

КЛАССИФИКАЦИЯ, НОМЕНКЛАТУРА, ИЗОМЕРИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Кандидат химических наук,
доцент кафедры химии
Екатерина Константиновна Захарова

ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ



ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Теория типов

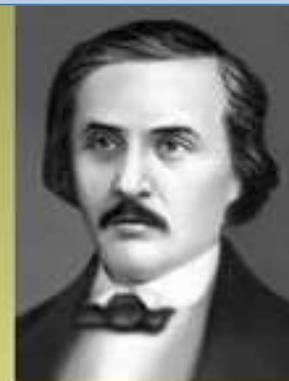
Ш. Жерар (40–50 гг 19 в)

*Четырехвалентность атома
углерода*

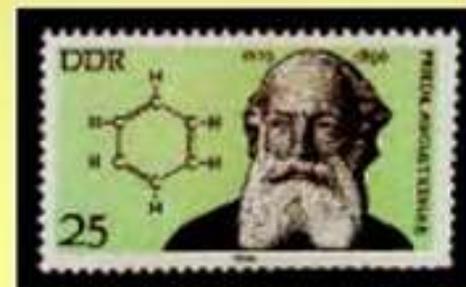
Фридрих Кекуле (1857)



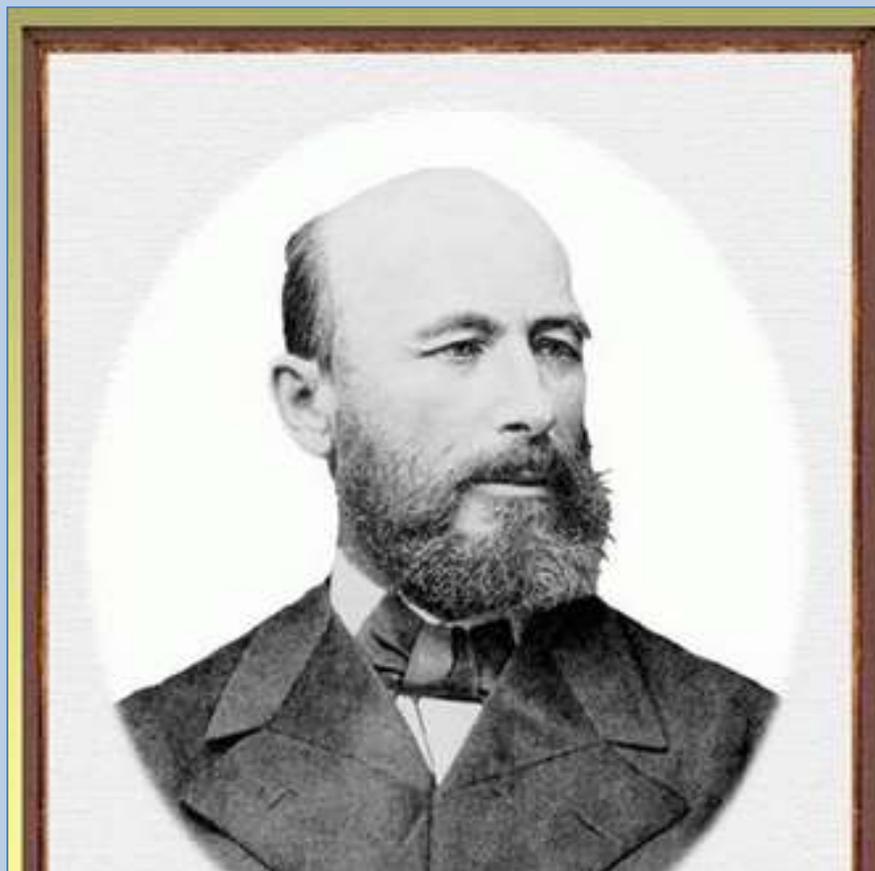
Фридрих Август



ЖЕРАР Шарль Фредерик
(21.VIII.1816 - 19.VIII.1856)



ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

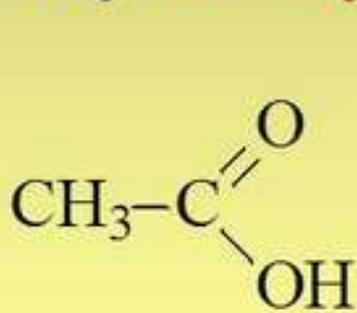


БУТЛЕРОВ Александр Михайлович

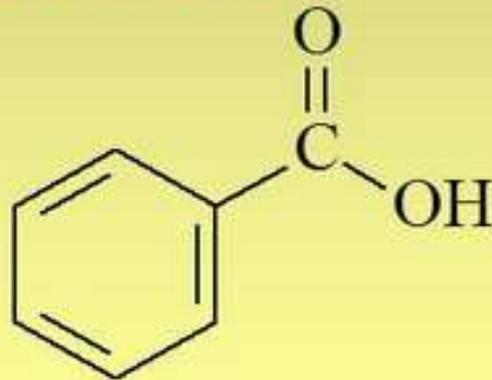
- Атомы в молекулах соединяются в строго определенном порядке в соответствии с валентностью элементов.
- Свойства веществ зависят не только от их количественного и качественного состава, но и от того, в каком порядке соединены атомы в молекулах, т.е. от химического строения.
- Атомы в молекулах взаимно влияют друг на друга.
- Свойства веществ определяются их строением, и, наоборот, зная строение, можно прогнозировать свойства.
- Химическое строение веществ может быть установлено химическими методами.

ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ГРУППА

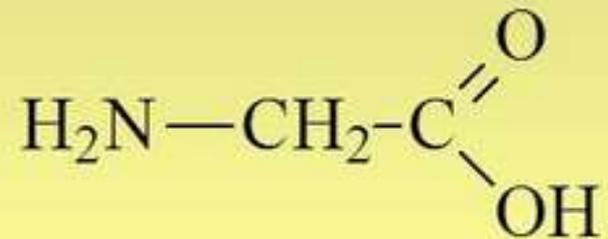
Функциональная группа – атом или группа определенным способом связанных атомов, наличие которой в молекуле органического вещества придает ему характерные свойства и определяет его принадлежность к тому или иному **классу соединений**.



уксусная кислота



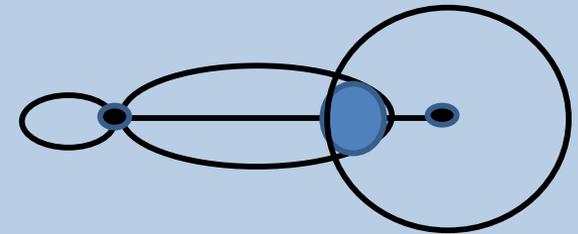
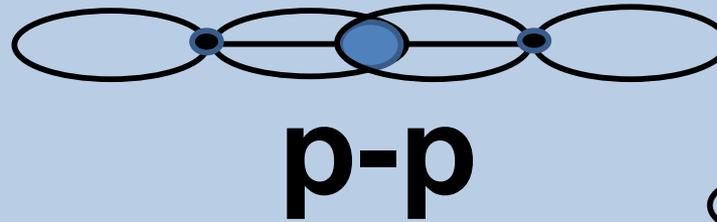
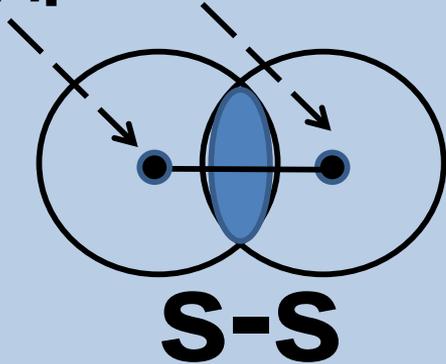
бензойная кислота



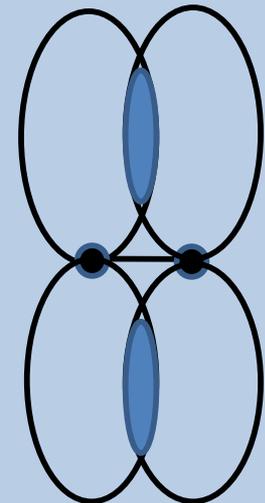
глицин (аминокислота)

σ- и π- СВЯЗИ

ядра атомов

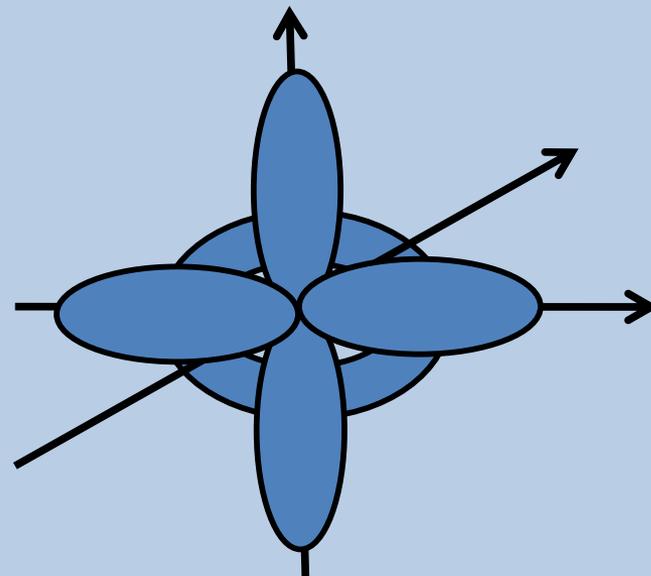
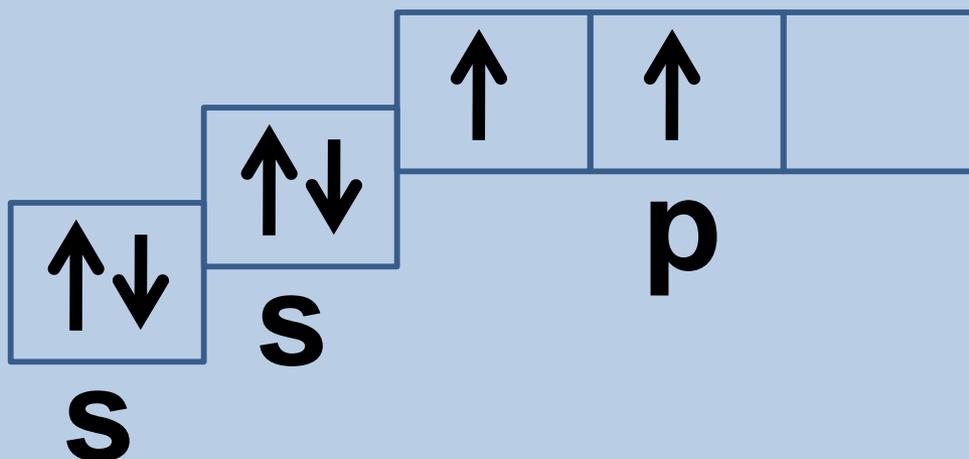


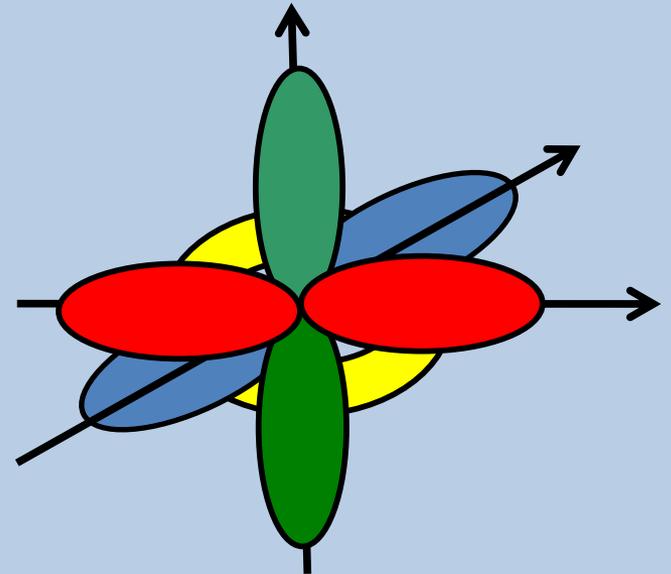
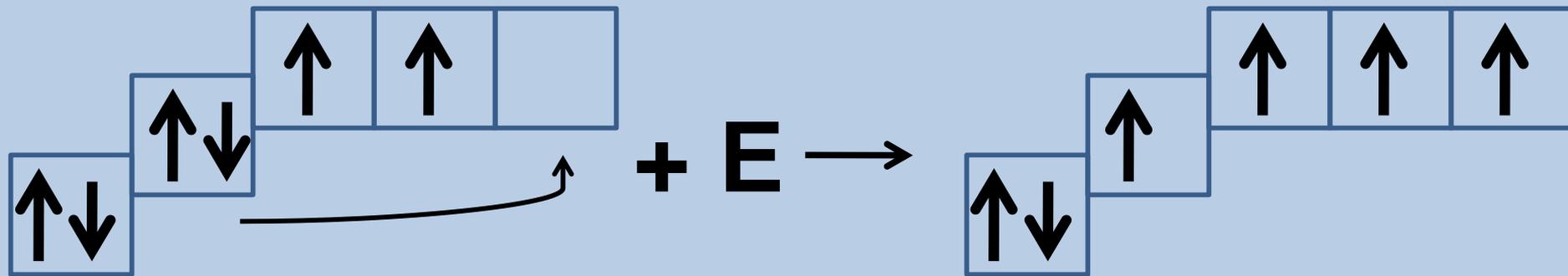
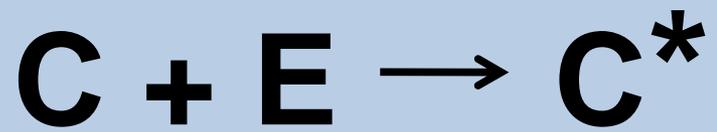
ТИПЫ СВЯЗЕЙ В МОЛЕКУЛАХ
ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ





ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ АТОМА УГЛЕРОДА





ГИБРИДИЗАЦИЯ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ УГЛЕРОДА

C

2p $\uparrow \uparrow$

2s $\uparrow \downarrow$

Электронная конфигурация атома углерода в основном состоянии

возбуждение атома

C*

2p $\uparrow \uparrow \uparrow$

2s \uparrow

Электронная конфигурация атома углерода в возбужденном состоянии

Американский физик и химик. Создатель теории химической связи и амфиоислотной теории белка. Нобелевская премия по химии (1954), Нобелевская премия мира (1962).

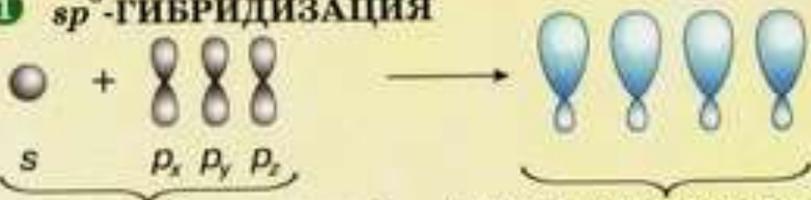


Л. Полинг
(1901-1994)

1 sp^3 -ГИБРИДИЗАЦИЯ

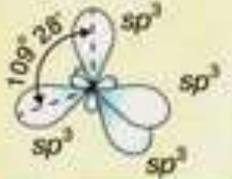
$s + p_x + p_y + p_z$

четыре негибридизованные орбитали ($s+3p$)



четыре гибридные орбитали (sp^3)

$\chi = 2,5$

2 sp^2 -ГИБРИДИЗАЦИЯ

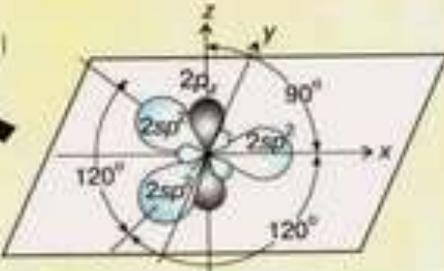
$s + p_x + p_y + p_z$

три негибридизованные орбитали ($s+2p$)



три гибридные орбитали (sp^2)

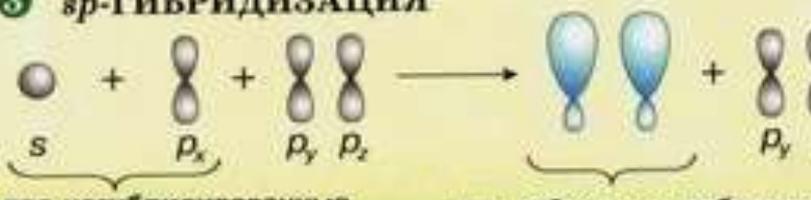
$\chi = 2,8$

3 sp -ГИБРИДИЗАЦИЯ

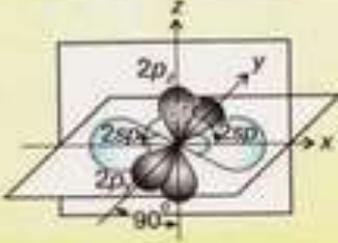
$s + p_x + p_y + p_z$

две негибридизованные орбитали ($s+p$)



две гибридные орбитали (sp)

$\chi = 3,2$

ИЗОМЕРИЯ

Структурная изомерия		Пространственная изомерия
1. Изомерия углеродного скелета		1. Геометрическая изомерия (<i>цис-транс-изомерия</i>)
$\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$ бутан	$\text{CH}_3 - \underset{\text{CH}_3}{\text{CH}} - \text{CH}_3$ изобутан	$\begin{array}{c} \text{H} & & \text{H} \\ & \diagdown & / \\ & \text{C} = \text{C} \\ & / & \diagdown \\ \text{R} & & \text{R} \end{array}$ <i>цис-изомер</i>
2. Изомерия положения кратной связи		$\begin{array}{c} \text{H} & & \text{R} \\ & \diagdown & / \\ & \text{C} = \text{C} \\ & / & \diagdown \\ \text{R} & & \text{H} \end{array}$ <i>транс-изомер</i>
$\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$ бутен-1	$\text{CH}_3 - \text{HC} = \text{CH} - \text{CH}_3$ бутен-2	
3. Изомерия положения заместителя или функциональной группы в углерод-углеродной цепи		2. Оптическая изомерия
$\begin{array}{c} \beta & & \alpha \\ \text{CH}_3 - & \text{CH} & - \text{C} \begin{array}{l} \diagup \text{O} \\ \diagdown \text{OH} \end{array} \\ & \\ & \text{NH}_2 \end{array}$ α-аминопропионовая кислота (α-аланин)	$\begin{array}{c} \beta & & \alpha \\ \text{CH}_2 - & \text{CH}_2 & - \text{C} \begin{array}{l} \diagup \text{O} \\ \diagdown \text{OH} \end{array} \\ & \\ & \text{NH}_2 \end{array}$ β-аминопропионовая кислота (β-аланин)	$\begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{H} - \text{CH} - \text{OH} \\ \\ \text{CH}_2\text{OH} \end{array}$
$\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{Br}$ 1-бромбутан	$\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \underset{\text{Br}}{\text{CH}} - \text{CH}_3$ 2-бромбутан	$\begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{HO} - \text{CH} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2\text{OH} \end{array}$

ИЗОМЕРИЯ

Структурная

Пространственная

Конформационная

Конфигурационная

Оптическая

Геометрическая

Конформационная изомерия

Конформация – расположение атомов молекулы в пространстве в данный момент времени. Изменение конформаций обусловлено вращением вокруг одинарных связей.

КОНФОРМАЦИИ ЭТАНА	Перспективные формулы	Проекция Ньюмена
Заторможенная конформация		
Заслонённая конформация		

Конфигурация – пространственное расположение заместителей относительно стериических центров, к которым относятся: двойная связь, цикл или элементы хиральности.

Конфигурационная изомерия

```
graph TD; A[Конфигурационная изомерия] --> B[Геометрическая изомерия]; A --> C[Оптическая изомерия]; B --- D[Цис-, транс-изомеры]; C --- E[D,L-изомеры];
```

Геометрическая
изомерия

Цис-, транс-изомеры

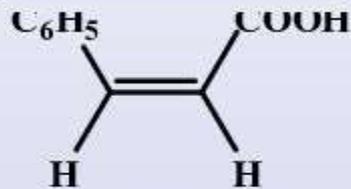
Оптическая
изомерия

D,L-изомеры

ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ ИЗОМЕРИЯ

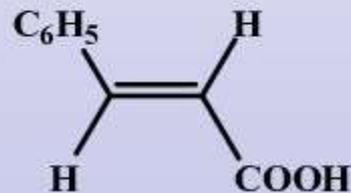
Причина – отсутствие свободного вращения вокруг σ -связей

Геометрические изомеры отличаются расположением заместителей у атомов углерода относительно плоскости двойной связи



цис-коричная кислота

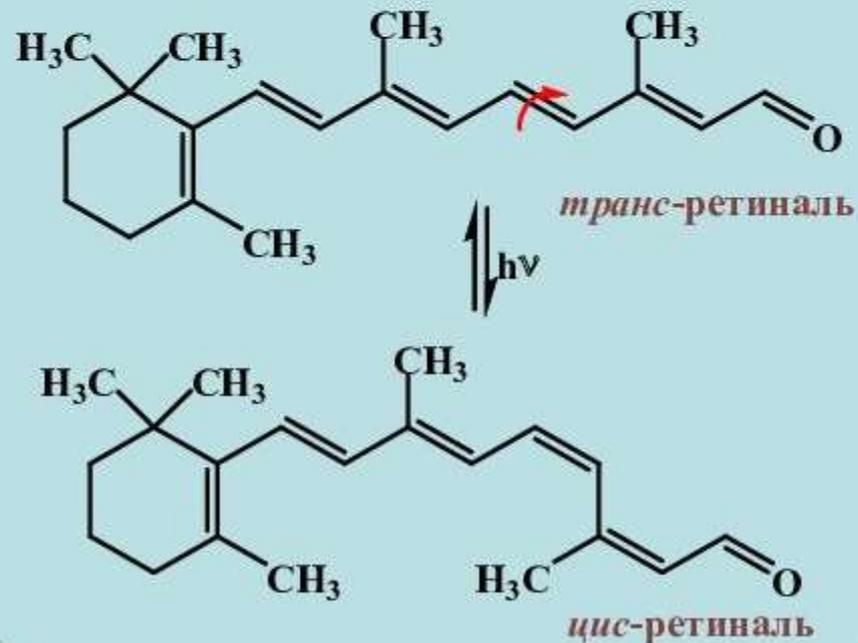
ФИТОТОКСИН



транс-коричная кислота

Витамин А (ретинол)

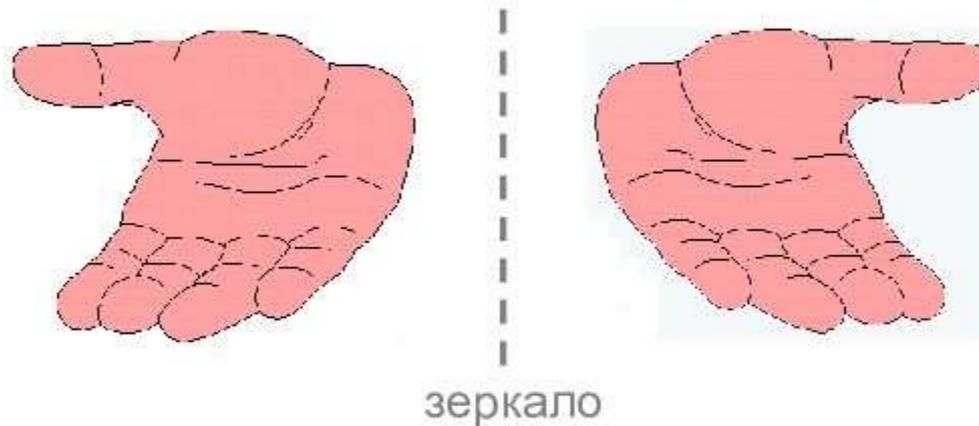
участвует в зрительном восприятии за счет цис-, транс-изомеризации



ОПТИЧЕСКАЯ ИЗОМЕРИЯ

Причина – отсутствие в молекуле элементов симметрии

Энанτιомеры – стереоизомеры, молекулы которых относятся друг к другу как предмет и несовместимое с ним зеркальное изображение (зеркальные изомеры). Такие структуры называются **хиральными** («хирос» – рука, хирургия – «рукоделие»).



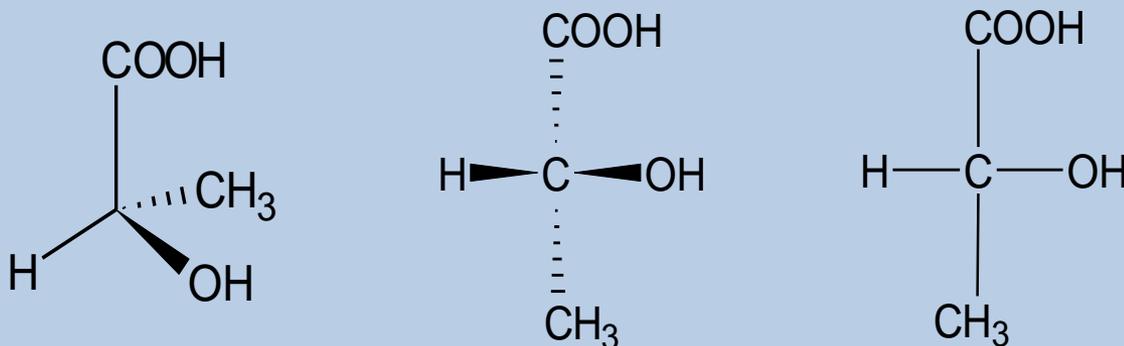
Примеры энантиомеров:

1. Предмет и его изображение в зеркале;
2. Две руки, две перчатки, два башмака, две спирали, два ключа с левой и правой бороздкой:

ПРОЕКЦИОННЫЕ ФОРМУЛЫ ФИШЕРА

Молекулы, имеющие в своем составе **асимметрические атомы углерода** (тетраэдрические атомы с четырьмя разными заместителями)

Структура молекулы изображается в виде двухмерного скелета с горизонтальными и вертикальными линиями



Молочная кислота

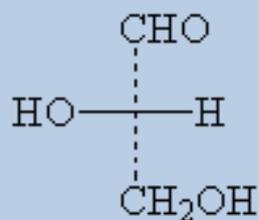
Перестановка двух заместителей = переход к другому энантиомеру

Поворот на 90° = переход к другому энантиомеру

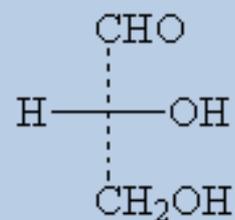
Поворот на 180° = тот же самый энантиомер

D,L-НОМЕНКЛАТУРА

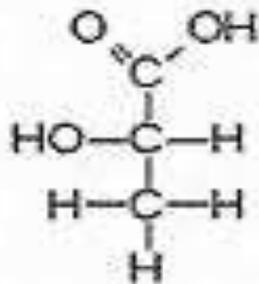
(М.А. Розанов (1906))



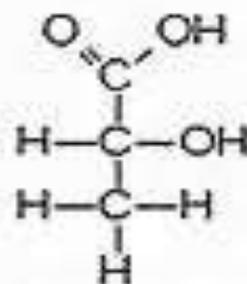
**L(-)-глицериновый
альдегид**
левовращающий



**D(+)-глицериновый
альдегид**
правовращающий



**L-молочная
кислота**



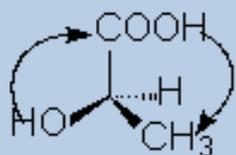
**D-молочная
кислота**

СТЕРЕОХИМИЧЕСКАЯ НОМЕНКЛАТУРА: R,S-СИСТЕМА

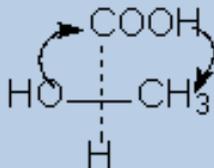
(Р. Кан, К. Ингольд, В. Прелог (1951))

Правила последовательности Кана-Ингольда-Прелога – определение старшинства заместителей

2-гидроксипропановая кислота

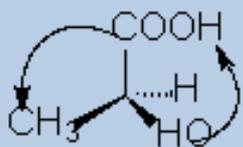


или

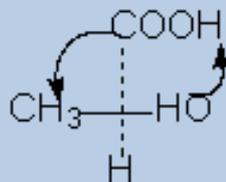


R

Старшинство заместителей убывает по часовой стрелке (лат. *rectus* – правый)



или



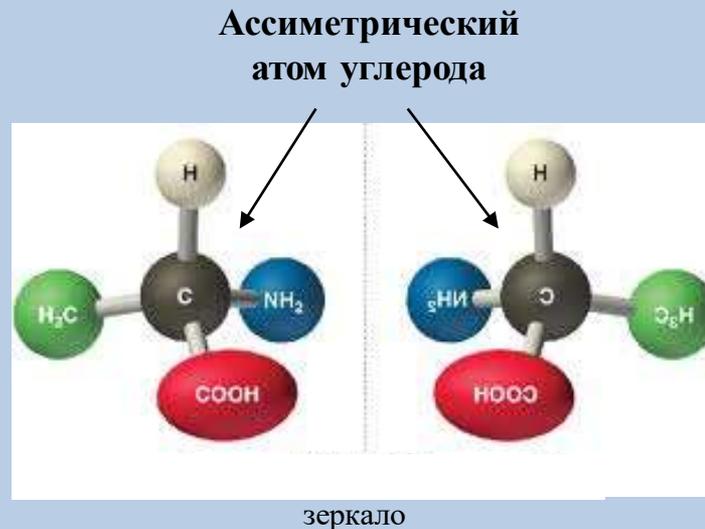
S

Старшинство заместителей убывает против часовой стрелки (лат. *sinister* – левый)

Младший заместитель (H) направлен за плоскость рисунка, от нас

ЭНАНТИОМЕРЫ

Энантиомеры – это стереоизомеры, молекулы которых относятся друг к другу как предмет и несовместимое с ним зеркальное изображение

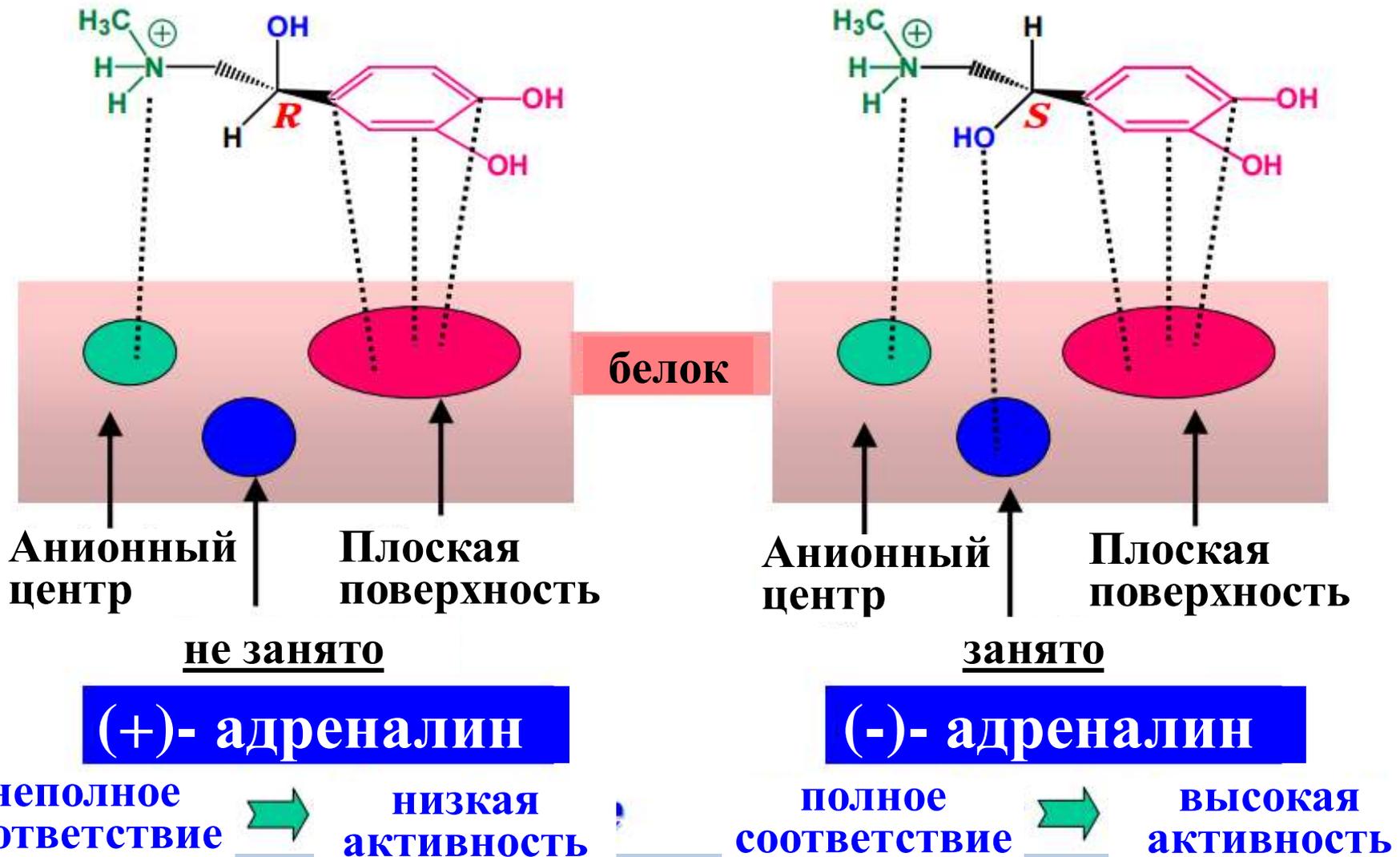


энантиомеры

Т.е. молекулы энантиомеров хиральны

БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ЭНАНТИОМЕРОВ

Энантиомеры адреналина

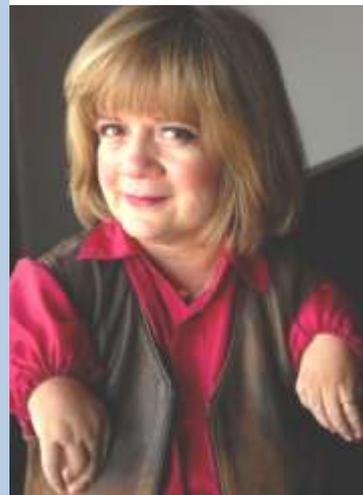


БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ЭНАНТИОМЕРОВ



ДАРВОН
анальгетик

НОВРАД
противокашле-
вый препарат



Жертвы талидомида

аспарагин

зеркало



ДИАСТЕРЕОМЕРЫ

Диастереомеры – это стереоизомеры, молекулы которых **не относятся друг к другу как предмет и несовместимое с ним зеркальное отражение**

Соединения, молекулы которых имеют два и более центра хиральности

Диастереомеры различаются по физико-химическим свойствам (температуры плавления, растворимость, теплоты образования, реакционная способность)

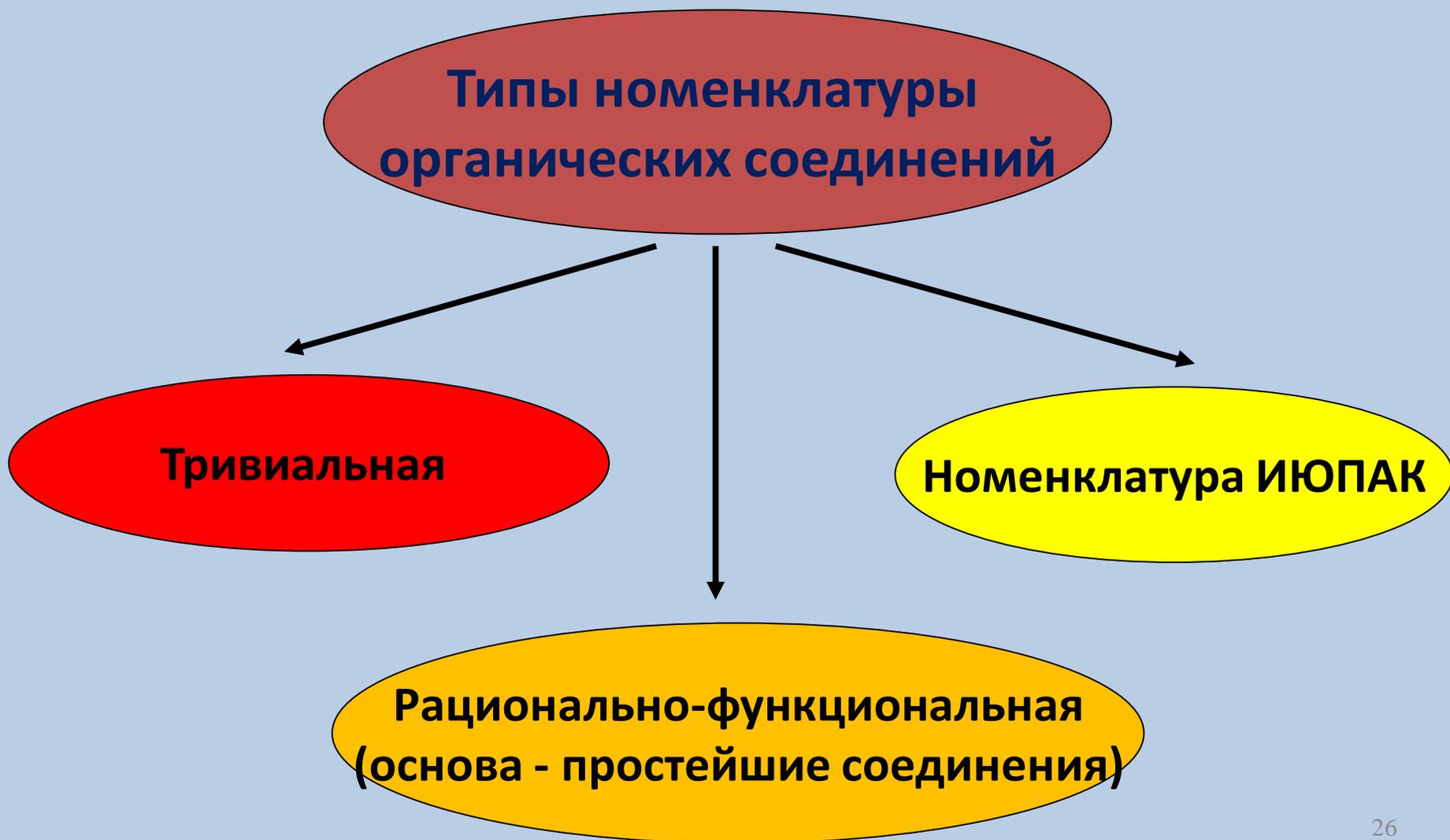
КЛАССИФИКАЦИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ПО СТРОЕНИЮ УГЛЕРОДНОГО СКЕЛЕТА



КЛАССЫ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ ГРУПП

КЛАСС	ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ГРУППА	НАЗВАНИЕ	
		в префиксе	в суффиксе
Карбоновые кислоты	-COOH	-	-овая кислота
Альдегиды	-CHO	оксо	-аль
Кетоны	C=O	оксо	он
Спирты, фенолы	-OH	гидрокси (окси)	ол
Амины	-NH ₂	амино	амин
Одинарная связь	-	-	ан
Двойная связь	=	-	ен
Тройная связь	≡	-	ин
Простые эфиры**	-OR	алкокси, арокси	-
Галогенпроизводные	-F	фтор	-
	-Cl	хлор	-
	-Br	бром	-
	-I	иод	-
Нитросоединения	-NO ₂	нитро	-

ТИПЫ НОМЕНКЛАТУРЫ



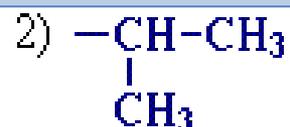
НОМЕНКЛАТУРА ИЮПАК

РАДИКАЛЫ

ФОРМУЛА	НАЗВАНИЕ	ФОРМУЛА	НАЗВАНИЕ
CH_3-	метил	$\text{C}_6\text{H}_{13}-$	гексил
C_2H_5-	этил	$\text{C}_7\text{H}_{15}-$	гептил
C_3H_7-	пропил	$\text{C}_8\text{H}_{17}-$	октил
C_4H_9-	бутил	$\text{C}_9\text{H}_{19}-$	нонил
$\text{C}_5\text{H}_{11}-$	пентил	$\text{C}_{10}\text{H}_{21}-$	декил



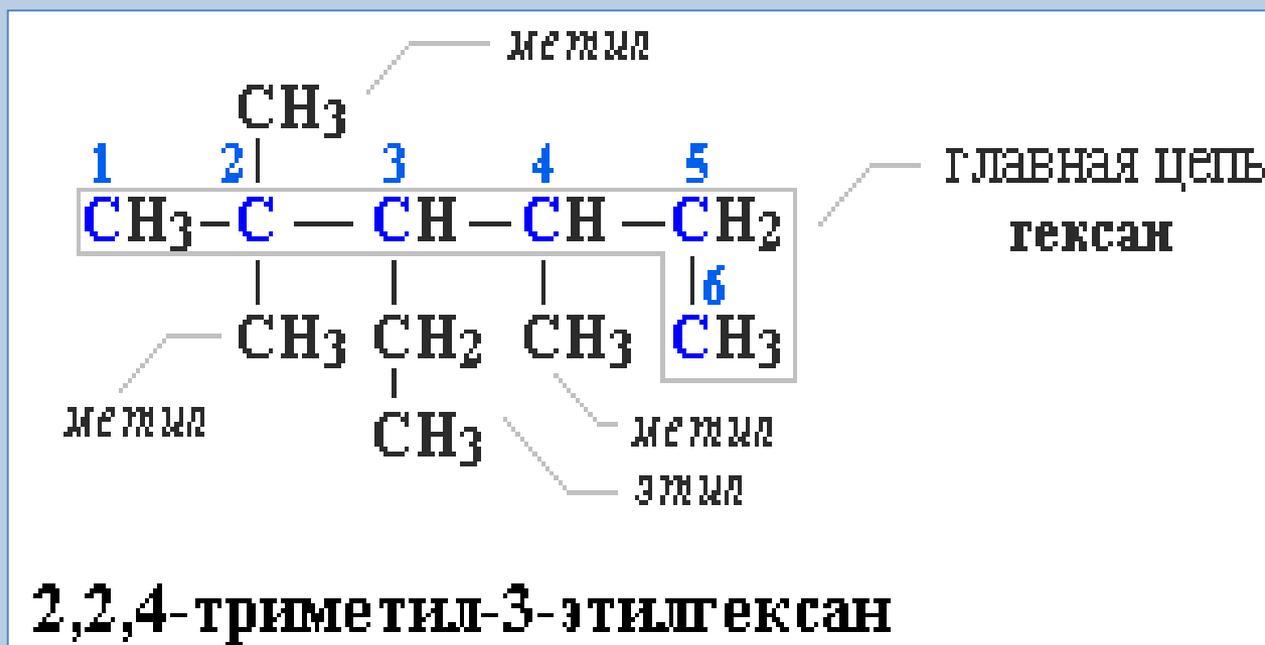
n-пропил
(нормальный пропил)



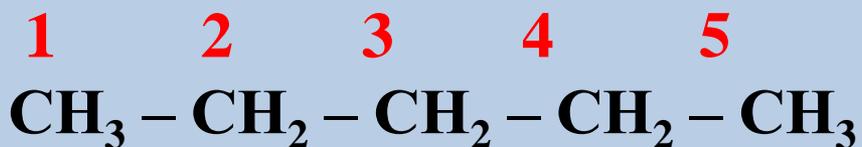
изопропил

Алкан	Радикал	Название радикала
$\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}_3$ <i>n</i> -бутан	$-\text{CH}_2-(\text{CH}_2)_2-\text{CH}_3$	<i>n</i> -бутил
	$-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ CH_3	<i>втор</i> -бутил
$\text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3$ CH_3 <i>изобутан</i>	$-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_3$ CH_3	изобутил
	$-\text{C}-\text{CH}_3$ CH_3	<i>трет</i> -бутил

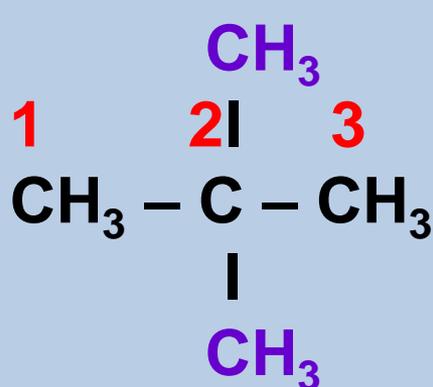
ПРАВИЛА ПОСТРОЕНИЯ НАЗВАНИЙ ДЛЯ РАЗВЕТВЛЕННЫХ АЛКАНОВ



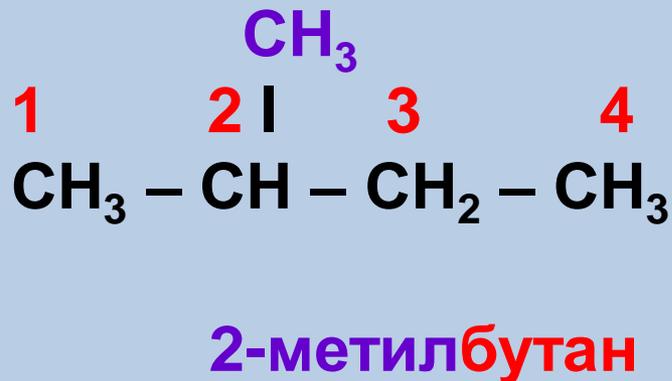
Цифры атомов углерода с разветвлениями	Название разветвлений от нумерованной цепи с указанием их числа при помощи приставок ди- - 2R, три- - 3R, тетра- - 4R	Название нумерованной углеродной цепи с суффиксом -ан
--	---	---

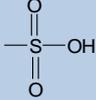
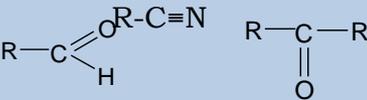
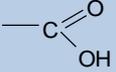
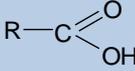
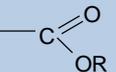
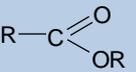
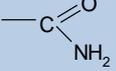
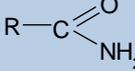


н-пентан



2,2-диметилпропан



ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ГРУППА		НАЗВАНИЕ КЛАССА	ОБЩАЯ ФОРМУЛА КЛАССА
-F, -Cl, -Br, -I (Hal)	<i>галогены</i>	Галогенпроизводные	R-Hal
- OH	<i>гидроксильная</i>	Спирты, фенолы	R-OH, Ar-OH
- OR	<i>алкоксильная</i>	Простые эфиры	R-O-R
- SH	<i>тиольная</i>	Тиолы (тиоспирты, меркаптаны)	R-SH
- SR	<i>алкилтиольная</i>	Тиоэфиры (сульфиды)	R-S-R
	<i>сульфоновая</i>	Сульфоновые кислоты (сульфоокислоты)	R-SO ₃ H
- NH ₂	<i>амино</i>	Амины первичные	R-NH ₂
		вторичные	R-NH-R
		третичные	R ₃ N
- NO ₂	<i>нитро</i>	нитросоединения	R-NO ₂
	<i>циано</i> <i>карбонильная</i>	Нитрилы Альдегиды Кетоны	
	<i>карбоксильная</i>	Карбоновые кислоты	
	<i>алкоксикарбонильная</i>	Сложные эфиры	
	<i>карбоксамидная</i>	амиды	

ТРИВИАЛЬНАЯ НОМЕНКЛАТУРА

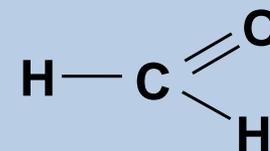
ТРИВИАЛЬНЫЕ И НОМЕНКЛАТУРНЫЕ НАЗВАНИЯ АЛЬДЕГИДОВ

Тривиальное

формальдегид

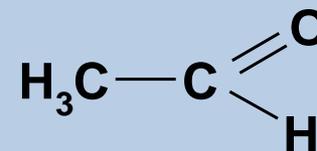
ИЮПАК

метаналь



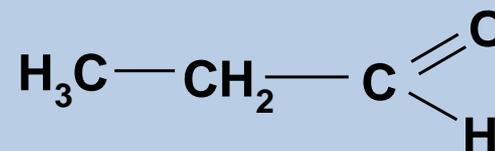
уксусный альдегид

этаналь



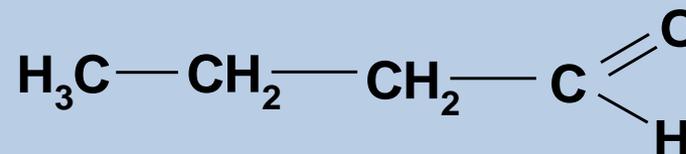
пропионовый альдегид

пропаналь



масляный альдегид

бутаналь



Тривиальные и номенклатурные названия монокарбоновых кислот и их солей

ТРИВИАЛЬНОЕ ИЮПАК

НСООН	муравьиная / метановая	формиаты
$\text{СН}_3\text{СООН}$	уксусная / этановая	ацетаты
$\text{СН}_3\text{СН}_2\text{СООН}$	пропионовая / пропановая	пропионаты
$\text{СН}_3\text{СН}_2\text{СН}_2\text{СООН}$	масляная / н-бутановая	бутираты
$\text{СН}_2 = \text{СН} - \text{СООН}$	акриловая / пропеновая	акрилаты

ТРИВИАЛЬНЫЕ И НОМЕНКЛАТУРНЫЕ НАЗВАНИЯ ДИКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ И ИХ СОЛЕЙ

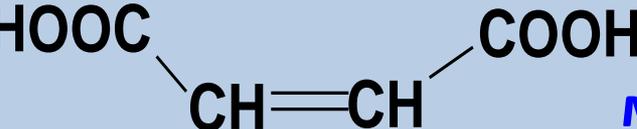
ТРИВИАЛЬНОЕ ИЮПАК

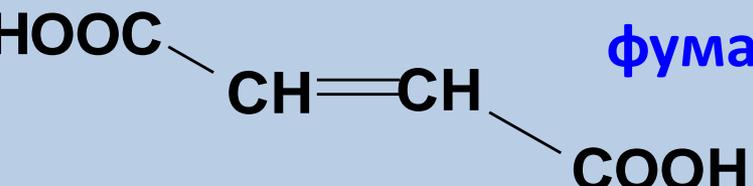
HOOC-COON щавелевая/этандиовая оксалаты

HOOC-CH₂-COON малоновая/пропандиовая малонаты

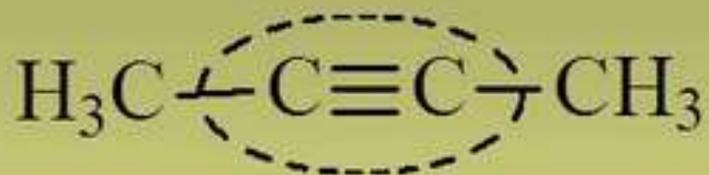
HOOC-CH₂-CH₂-COON янтарная/бутандиовая сукцинаты

HOOC(CH₂)₃COON глутаровая/пентандиовая глутараты

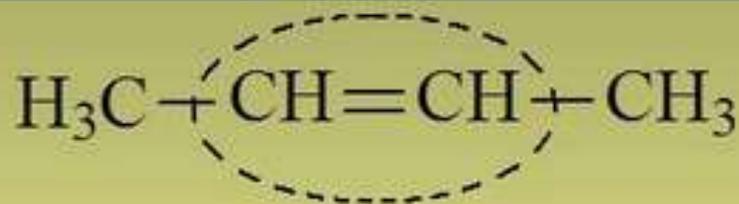

HOOC-CH=CH-COON **малеиновая /цис-бутендиовая** малеаты


HOOC-CH=CH-COON **фумаровая /транс-бутендиовая** фумараты

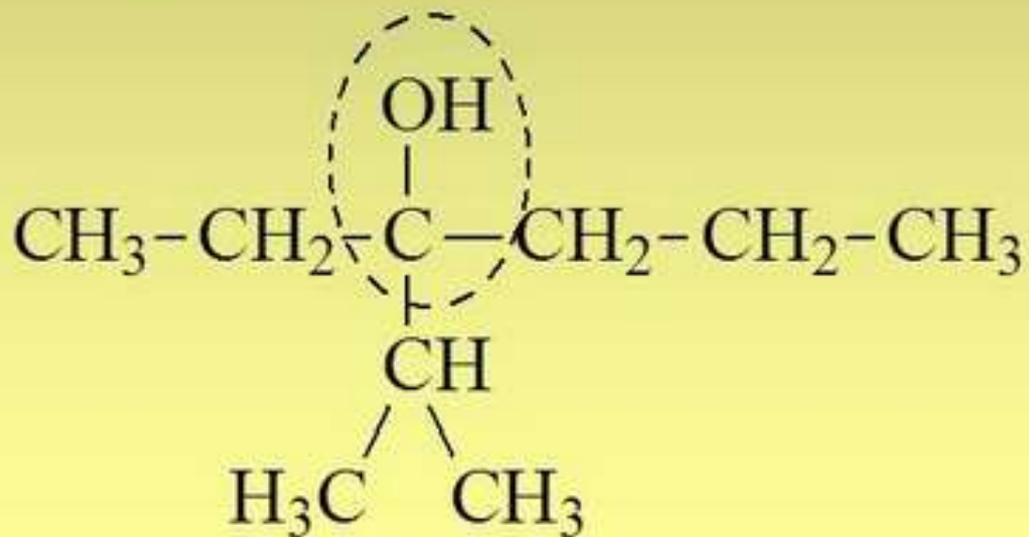
РАЦИОНАЛЬНАЯ НОМЕНКЛАТУРА



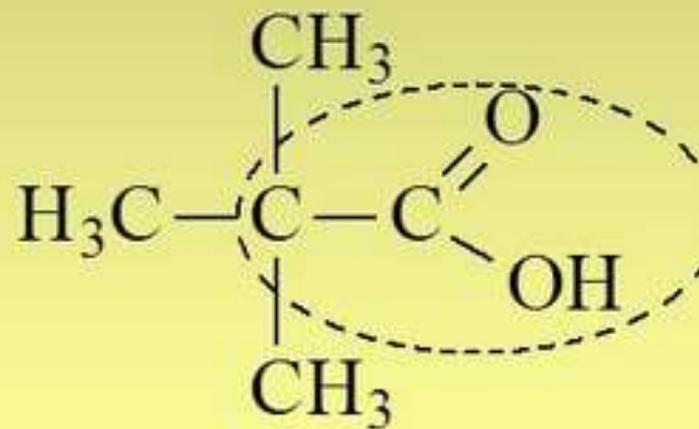
диметилацетилен



симм-диметилэтилен



этилпропилизопропилкарбинол



триметилуксусная кислота

БЛАГОДАРЮ ЗА ВНИМАНИЕ