА	
		Au 79 197,0 ЗОЛОТО		Hg 80 200,6 РУТУТ		Tl 81 204,4 ТАЛЛИЙ		Pb 82 207,2 СВИНЕЦ		Bi 83 209,0 ВИСМУТ		Po 84 [210] ПОЛОНИЙ		At 85 [210] АСТАТ		Rn 86 [222] РАДОН			
7	7s (5f) 6d	Fr 87 [223] ФРАНЦИЙ	Ra 88 [226] 0,97 РАДИЙ	Ac** 89 [227] 1,00 АКТИНИЙ		Rf 104 [261] РЕЗЕРФОРДИЙ		Db 105 [262] ДУБНИЙ		Sg 106 [263] СИБОРГИЙ		Bh 107 [262] БОРИЙ		Hs 108 [265] ХАССИЙ		Mt 109 [266] МЕЙТНЕРИЙ			
ВЫСШИЕ ОКСИДЫ		R ₂ O		RO		R ₂ O ₃		RO ₂		R ₂ O ₅		RO ₃		R ₂ O ₇		RO ₄			
ЛЕТУЧИЕ ВОДОРОДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ								RH ₄		RH ₃		H ₂ R		HR					



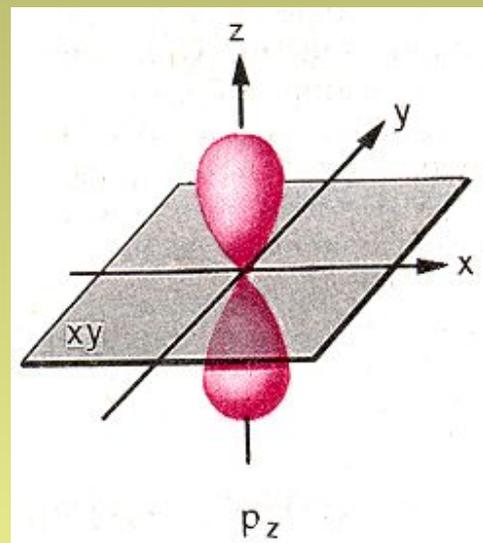
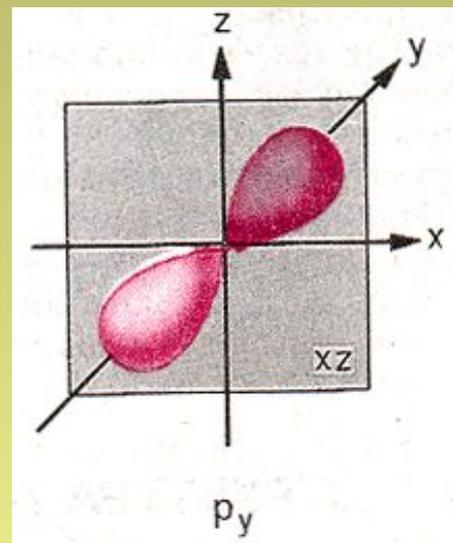
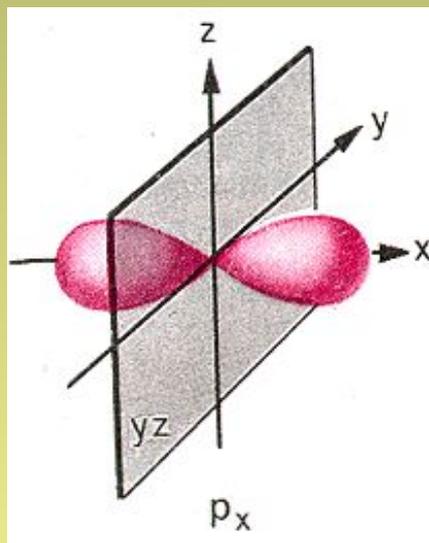
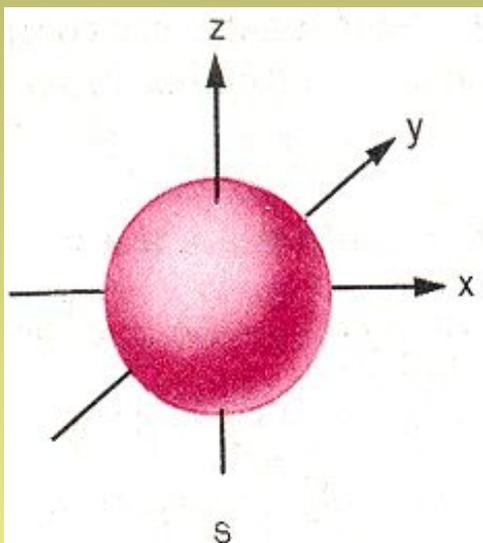
Электронная структура атома углерода в органических соединениях



Электронная структура атома углерода в органических соединениях

Гибридизация

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

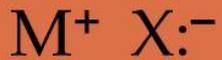


Гибридизация

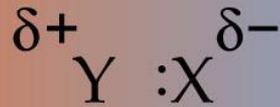
Гибридные орбитали и характер углеродных атомов

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) 

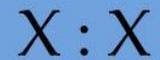
Типы химической связи



Ионная связь
(полные заряды)



Ковалентная полярная связь
(частичные заряды)

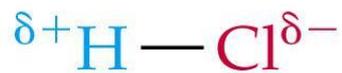
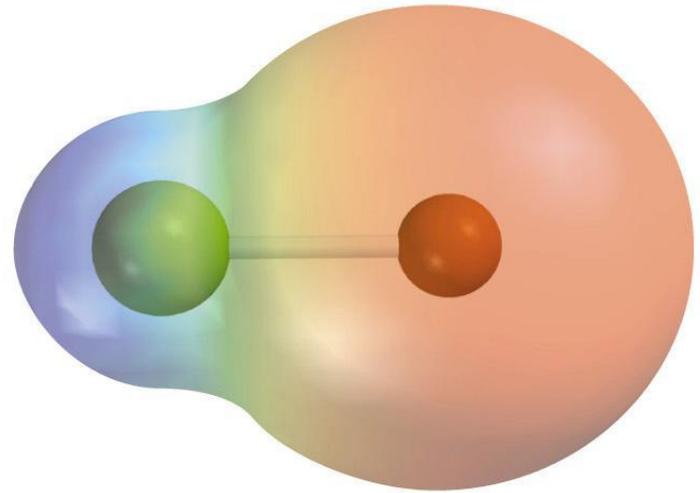


Неполярная ковалентная связь

Типы химической связи

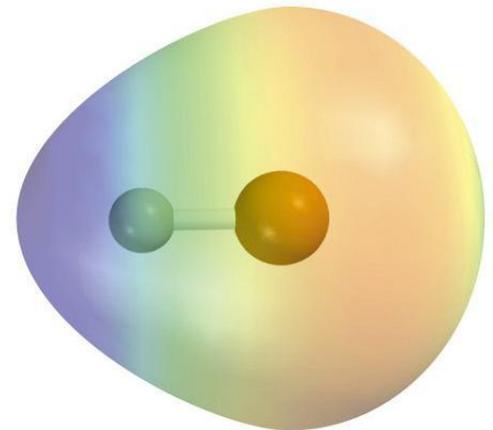


Ионная связь



Ковалентная полярная связь

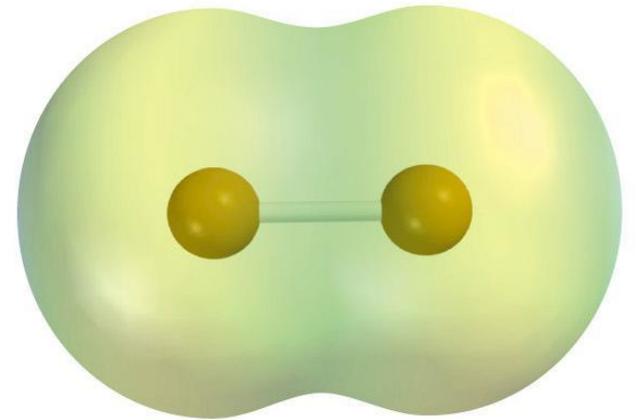
Пара электронов смещена
в сторону атома хлора



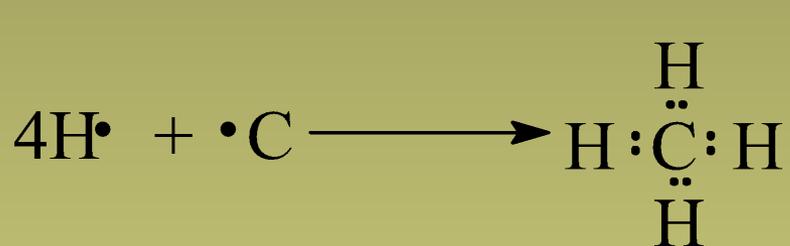
Типы химической связи



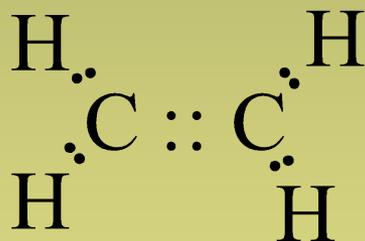
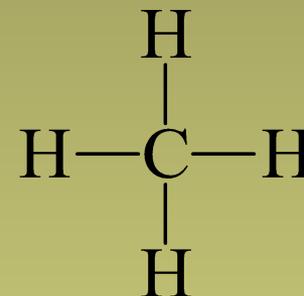
Ковалентная неполярная связь



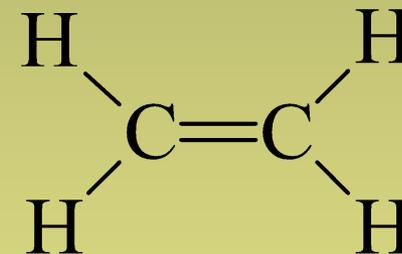
Типы химической связи



метан



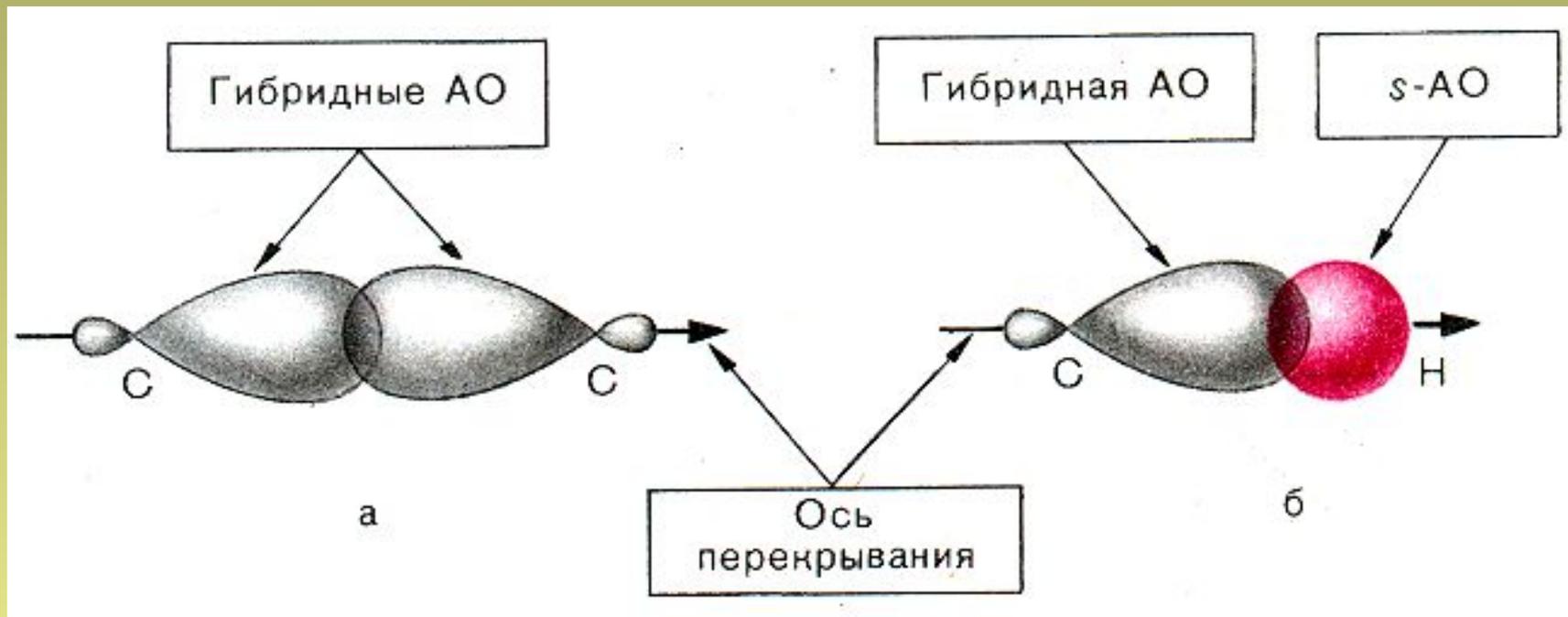
этилен



ацетилен

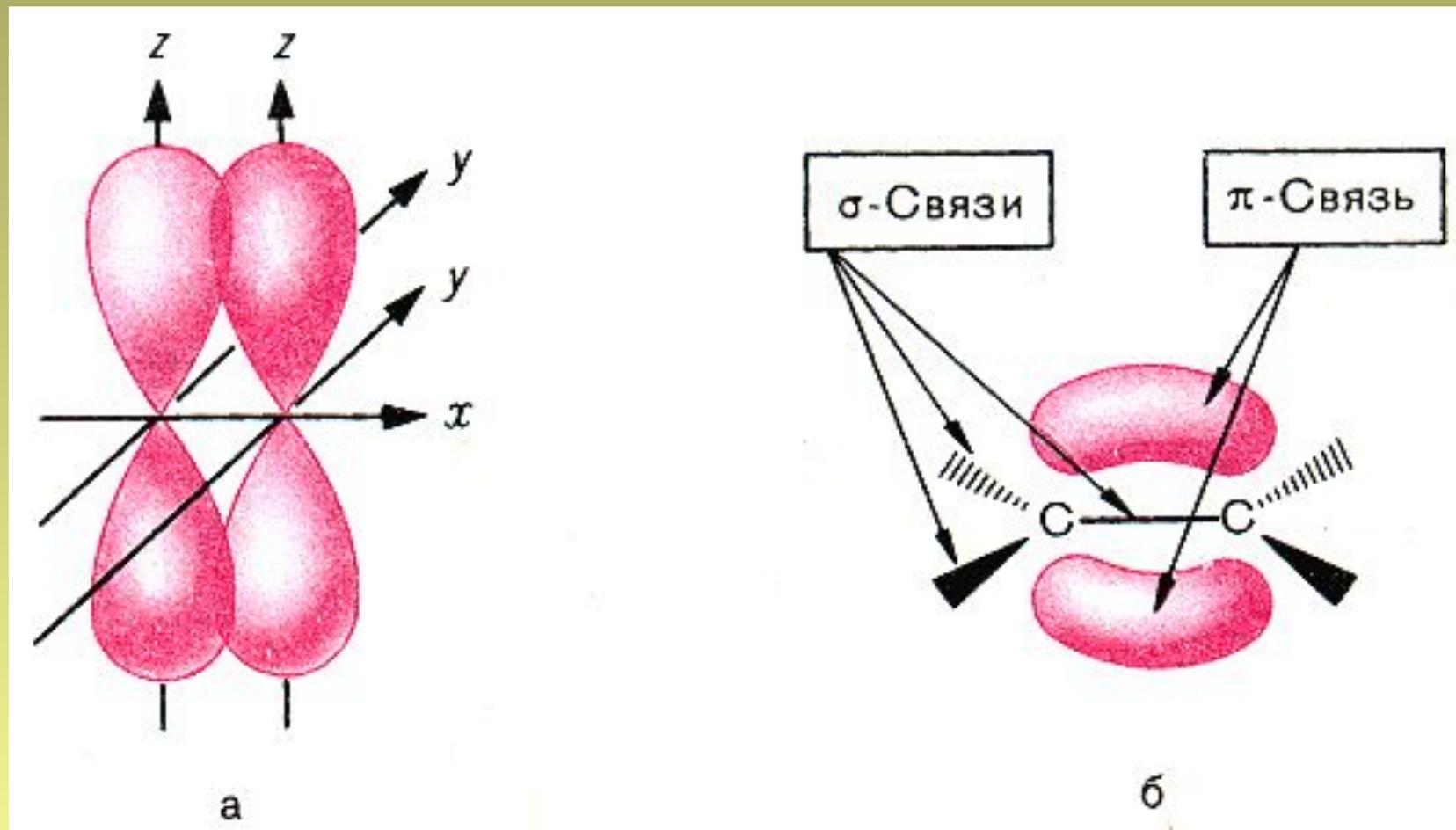


Различные виды перекрывания орбиталей



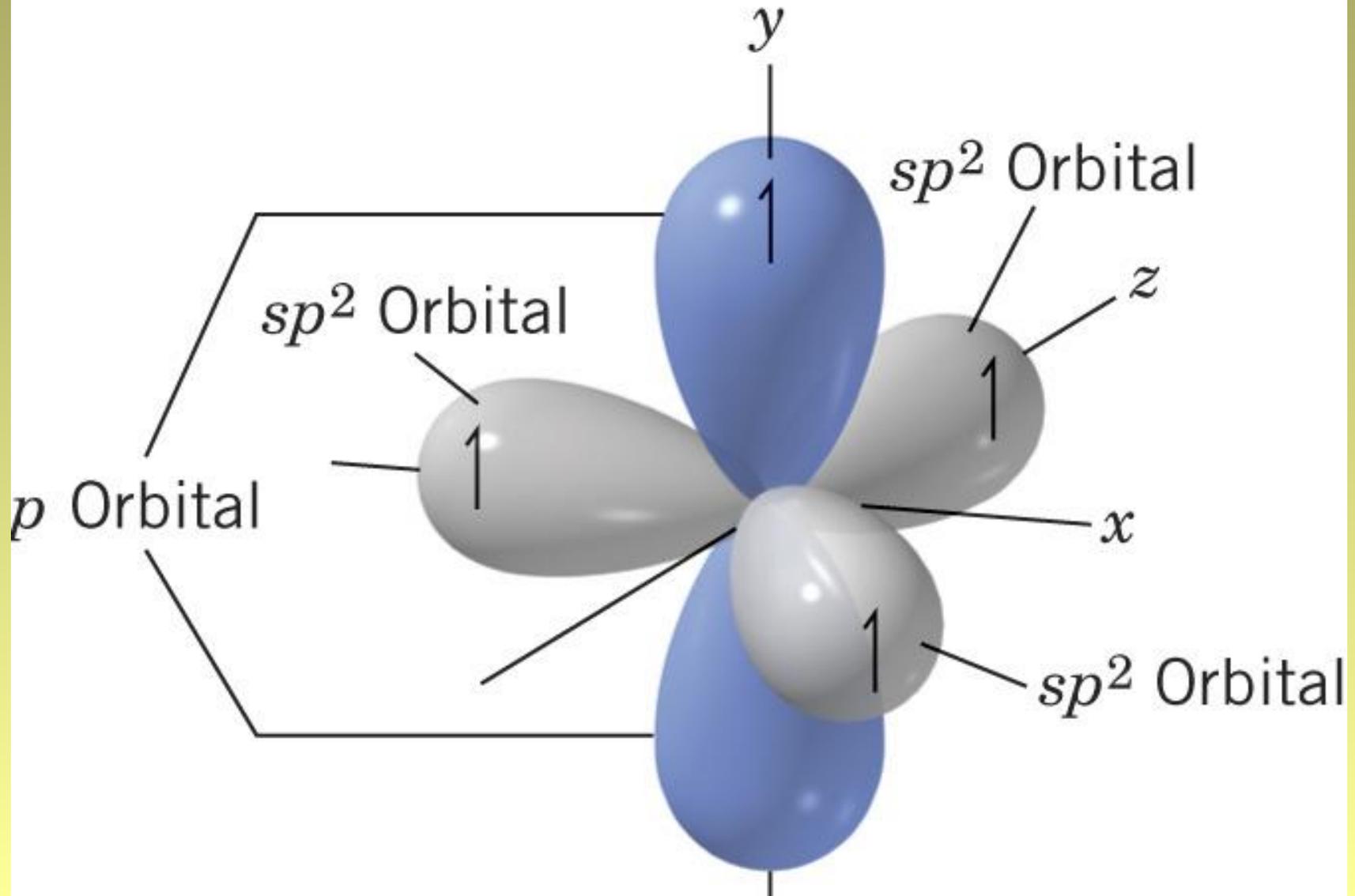
σ -связь

Различные виды перекрывания орбиталей

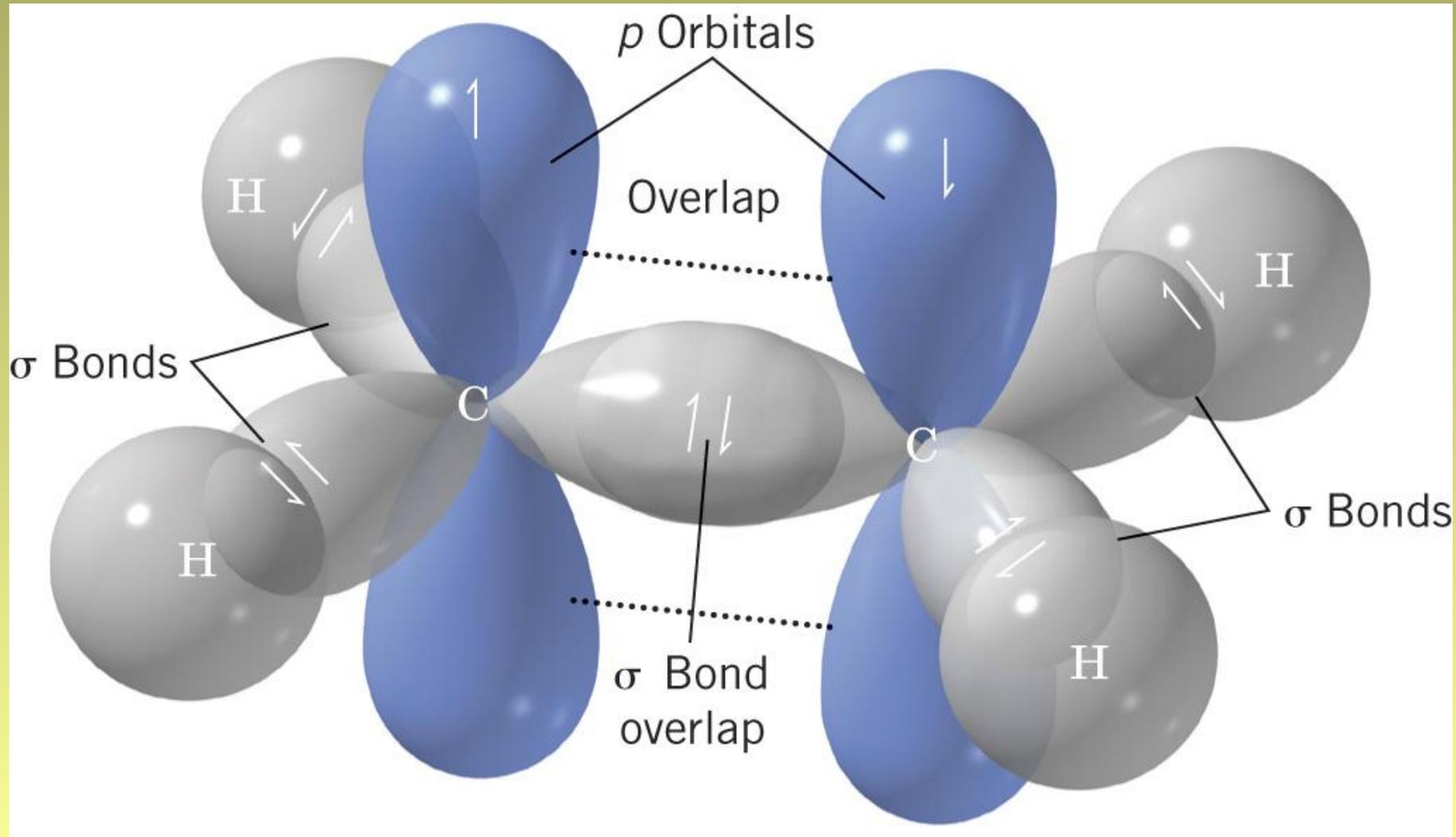


π-СВЯЗЬ

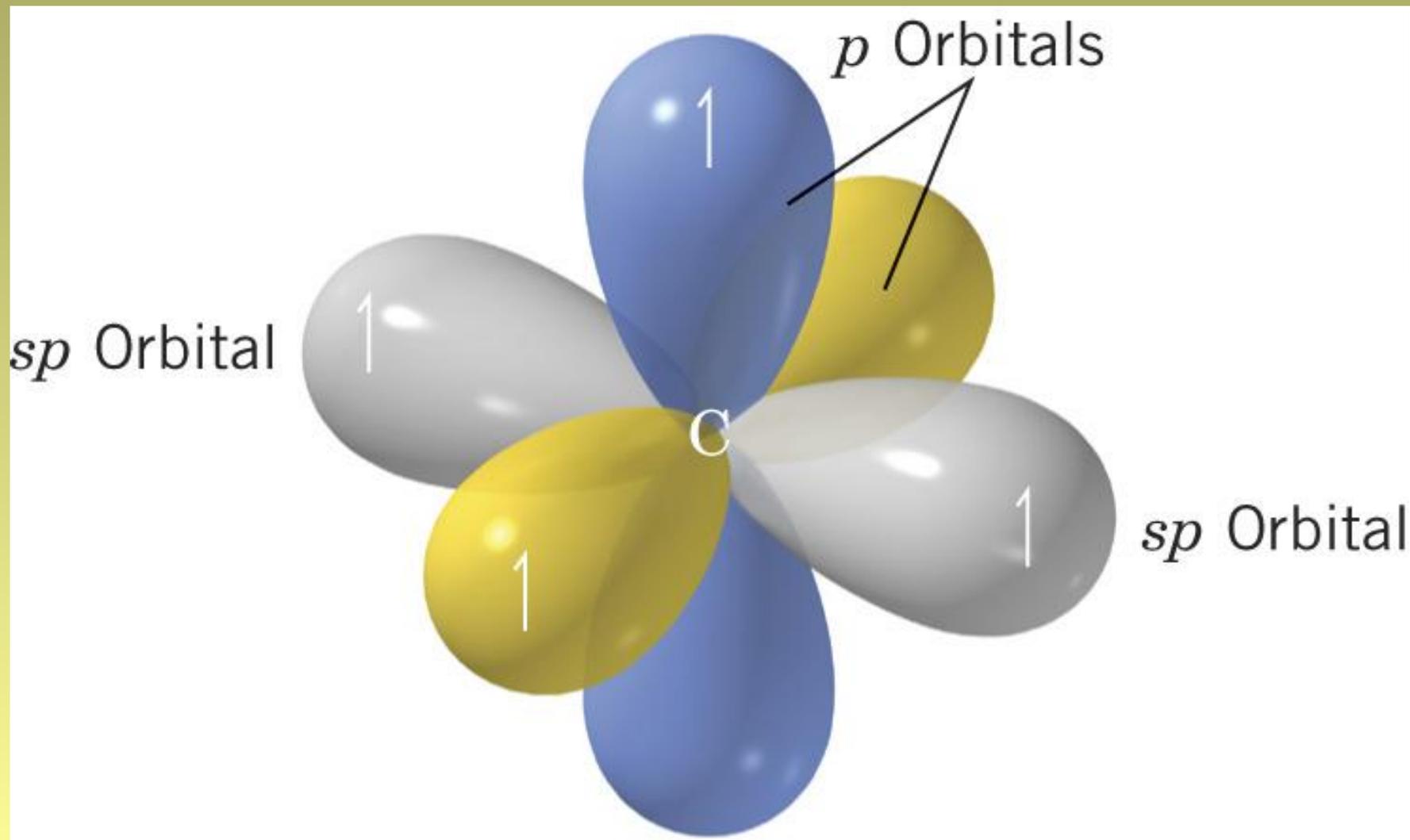
Различные виды перекрывания орбиталей



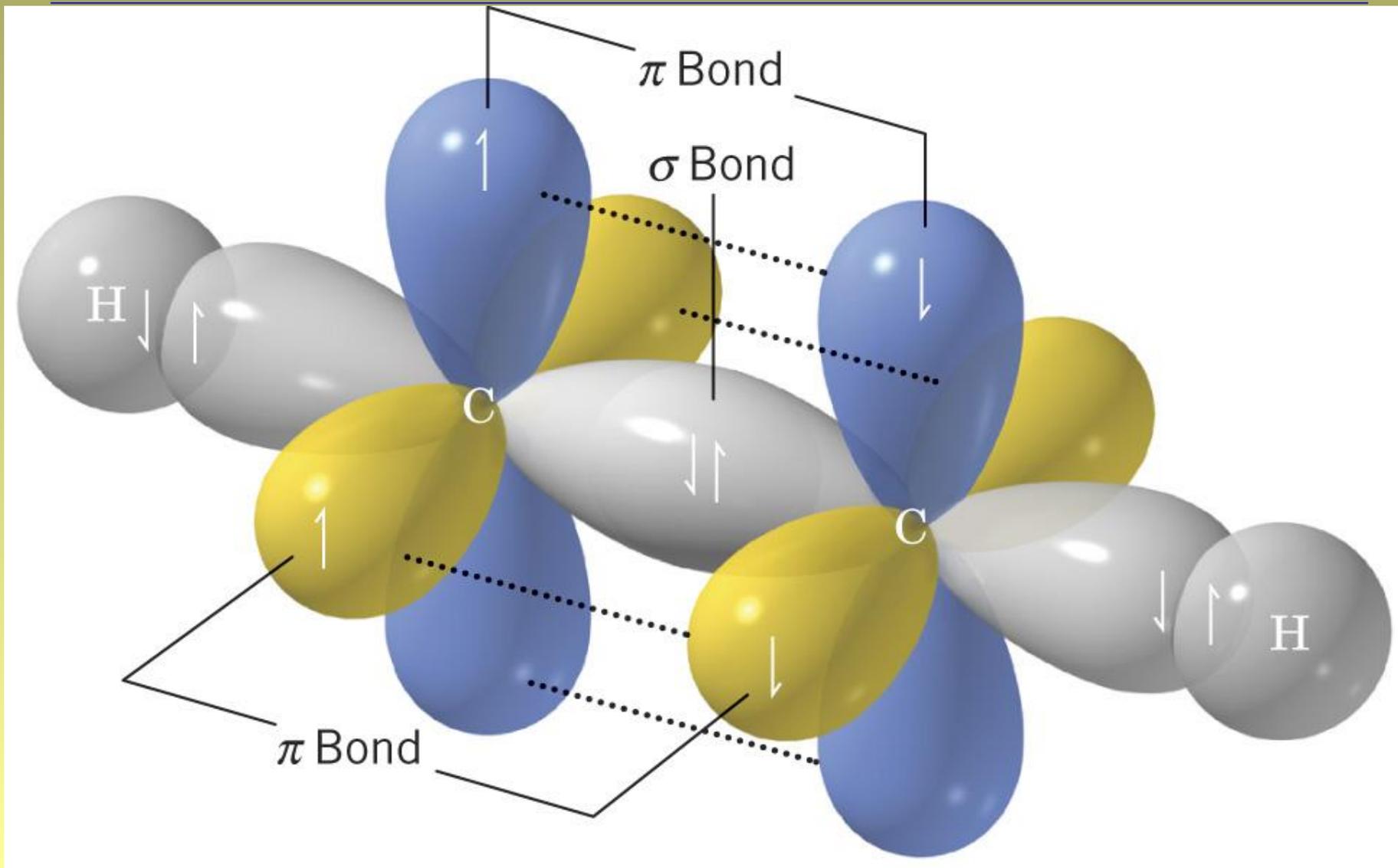
Различные виды перекрывания орбиталей



Различные виды перекрывания орбиталей



Различные виды перекрывания орбиталей

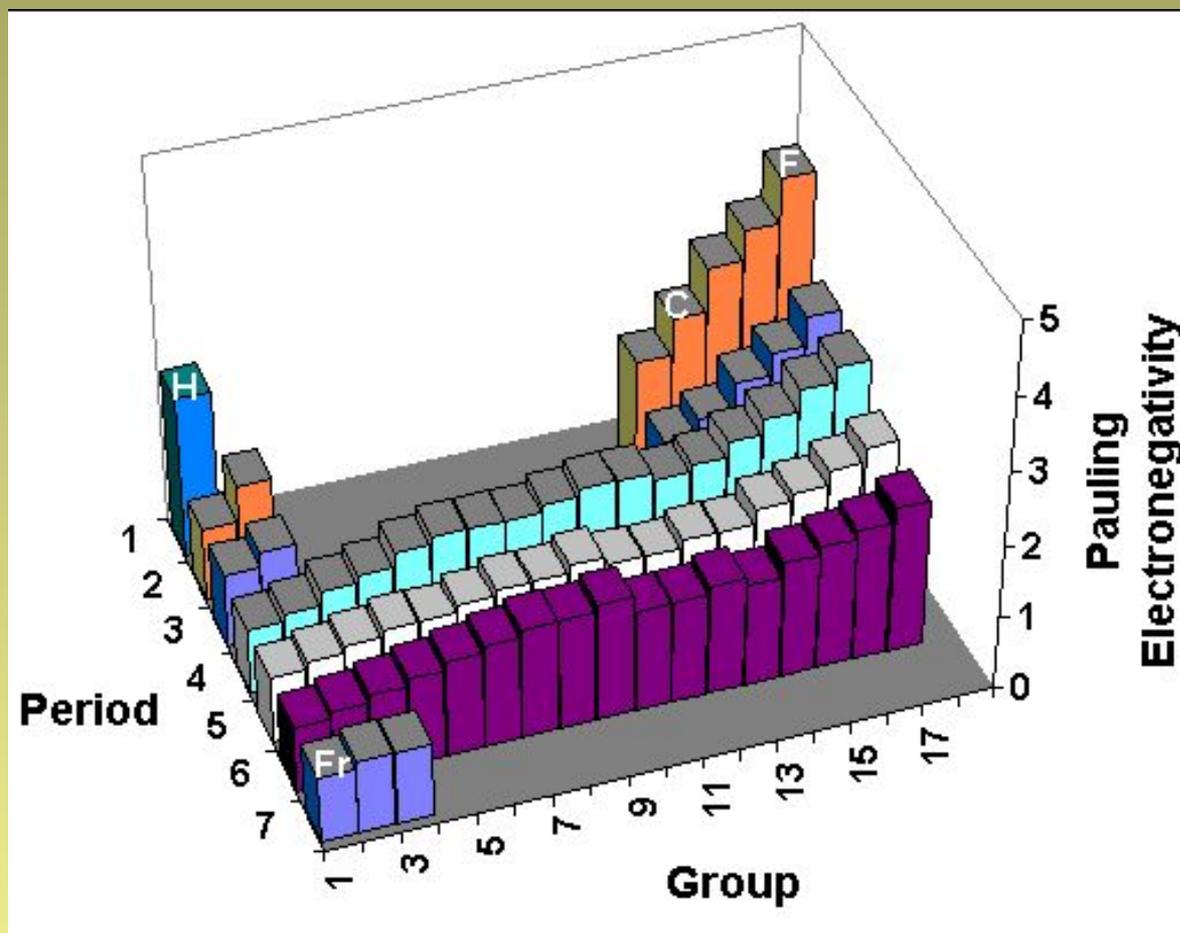


Свойства ковалентной связи

Ковалентная связь характеризуется несколькими параметрами:

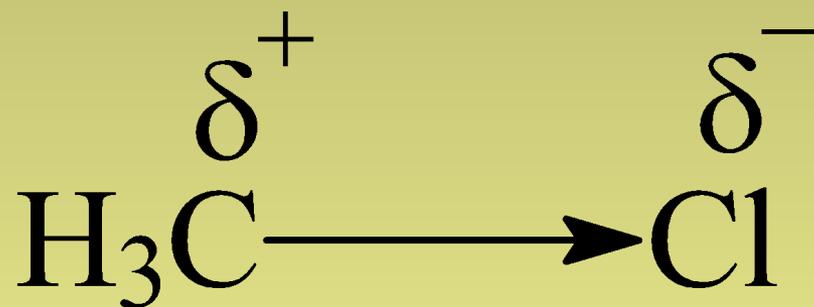
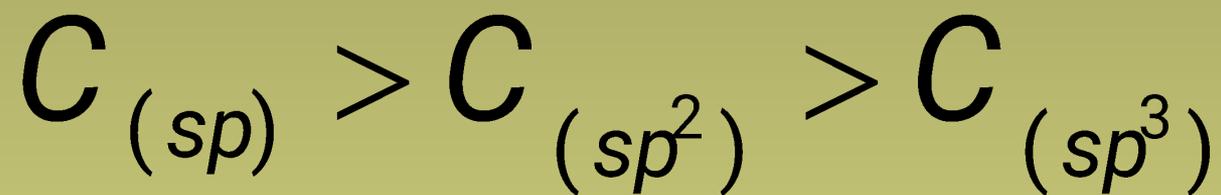
полярностью, длиной, энергией и направленностью в пространстве (углами между связями).

Полярность



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

Полярность



Поляризуемость

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

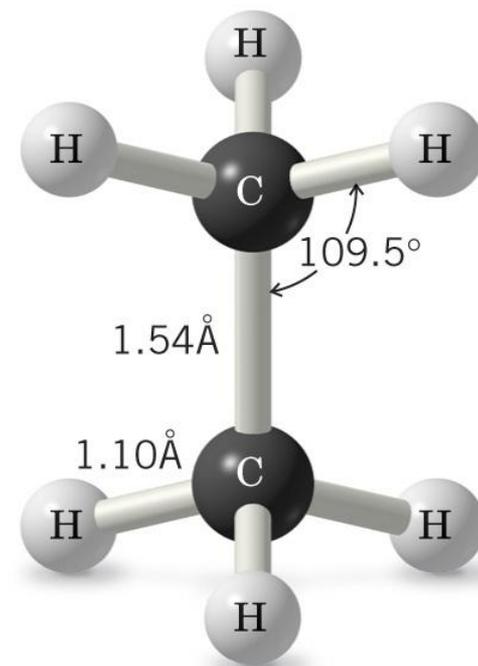
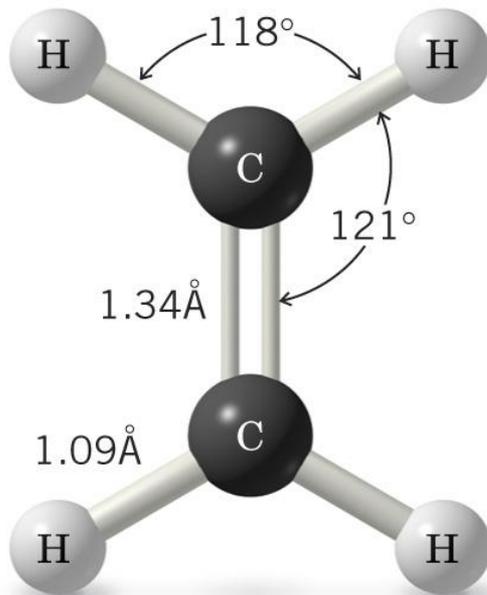
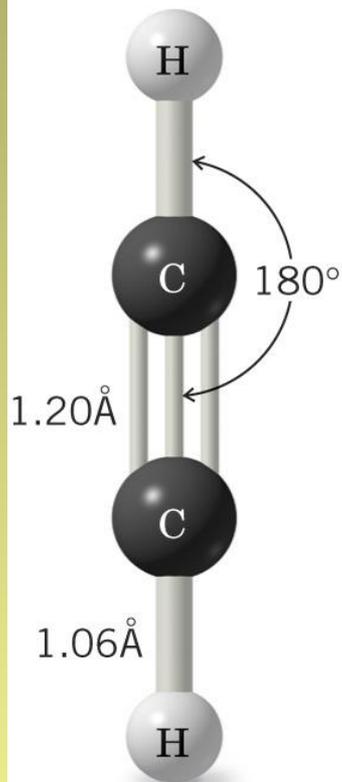
π -связи поляризуются гораздо легче, чем σ -связи

Длина связи и энергия

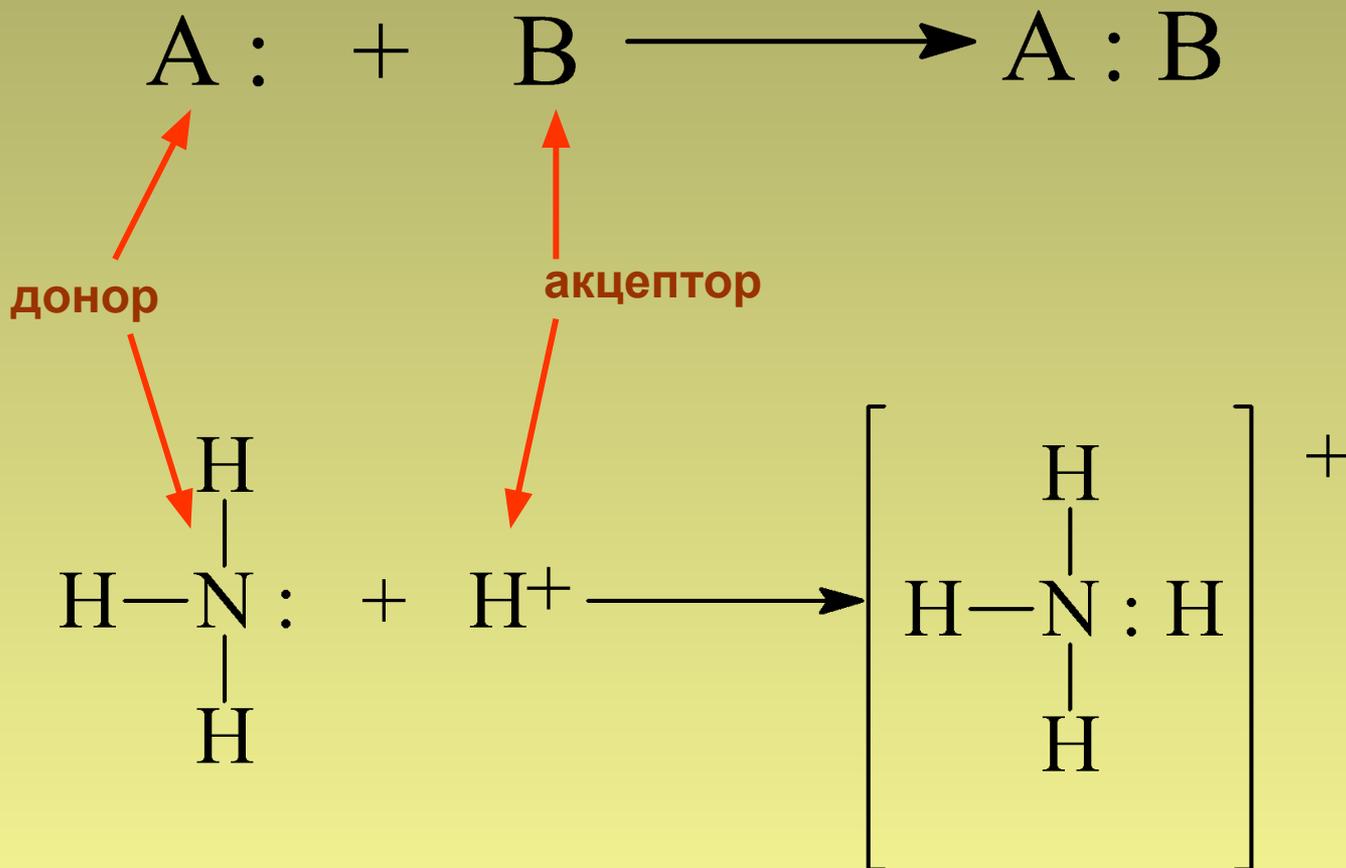
Некоторые параметры ковалентных углерод-углеродных связей

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

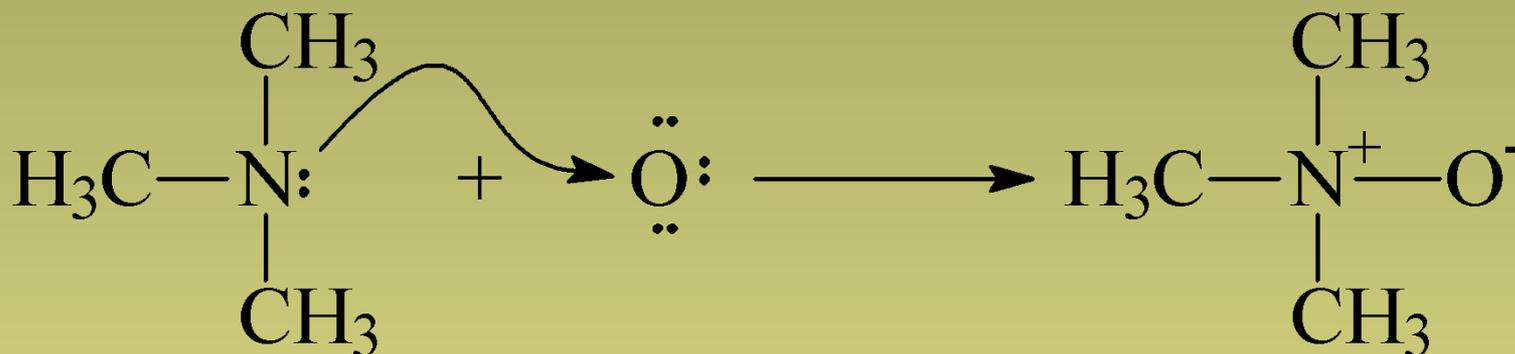
Направленность ковалентной связи



Донорно-акцепторный механизм образования ковалентной связи



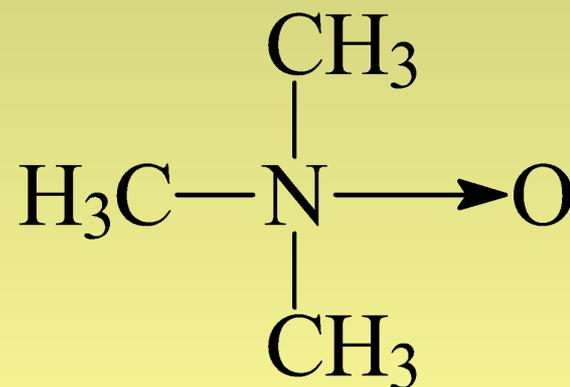
Донорно-акцепторный механизм образования ковалентной связи



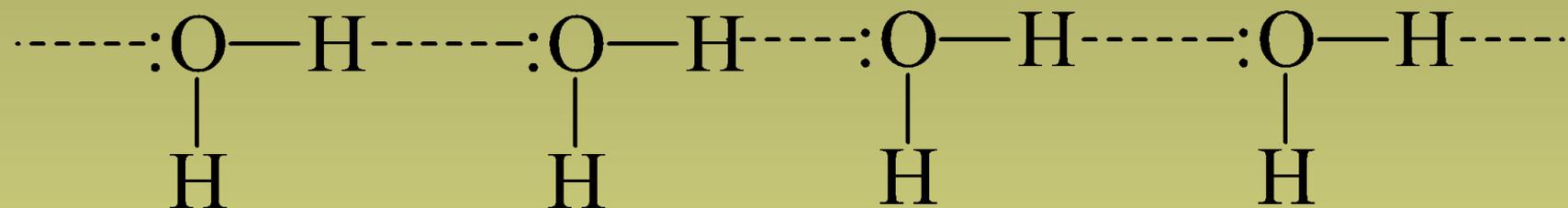
триметиламин

оксид триметиламина

*семиполярная
ковалентная связь*



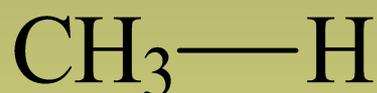
Водородная связь



12,5—20 кДж/моль

Взаимное влияние атомов в молекуле

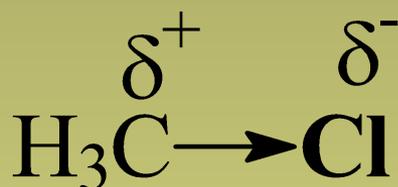
Индуктивный эффект



метан

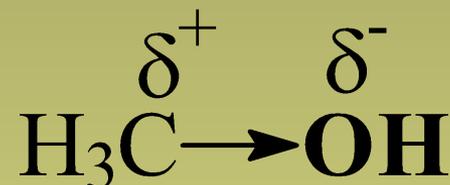
Связь С–Н

малополярна



хлорметан

Связь С–Cl полярна



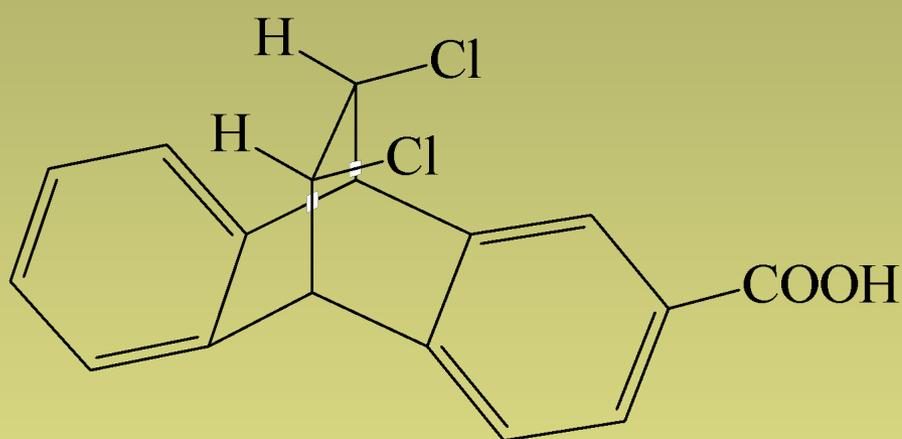
метанол

Связь С–О полярна

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

Взаимное влияние атомов в молекуле

Индуктивный эффект



$pK_a = 5,67$

I



$pK_a = 6,07$

II

Взаимное влияние атомов в молекуле

Индуктивный эффект

Электроноакцепторные заместители, т.е. атом или группа атомов, смещающие электронную плотность σ -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.).

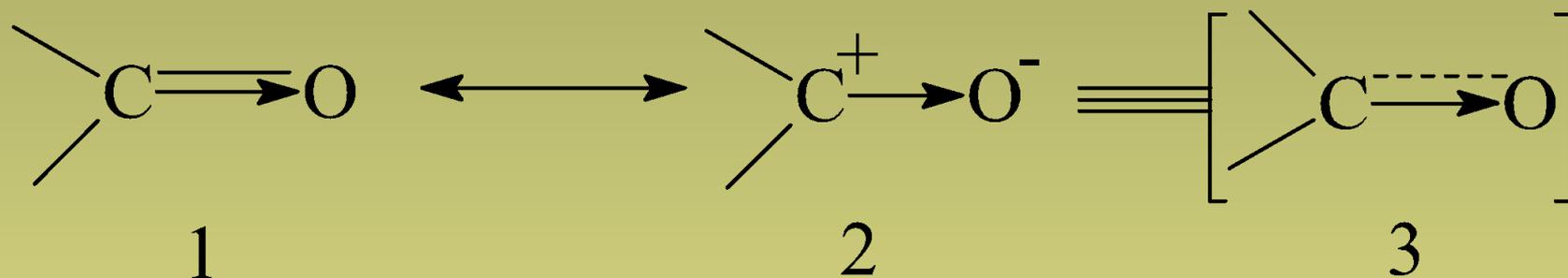
Большинство функциональных групп проявляют **-I-эффект**: $-\text{Hal}$, $-\text{NH}_2$, $-\text{OH}$, $>\text{C}=\text{O}$, $-\text{COOH}$.



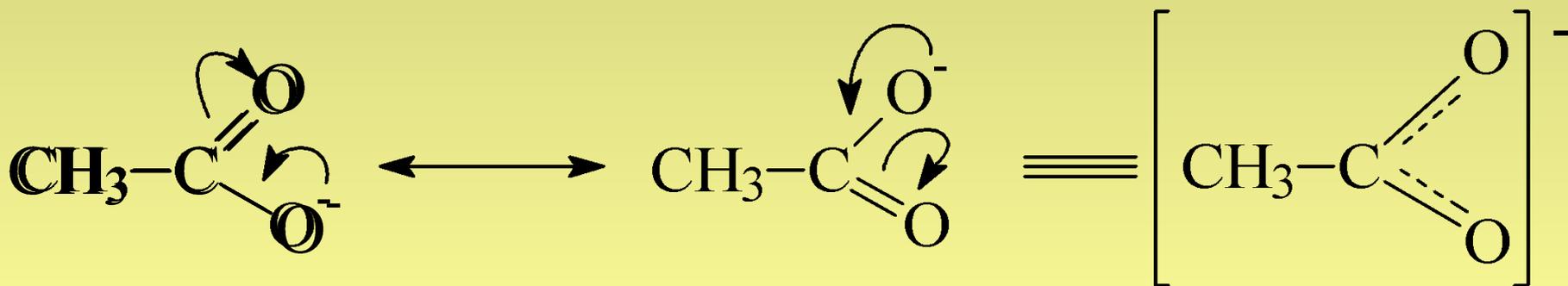
пропен

Взаимное влияние атомов в молекуле

Мезомерный эффект (эффект сопряжения)

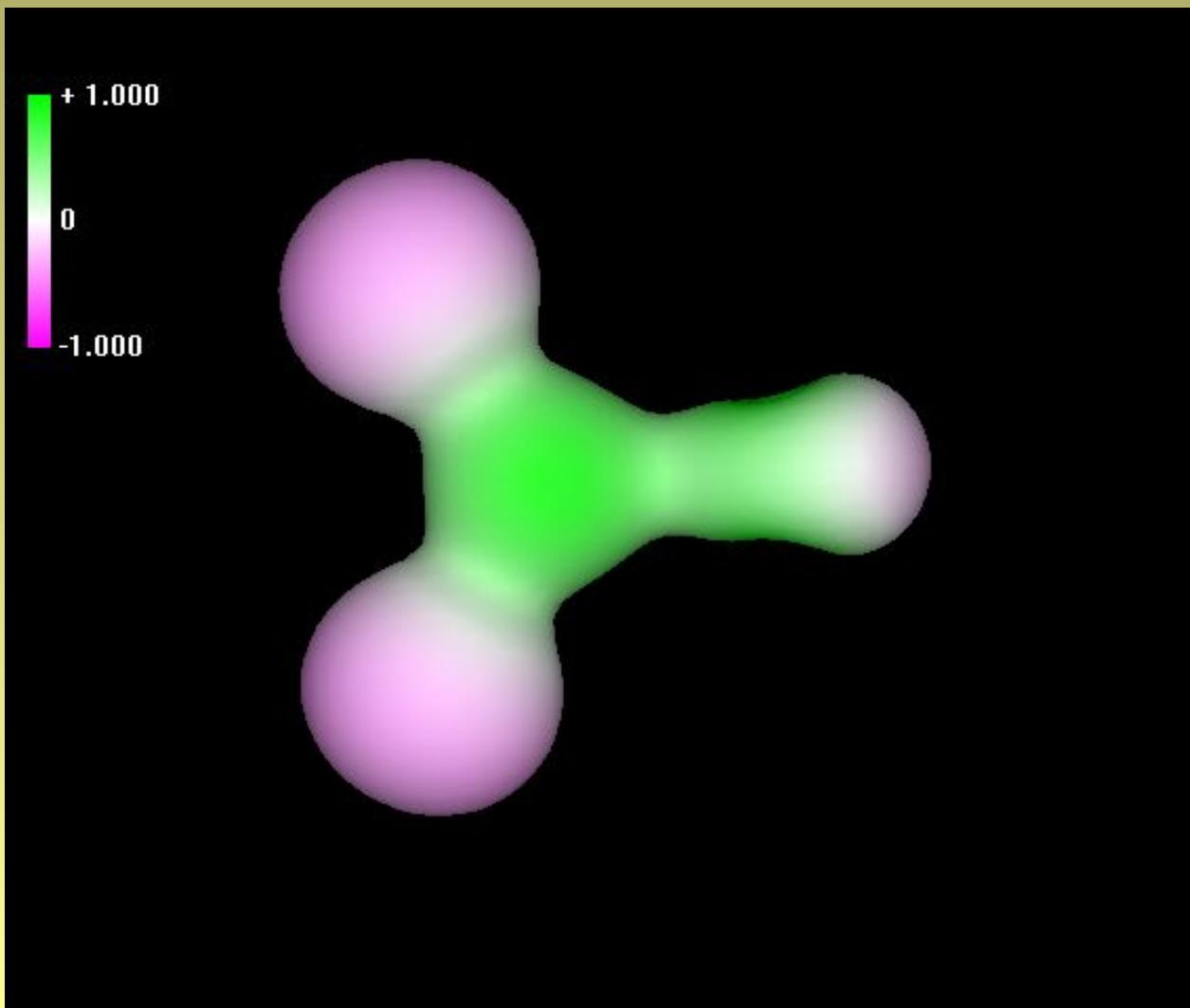


Делокализованная связь



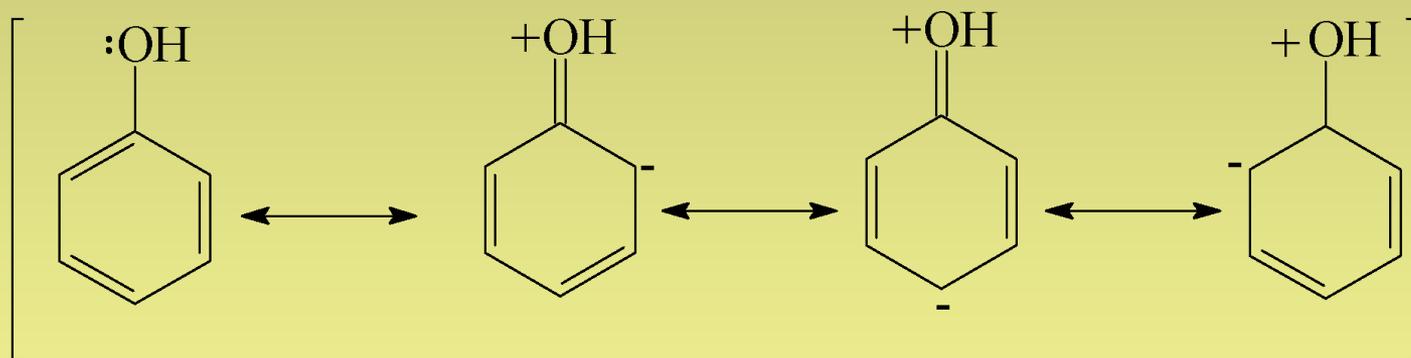
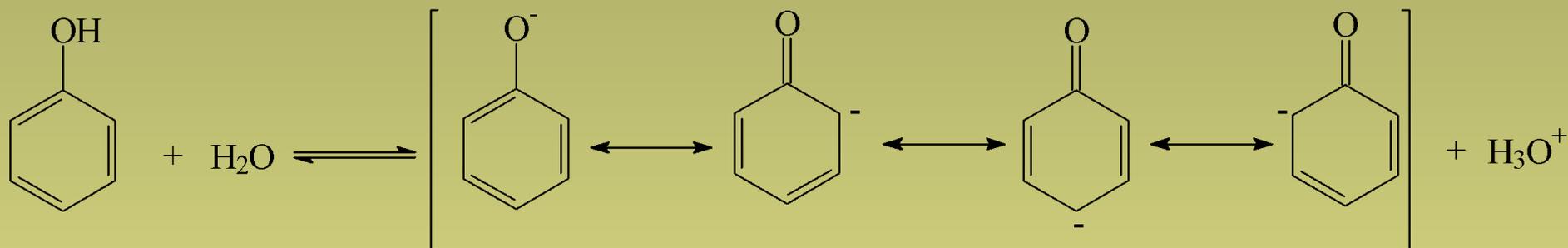
Взаимное влияние атомов в молекуле

Мезомерный эффект (эффект сопряжения)



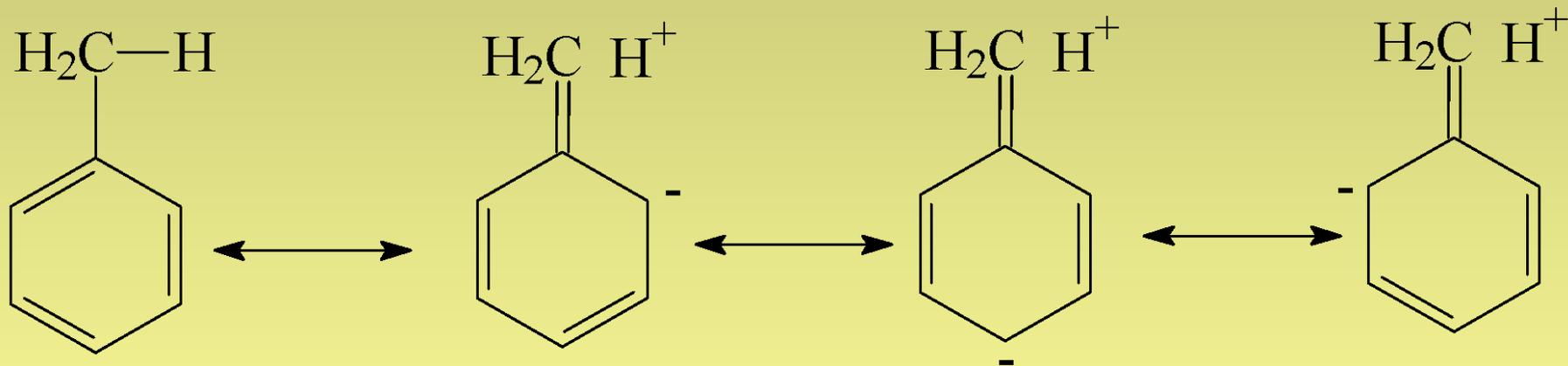
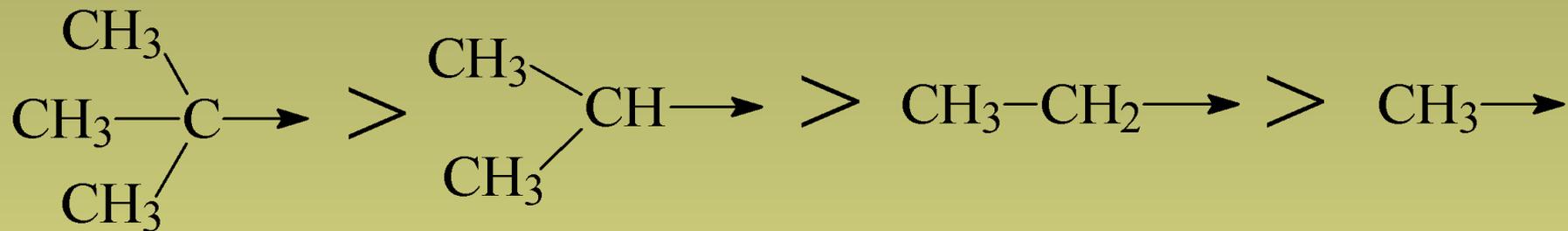
Взаимное влияние атомов в молекуле

Мезомерный эффект (эффект сопряжения)



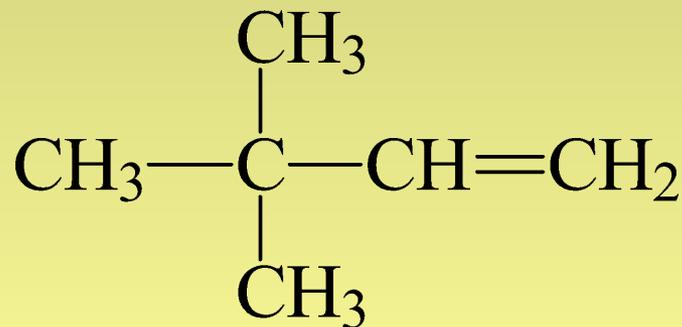
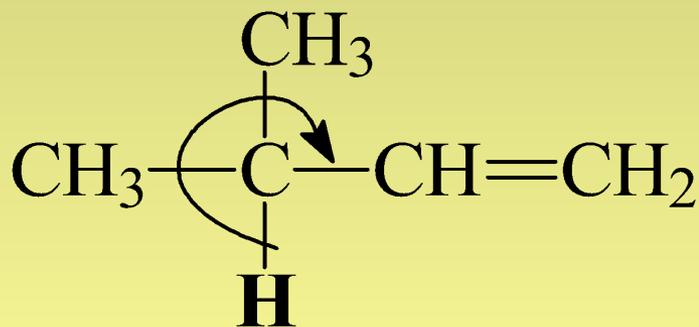
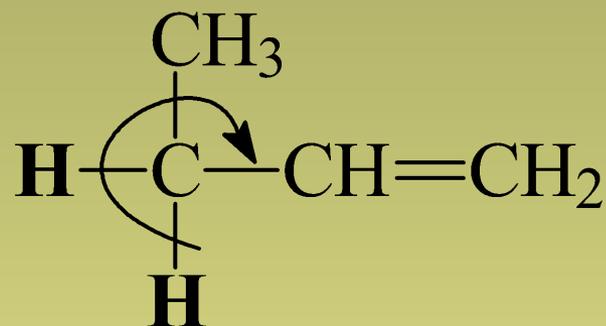
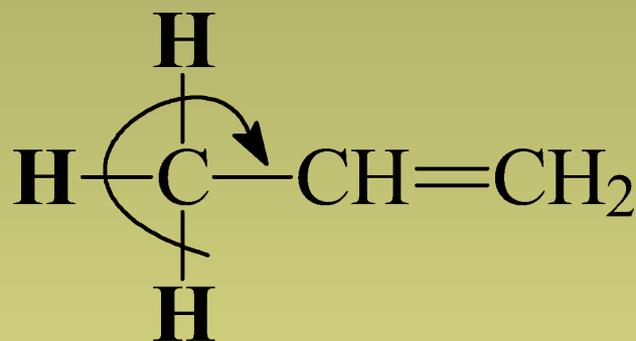
Взаимное влияние атомов в молекуле

Сверхсопряжение (гиперконъюгация)



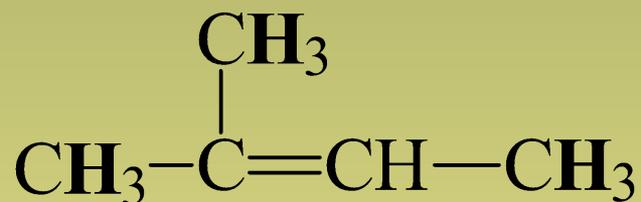
Взаимное влияние атомов в молекуле

Сверхсопряжение (гиперконъюгация)

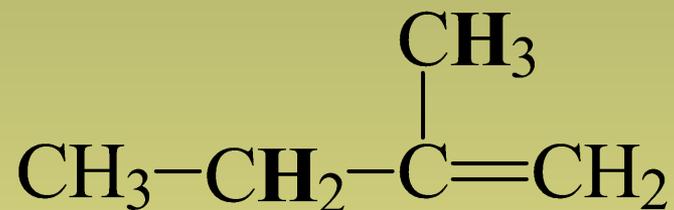


Взаимное влияние атомов в молекуле

Сверхсопряжение (гиперконъюгация)



2-метилбут-2-ен



2-метилбут-1-ен