

Лекція

Класифікація, будова та номенклатура органічних сполук.

Василишин Н. А.

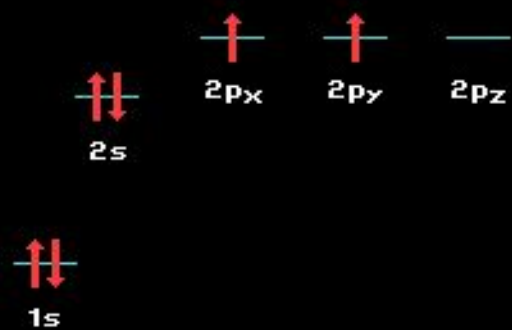
План

1. Класифікація органічних сполук.
2. Номенклатура органічних сполук.
3. Ковалентний зв'язок. Спряжені системи. Ароматичність.
4. Електронні ефекти. Кислотність та основність органічних сполук за Бренстедом.
5. Типи реакцій органічних сполук.
6. Спирти.
7. Альдегіди. Кетони.

Положення теорії Бутлерова

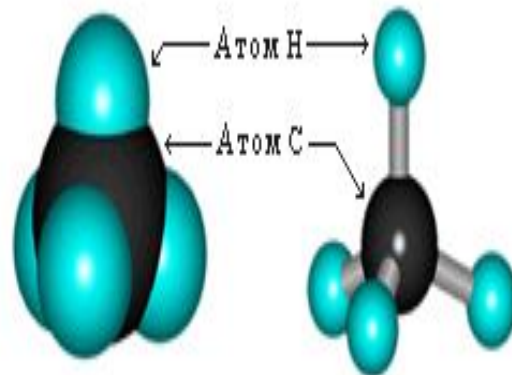
- 1. Атоми, що входять до складу молекули органічних сполук, зв'язані між собою в суворо визначеному порядку, згідно з їх валентністю. Послідовність зв'язування атомів у молекулі називається **хімічною будовою**.
- 2. **Властивості речовини залежать** не тільки від того, які атоми і в якій кількості входять до складу її молекули, але й від того, в якій послідовності вони зв'язані між собою, тобто **від хімічної будови молекули**.
- 3. Атоми або групи атомів, які утворюють молекулу, як зв'язані безпосередньо, так і зв'язані через інші атоми, **взаємно впливають одні на одних**, від чого залежить реакційна здатність молекули.
- 4. Вивчаючи реакційну здатність речовини, можна встановити її будову, і навпаки, за будовою речовини можна судити про її властивості.

Состояния атома углерода



метан

Метан CH_4

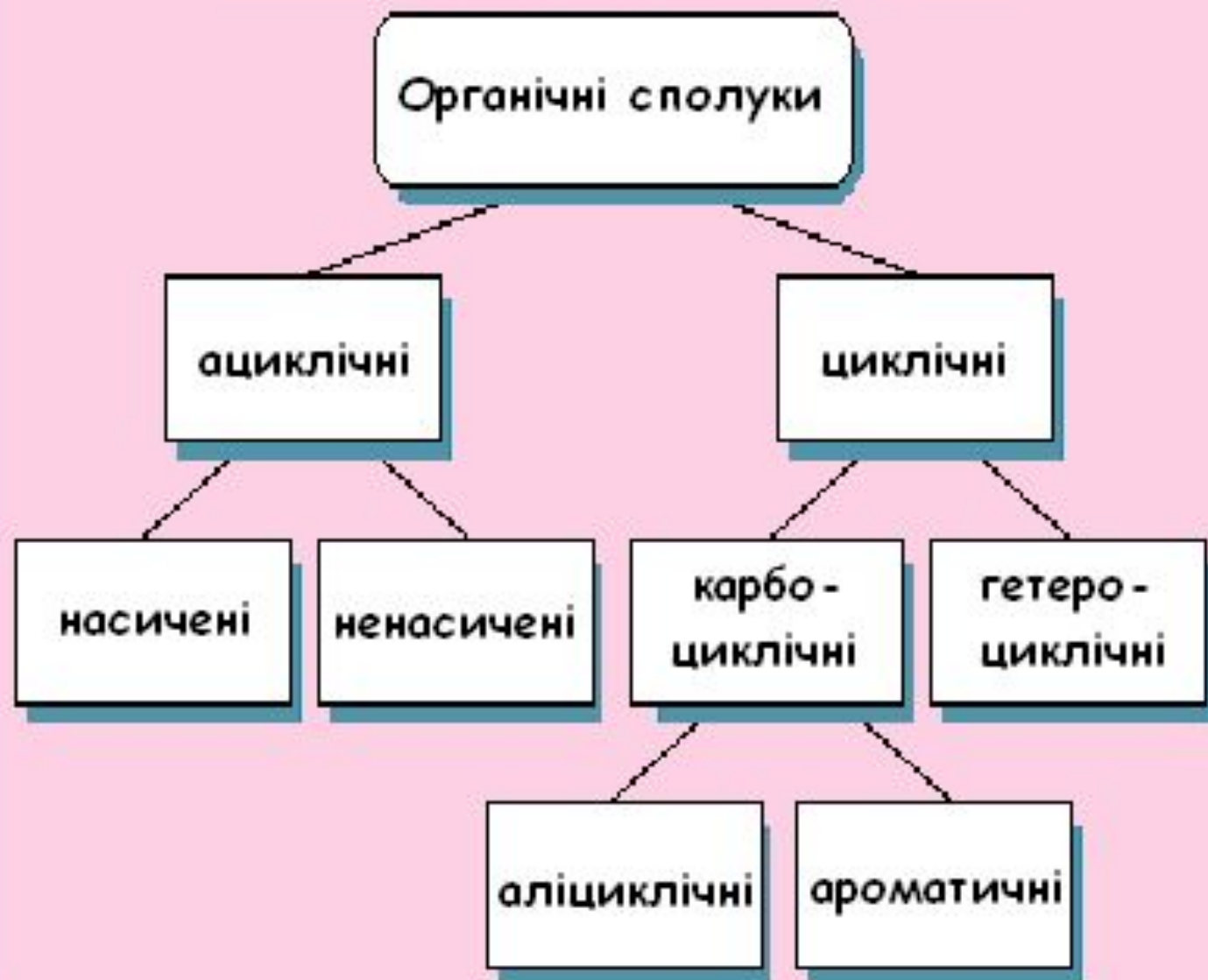


Масштабная модель
(полусферическая)

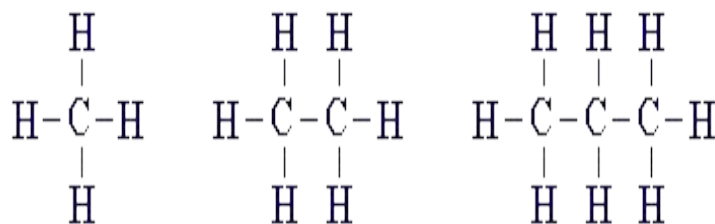
Шаростержневая
модель

Класифікація органічних сполук

запезно від будови вуглецевого скелету



АЛКАНИ (насичені вуглеводні, парафіни)



*структурные
формулы*



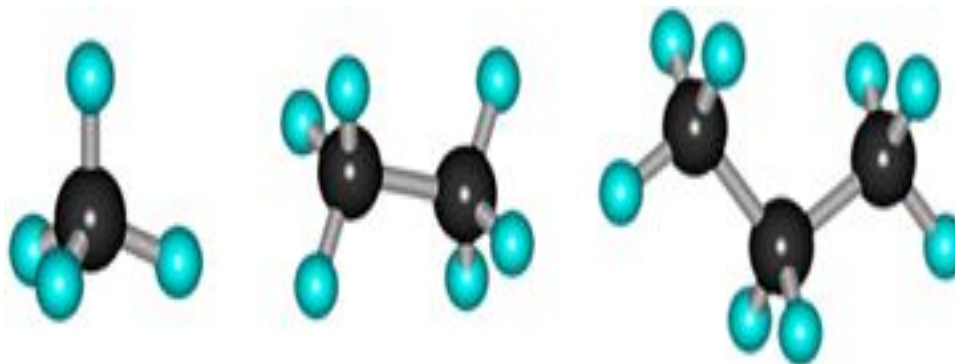
*молекулярные
формулы*

метан

этан

пропан

названия



Алкани

- CH_4 Метан CH_3 Метил
- C_2H_6 Етан C_2H_5 Етил
- C_3H_8 Пропан C_3H_7 Пропіл
- C_4H_{10} Бутан C_4H_9 Бутил
- C_5H_{12} Пентан C_5H_{11} Аміл
- C_6H_{14} Гексан C_6H_{13} Гексил

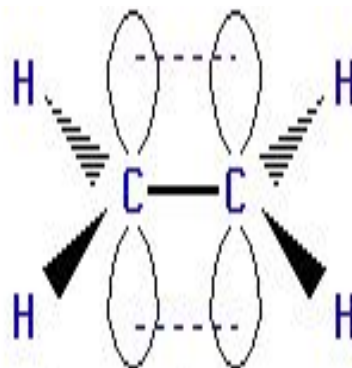
Моделі молекули етилену



Масштабная модель
(полусферическая)



Шаростержевая
модель



Атомно-орбитальная
модель

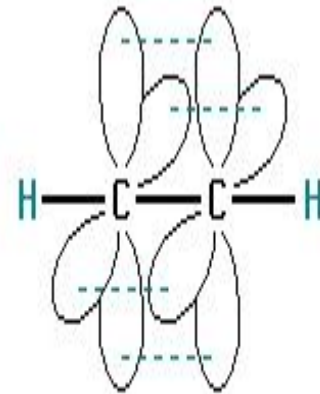
алкіні



Масштабная
модель

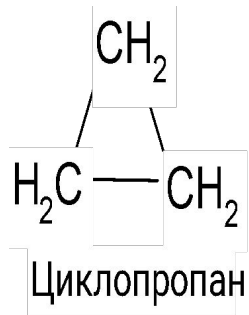


Шаростержневая
модель

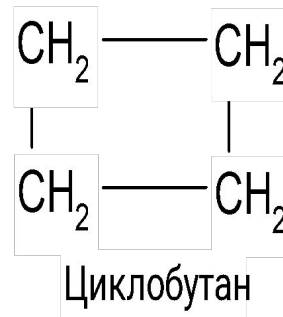


Атомно-орбитальная
модель

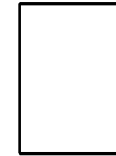
карбоциклічні: аліфатичні циклічні (аліциклічні)



або

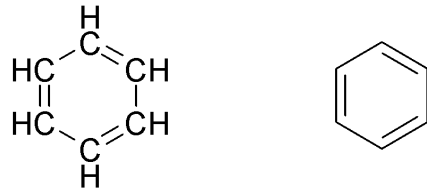


або

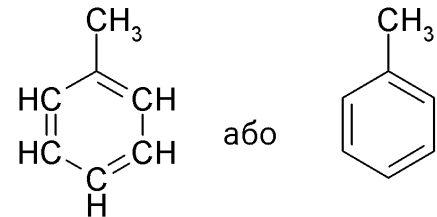


карбоциклічні: ароматичні

БЕНЗЕН (C₆H₆)



ТОЛУЕН (C₇H₈)



Всі органічні сполуки можна розглядати як вуглеводні вказаної будови або похідні вуглеводнів, одержані шляхом введення в них функціональних груп.

Функціональні групи - це замісники неуглеводневого характеру, що визначають приналежність сполуки до певного класу і одночасно її типові хімічні властивості.

класи

За природою функціональних груп похідні вуглеводнів діляться на класи:

галогенопохідні R-X, спирти і феноли R-OH,
тіоли R-SH, прості ефіри R-O-R,
аміни R-NH₂,
альдегіди і кетони R-CHO, R-CO-R,
карбонові кислоти RCOOH,
складні ефіри R-COOR,
аміди R-CONH₂

**Класи органічних сполук та функціональні групи,
що їм відповідають**

<i>Клас</i>	<i>Функціональна група</i>	<i>Загальна формула класу</i>
Карбонові кислоти	Карбоксильна (карбокси-) -COOH	R-COOH
Спирти, феноли	Гідроксильна (гідрокси-, окси-) -OH	R-OH
Альдегіди, кетони	Карбонільна (оксо-) >(C)=O	R(R')C=O
Прості ефіри	Алкоксильна -OR	R'-OR
Складні ефіри	Алкоксикарбонільна -CO-OR	R'-CO-OR
Аміни	Амінна (аміно-) -NH ₂ (NHR ₂ , NR ₃)	R-NH ₂
Аміди	Карбоксамідна (амідна) -CO-NH ₂	R-CO-NH ₂
Нітросполуки	Нітрогрупа -NO ₂	R-NO ₂
Нітрили	Нітрильна (ціано-) -C≡N	R-C≡N
Тіоли (тіоспирти, меркаптани)	Тіольна (меркапто-) -SH	R-SH
Тіоефіри (сульфіди)	Алкілтіольна (сульфідна) -SR	R'-SR
Сульфокислоти	Сульфонова (сульфо-) -SO ₃ H	R-SO ₃ H
Галогенопохідні вуглеводнів	Галогенова -Cl, -Br, -F, -I	R-Hal

Порядок старшинства функціональних груп,
що вказуються і в префіксі і в закінченні

- **Функціональна група**

- -COOH
- -SO₃H
- -C≡N
- -HC=O
- =C=O
- -OH
- -SH
- -NH₂

- **Закінчення**

- -ова кислота
- -сульфо кислота
- -нітрил
- -аль
- -он
- -ол
- -тіол
- -амін

Функціональні (характеристичні) групи, що вказуються в префіксах або закінченнях органічних сполук (перелічені в порядку зменшення старшинства)

<i>Функціональна група</i>	<i>Назва в префіксі</i>	<i>Назва в закінченні</i>
$-\text{COOH}$	Карбокси-	-ова кислота
$-\text{SO}_3\text{H}$	Сульфо-	-сульфонова кислота
$-\text{(C)}\equiv\text{N}$	-	-нітрил
$-\text{HC}=\text{O}$	Оксо-	-аль
$-\text{(C)}=\text{O}$	Оксо-	-он
$-\text{OH}$	Гідрокси- (окси-)	-ол
$-\text{SH}$	Меркапто-	-тіол
$-\text{NH}_2$	Аміно-	-амін

а) радикали з одним вільним зв'язком:

CH_3- (метил)

CH_3-CH_2- (C_2H_5-) (етил)

$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ (C_3H_7-) (пропіл)

$\text{CH}_2=\text{CH}-$ (етеніл; вініл)

$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-$ (пропен-2-іл; аліл)

C_6H_5- (феніл)

$\text{C}_6\text{H}_5-\text{CH}_2-$ (бензил)

Радикали з одним вільним зв'язком

CH_3- метил

CH_3-CH_2- C_2H_5- етил

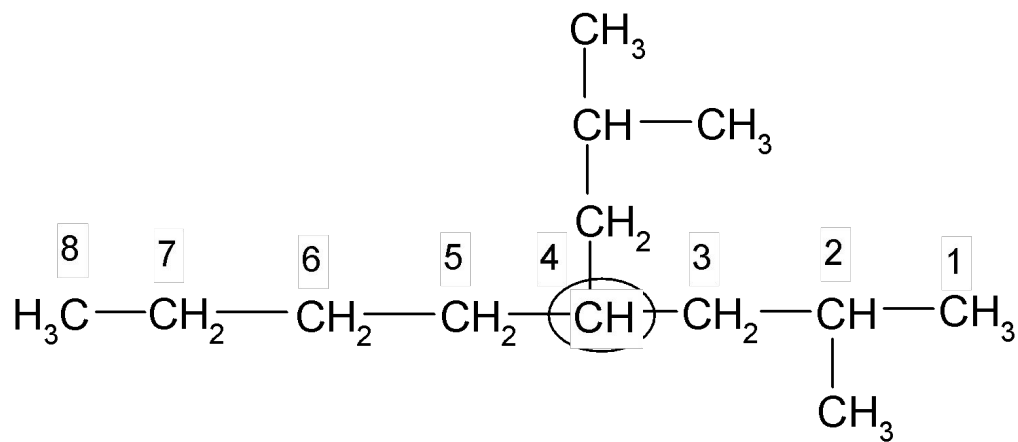
$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ пропіл

C_6H_5- феніл

Міжнародна номенклатура (IUPAC).

- Правила сучасної номенклатури були розроблені у 1957 році на XIX конгресі Міжнародного союзу теоретичної і прикладної хімії (**I**nternational **U**nion of **P**ure and **A**ppplied **C**hemistry – IUPAC).

4-ізобутилоктан



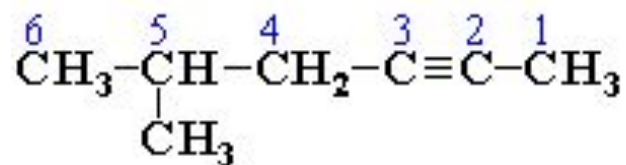
Замісникова номенклатура

- Правила номенклатури.
- **1.** При утворенні назв за замісничковою номенклатурою органічні сполуки розглядають як похідні найпростіших вуглеводнів, у молекулі яких один або декілька атомів Гідрогену замішені на інші атоми або групи атомів, які називаються **замісниками**.
- **2.** Визначають, які функціональні групи входять до складу сполуки і вибирають серед них старшу, якщо вона є:
- $-\text{COOH} > -\text{SO}_3\text{H} > -\text{COOR} > -\text{C(O)Cl} > -\text{C(O)NH}_2 > -\text{C}\equiv\text{N} > -\text{C(O)H} > >\text{C=O} > -\text{OH} > -\text{SH} > -\text{NH}_2 > -\text{Hal (F, Cl, Br, I)}$.

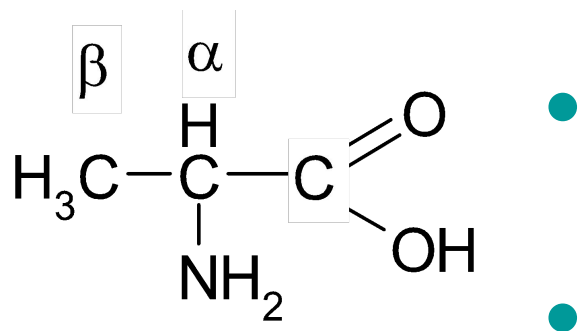
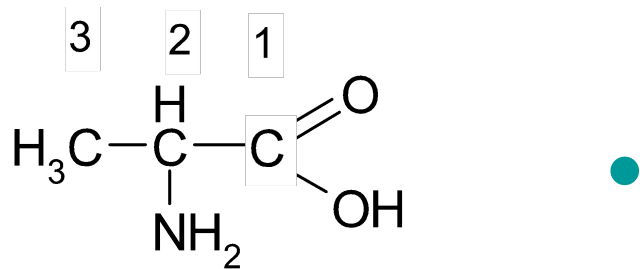
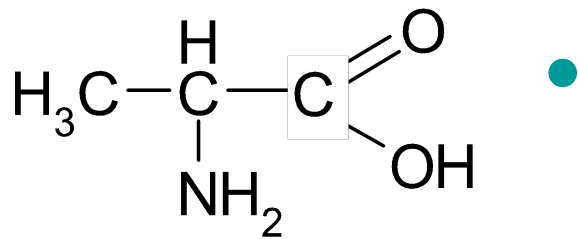
Замісникова номенклатура

- **З.** Визначають родоначальну структуру молекули. Це є структурний фрагмент молекули, що лежить в основі назви.
- В ациклічних сполуках – це головний вуглецевий ланцюг, у карбоциклічних і гетероциклічних – цикл.
- ***За головний вуглецевий ланцюг обирають той, котрий містить максимальне (у порядку зменшення значущості число: 1) функціональних груп; 2) кратних зв'язків; 3) атомів Карбону; 4) замісників.***
- ***Замісником*** називають будь-який атом або групу атомів, котрі не входять до родоначальної структури. Поняття “замісник” включає у себе функціональну групу і радикал.

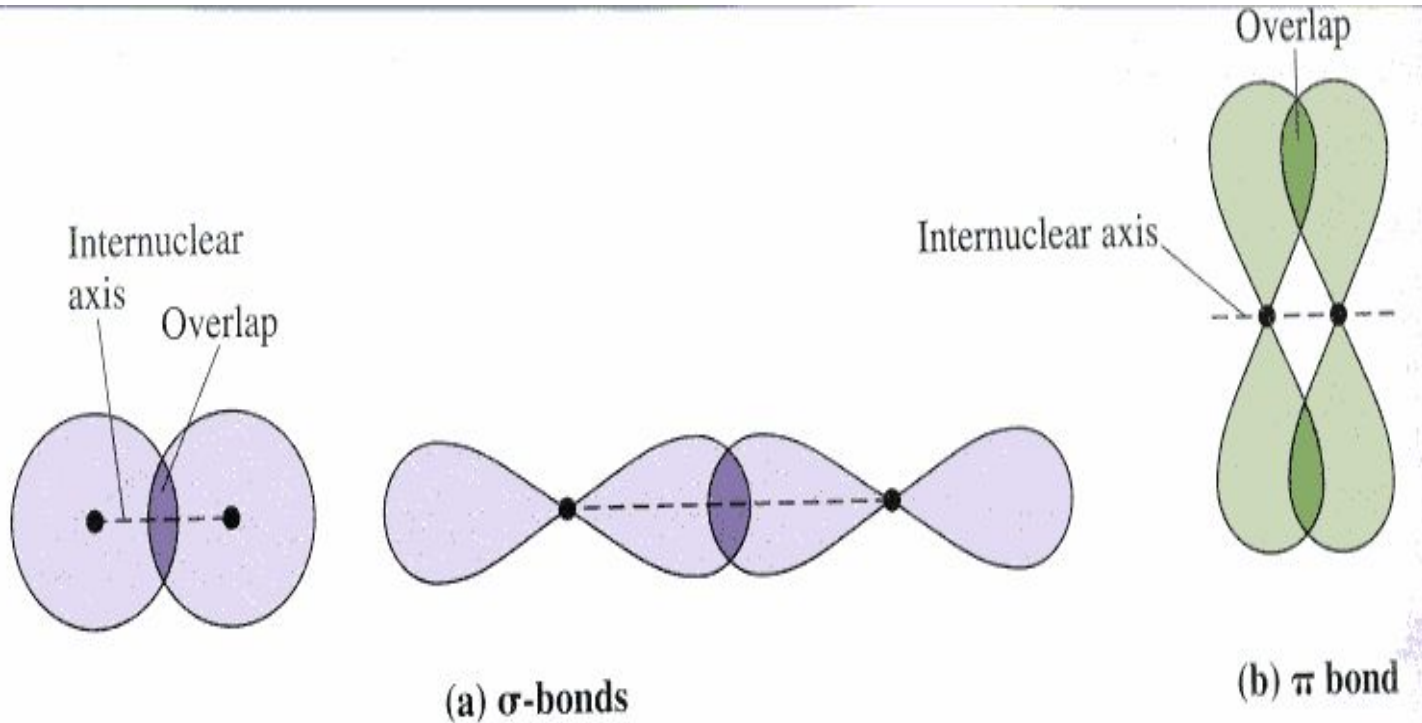
НАЗВИ

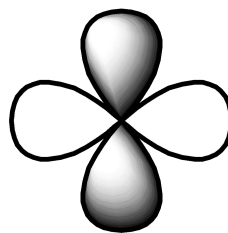


5-метилгексин-2

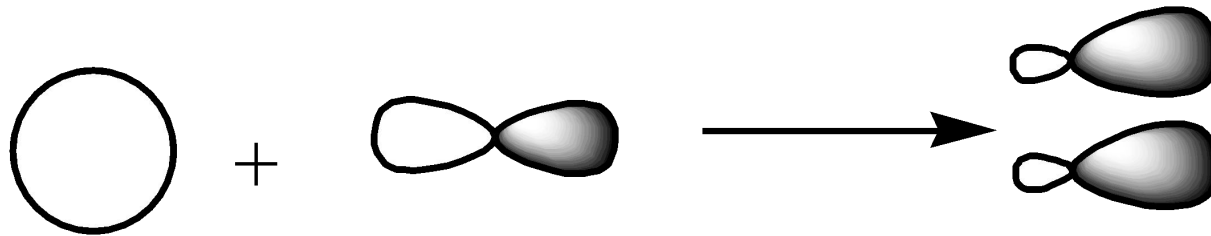


Ковалентні зв'язки

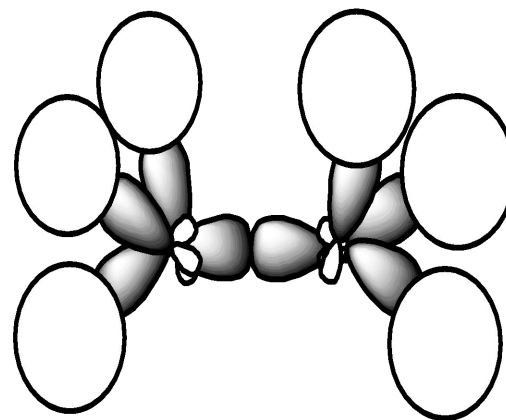
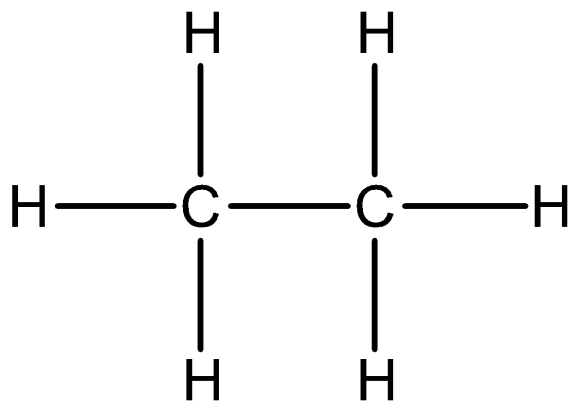




sp-гібридизація атомних орбіталей

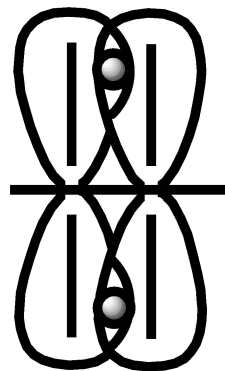


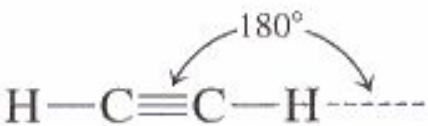
3
етан sp



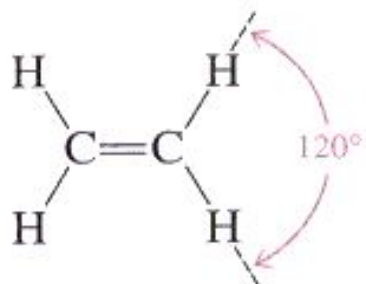
π -зв'язок – це зв'язок, що утворюється при перекриванні орбіталей перпендикулярно до лінії зв'язку.

$$E(C=C) = \text{кДж/моль} \quad C = 0,134 \text{ нм}$$

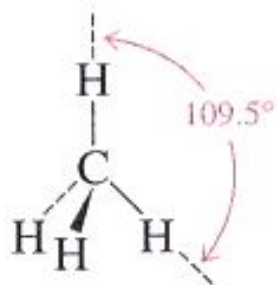




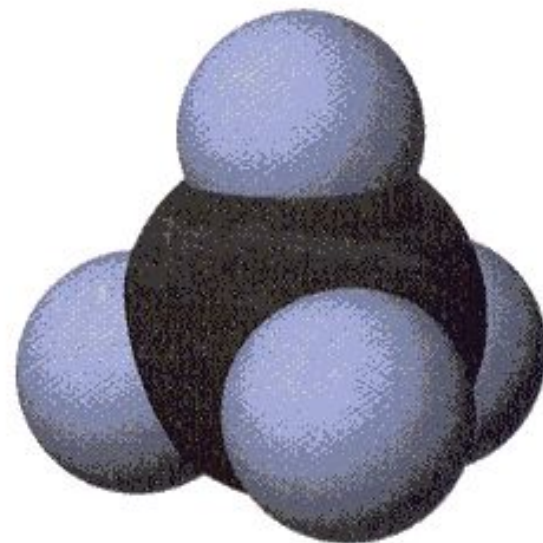
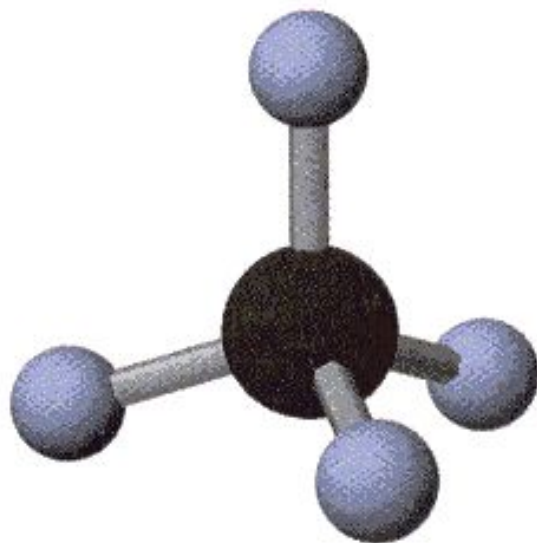
Ethyne—a linear molecule with bond angles of 180°



Ethene—a flat molecule with bond angles of 120°



Methane—a tetrahedral molecule with bond angles of 109.5°



Електронні ефекти

Характерні риси індукційного ефекту.

1. Індукційний ефект впливає на всі атоми насиченого ланцюга в одному напрямку. При цьому І-ефект може бути “+” або “-” направленим. Знак визначають по частковому заряду, який набуває замісник, який викликає даний ефект. Напрямок зсуву заряду позначається прямими стрілками. Електроноакцепторні замісники викликають $-I$, а електронодонорні $+I$.
І ефект $\text{H}=\text{O}$ (умовно) $\text{C}-\text{N}$ має дипольний момент, $0,3\text{D}$.

Шкала Полінга

(
електронегативність атомів)



Індуктивний ефект – перерозподіл електронної густини вздовж зв'язків:

σ-

зв 1)Негативний

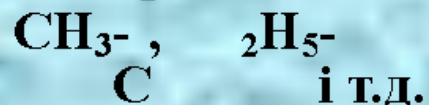


**Максимальним негативним індукційним ефектом володіють такі замісники:
—Hal, —NH₂, —OH, —CON, —COOH**

б) позитивний ефект:



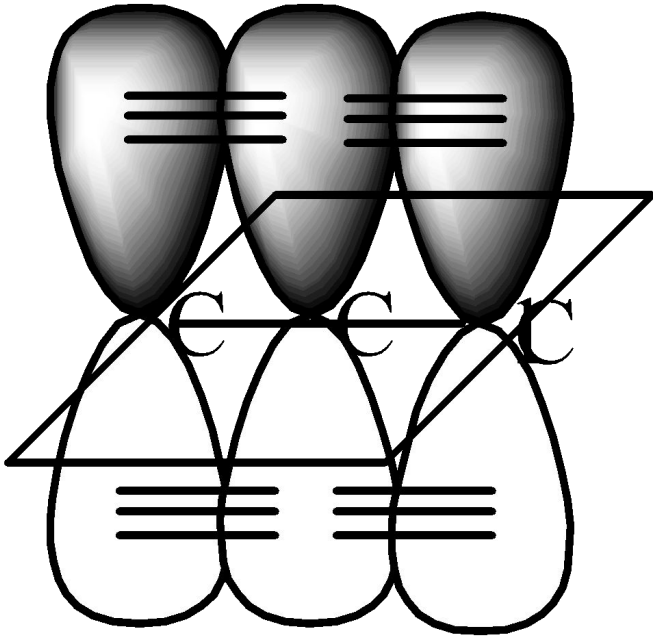
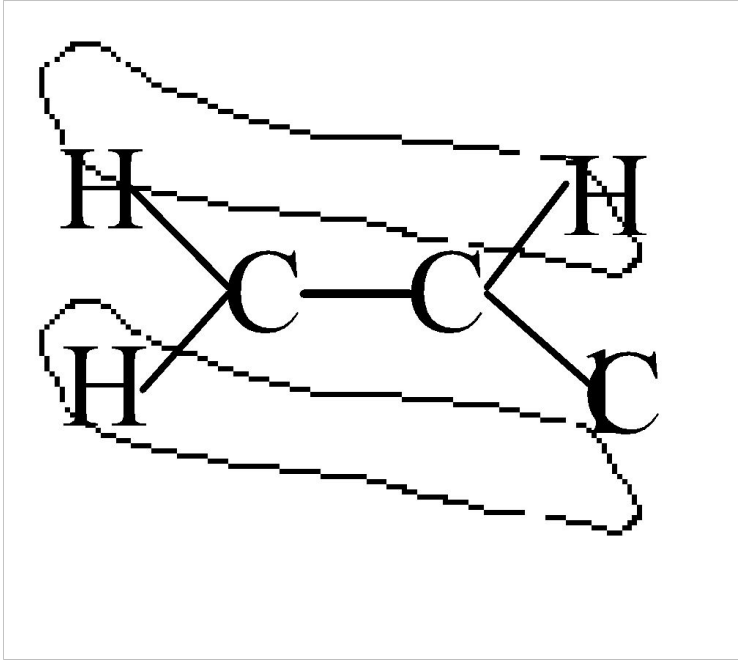
Максимальним позитивним індукційним ефектом володіють алкільні радикали:



Мезомерний ефект –

різновид електронного ефекту, що передається по системі зв'язків.

- Передача взаємного впливу атомів, перерозподіл густини в молекулі, що супроводжується не через систему σ -зв'язків, а через систему, в основному, p -і p (неподільних пар електронів).
- спостерігається в спряжених системах, які містять p -зв'язки неподільні електронні пари або σ -C—N зв'язки, віддалені від p -електронів, або один від одного простим σ -зв'язком.



Критерії ароматичності аренів:

- Атоми Карбону в sp^2 -гібридизованому стані утворюють циклічну систему.
- Атоми Карбону розташовуються в одній площині (цикл має плоску будову).
- Замкнута система зв'язаних зв'язків містить $4n+2$ p -електронів (n – ціле число) (підпорядкування правила Хюккеля).
- Цим критеріям повністю відповідає молекула бензену **C₆H₆**.

Ізомерія органічних сполук

Ізомерія

Структурна

Статична
1. Ізомерія вуглецевого скелету
2. Ізомерія положення функціональної групи
3. Ізомерія самих функціональних груп (метамерія)

Динамічна
(таутомерія)

Просторова (Стереοізомерія)

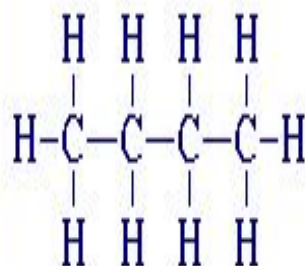
Конфігураційна Конформаційна
(поворотна)

Оптична Геометрична

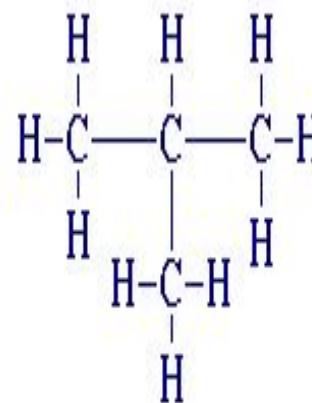
1. Енантіомерія
2. Діастереомерія

бутан

Изомеры состава C_4H_{10}



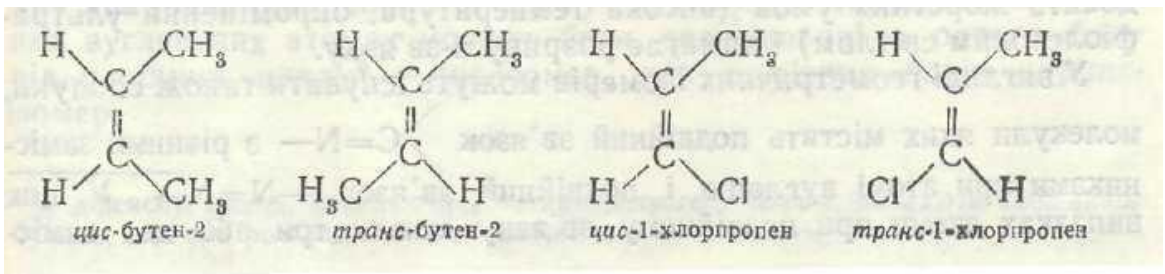
н-Бутан
(т.кип. -0.5°C)



Изобутан
(т.кип. -11.4°C)

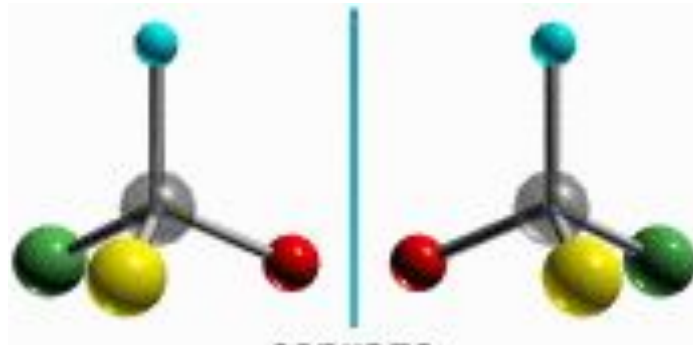
Просторова будова





Дзеркальна (оптична) ізомерія

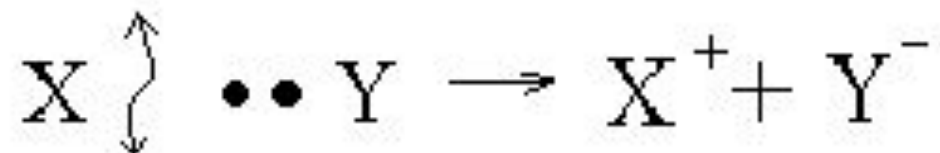
оптичними ізомерами називаються просторові ізомери, молекули яких відносяться між собою як предмет і несумісне з ним дзеркальне зображення.



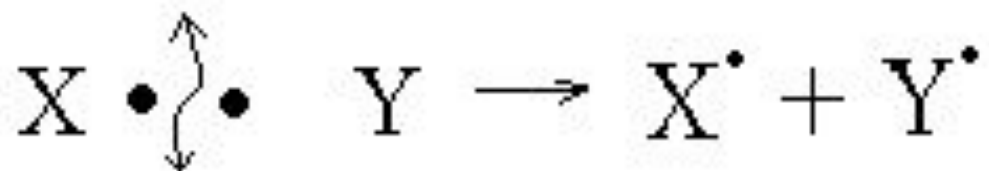
Реакції в біоорганічній хімії:

І За механізмом розщеплення хімічних зв'язків:

1.

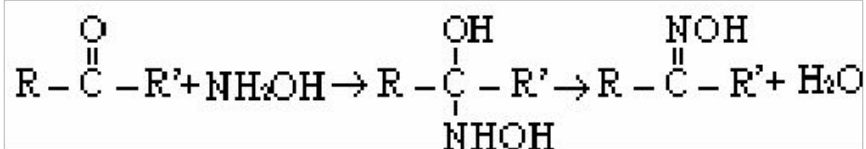


2.



II За спрямованістю перетворень:

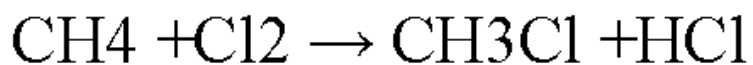
1. Реакції приєднання



2. Реакції відщеплення (елімінування)

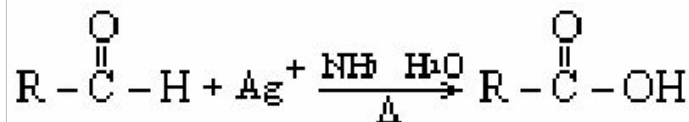


3. Реакції заміщення



4. Реакції перегрупування

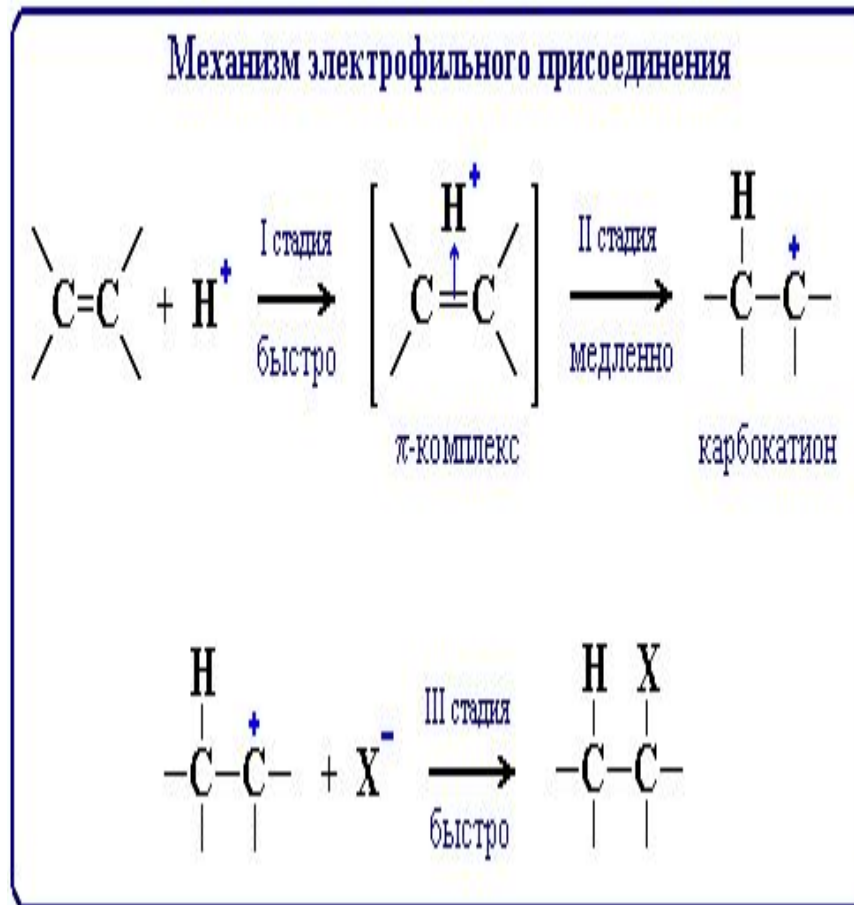
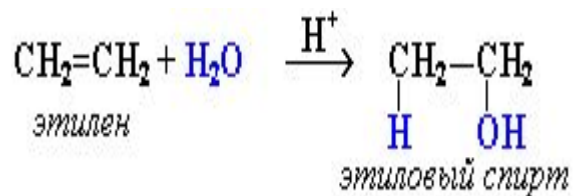
5. Реакції окиснення та відновлення



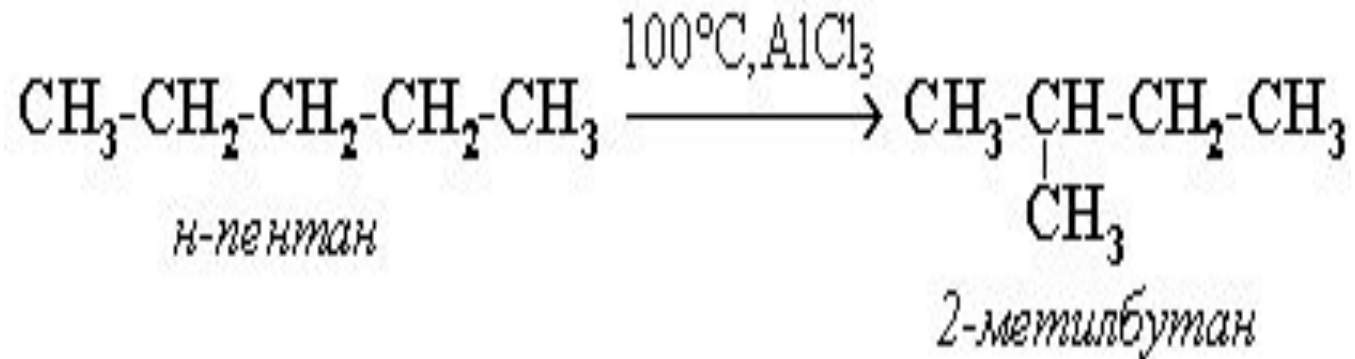
III За кількістю молекул, що беруть участь в реакції:

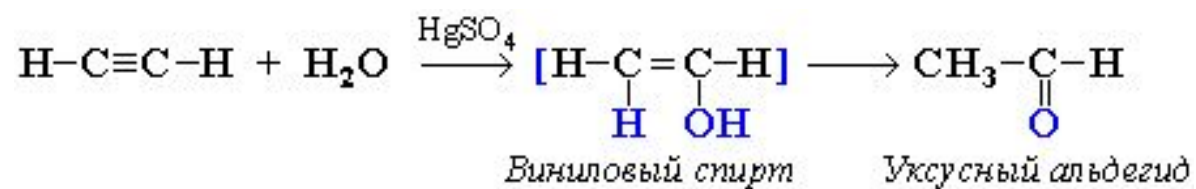
- мономолекулярні
- бімолекулярні

присоединения



Ізомеризація алканів





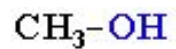
СПИРТИ

- за числом гідроксильних груп спирти поділяються на
 - **одноатомні** (одна група -ОН),
 - **багатоатомні** (дві й більше групи -ОН).
- Приклади:
 - **двохатомний спирт** – етиленгл**двохатомний спирт** – етиленглдвохатомний спирт – етиленглі**коль** (етандіол)
- **НО-СН₂-СН₂-ОН**
 - **триатомний спирт** – гл**триатомний спирт** – глітриатомний спирт – глі**церин** (пропантріол-1,2,3)
- **НО-СН₂-СН(ОН)-СН₂-ОН**

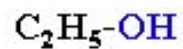
СПИРТИ

- Залежно від того, з яким атомом вуглецю (первинним, вторинним чи третинним) зв'язана гідроксигрупа, розрізняють спирти
 - первинні $R-CH_2-OH$,
 - вторинні R_2CH-OH ,
 - третинні R_3C-OH .

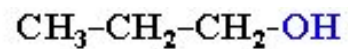
Номенклатура спиртів



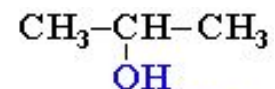
метанол



етанол



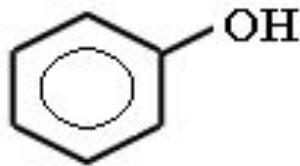
пропанол-1



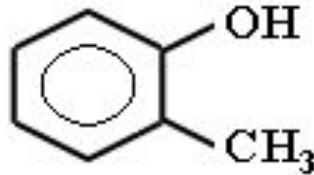
пропанол-2

Феноли - гідроксисполуки, у молекулах яких ОН-групи зв'язані безпосередньо з бензольним ядром.

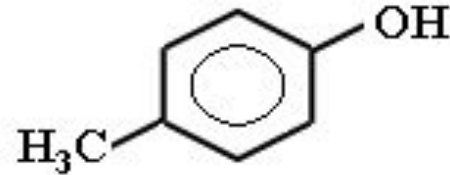
- Феноли



Фенол

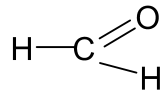


орто-Крезол
(1-гідрокси-
2-метилбензол)



пара-Крезол
(1-гідрокси-
4-метилбензол)

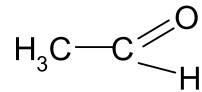
альдегіди



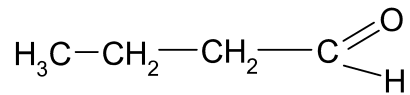
Мурашиний (формальдегід)

Метаналь

– 40 % розчин – формалін



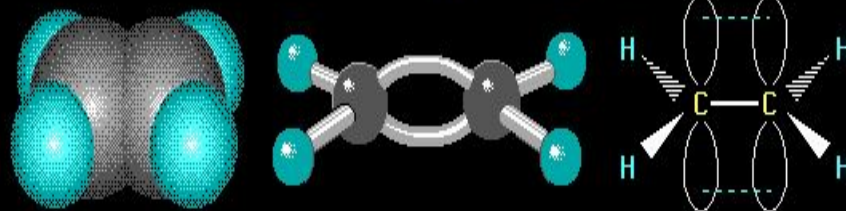
Оцтовий (ацетальдегід)



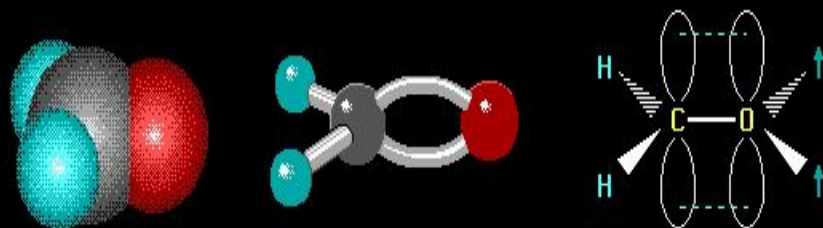
Пропіоновий

МОДЕЛИ МОЛЕКУЛ, СОДЕРЖАЩИХ АТОМЫ
В sp^2 -ГИБРИДИЗОВАННОМ СОСТОЯНИИ

Этилен $H_2C=CH_2$



Формальдегид $H_2C=O:$

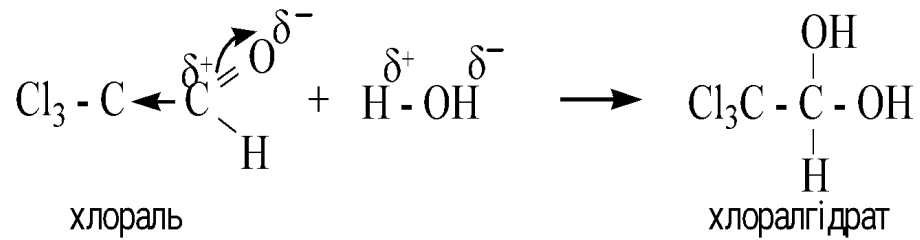
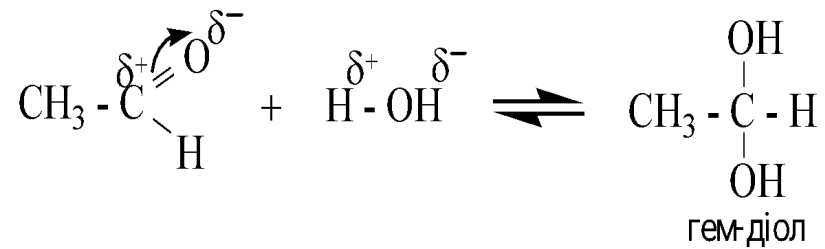


Масштабные модели
(полусферические)

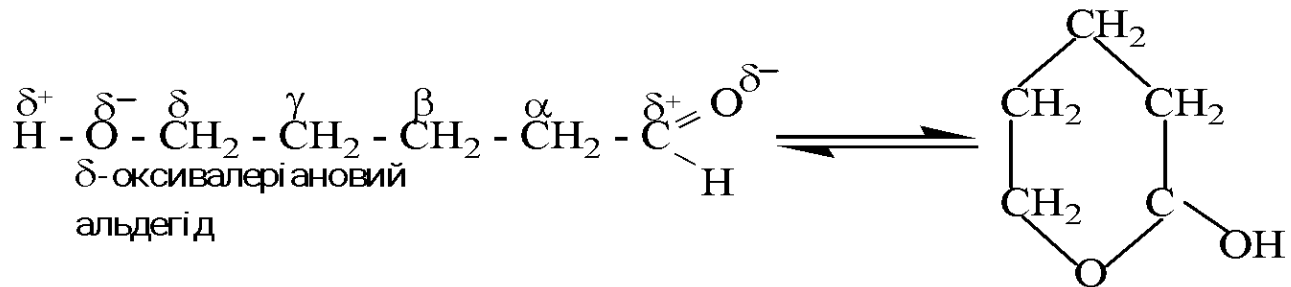
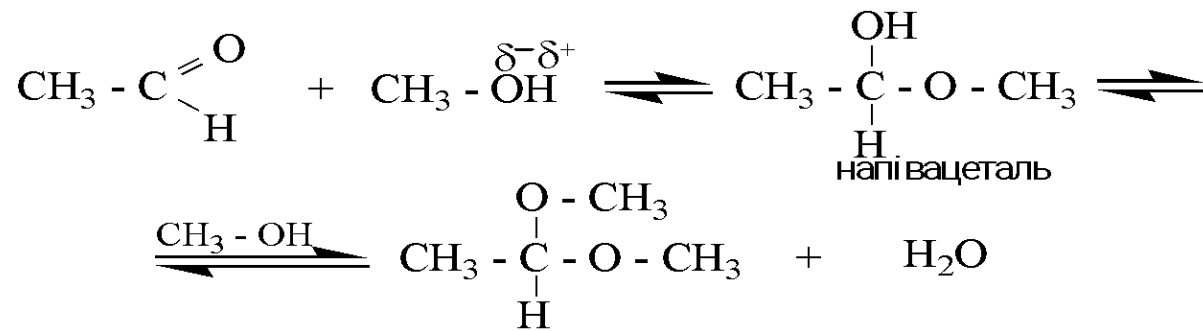
Шаростержневые
модели

Атомно-орбитальные
модели

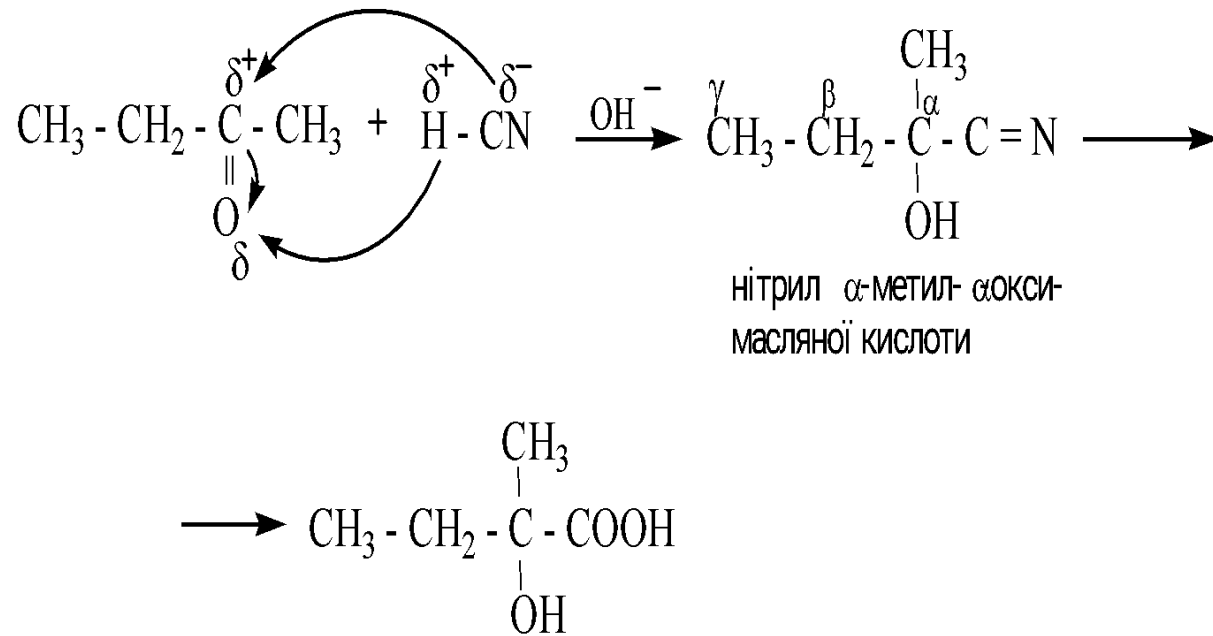
Приєднання води – утворення гідратів альдегідів



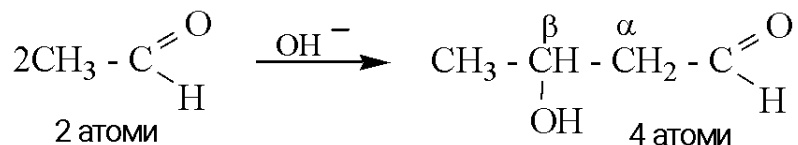
Приєднання спиртів до альдегідів – утворення напівацеталів та ацеталів



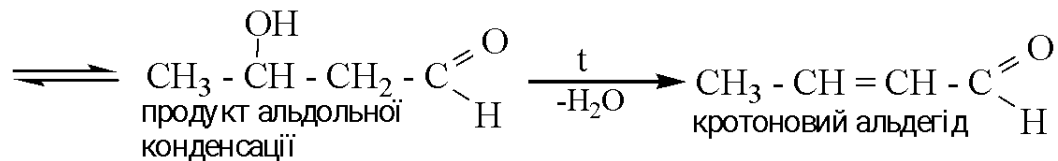
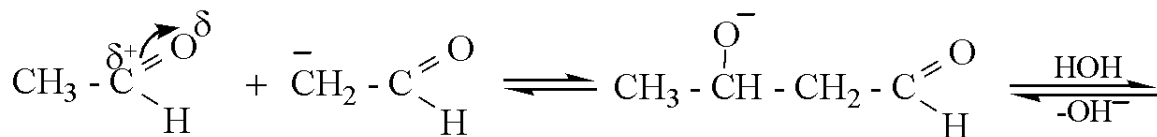
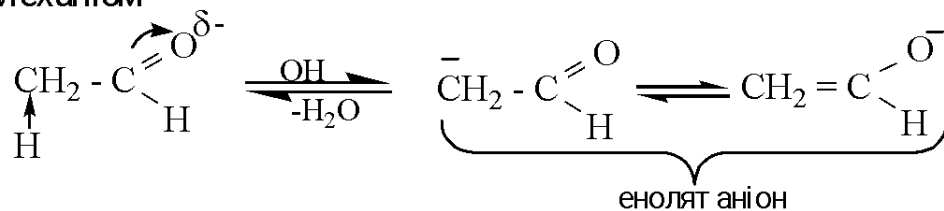
Приєднання



Альдольна конденсація



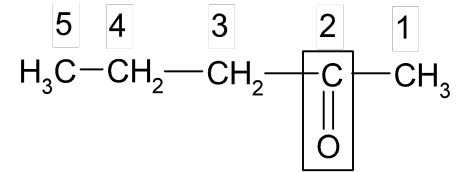
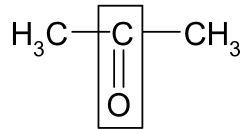
Механізм



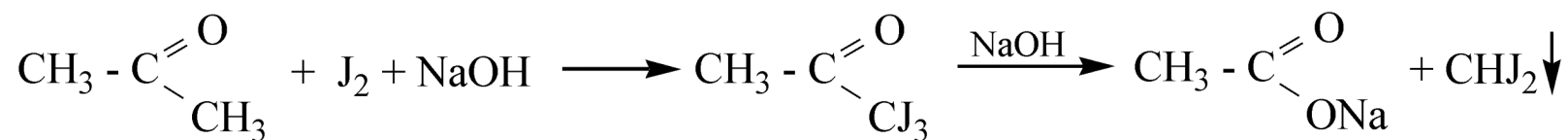
Реакція Канніцаро – дисмутації –
самоокиснення-самовідновлення –
диспропорціонування для мурашиного
альдегіду



КЕТОНИ



Галогенування. Йодоформна проба



Кетони. Окиснення

Окиснення кетонів

