

Классификация реагентов и реакций в органической химии

Лекция №4

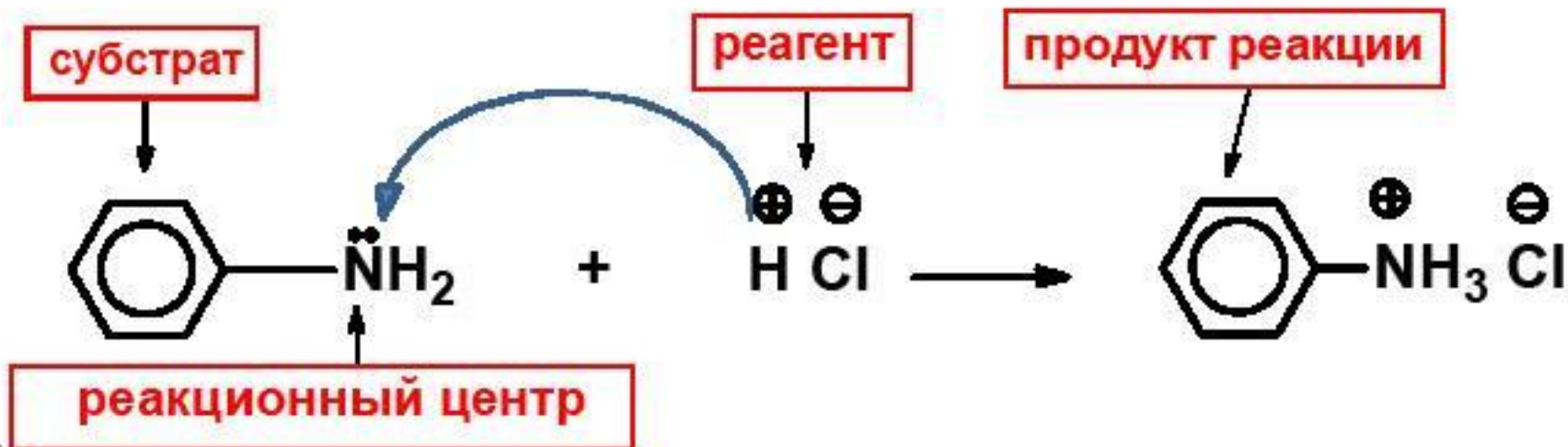
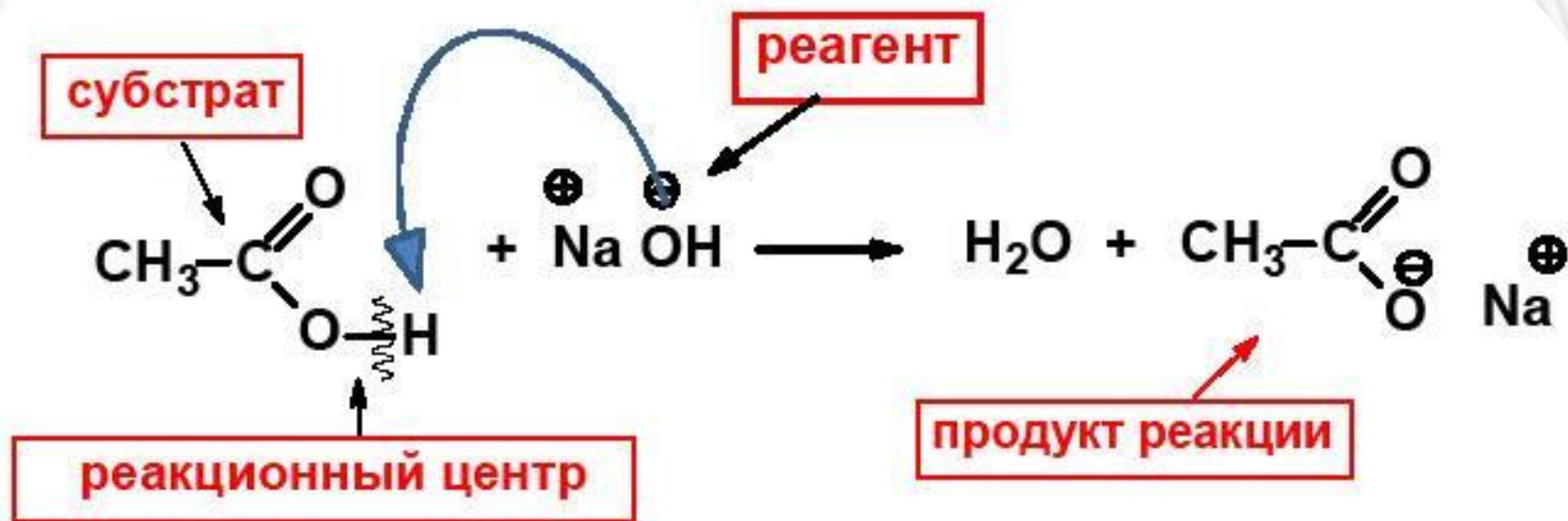
Основные определения

Реакционная способность - способность вещества вступать в ту или иную химическую реакцию и реагировать с большей или меньшей легкостью, т.е. характеристика химической активности соединения.

Реакционный центр - атом или группа атомов в молекуле, непосредственно участвующие в химической реакции.

Субстрат - вещество, реакционная способность которого по отношению к реагенту рассматривается в данной химической реакции.

Реагент - действующее на субстрат вещество (реакционная частица).



Типы реагентов

Кислотно-основные реагенты

Кислотные реагенты - доноры протона по отношению к реакционному партнеру.

СВОЙСТВА:

- ✓ частично или нацело ионизированы в водных растворах;
- ✓ являются нейтральными молекулами или положительно заряженными частицами.

Основные реагенты - акцепторы протона по отношению к реакционному партнеру.

СВОЙСТВА:

- ✓ способны оторвать протон от кислотного центра;
- ✓ являются отрицательно заряженными частицами или нейтральными молекулами.

Типы реагентов

Нуклеофильные и электрофильные реагенты

Нуклеофилы - частицы, образующие новую ковалентную связь за счет своей электронной пары.

СВОЙСТВА:

- ✓ обладают повышенной электронной плотностью, взаимодействуют с любым атомом (кроме водорода), несущим частичный или полный положительный заряд;
- ✓ нуклеофил заряжен отрицательно или имеет неподеленную пару электронов (или π -связь).

Символ Nu^- или Nu

Электрофилы – частицы, образующие новую ковалентную связь за счет пары электронов партнера.

СВОЙСТВА:

- ✓ имеют недостаток электронов;
- ✓ взаимодействуют с реакционным центром партнера с повышенной электронной плотностью;
- ✓ имеют атом, несущий частичный или полный положительный заряд или обладают вакантной орбиталью.

Символ E^+ или E

Типы реагентов

Радикалы - свободные атомы или частицы с неспаренным электроном.

Символ R

Окислители - нейтральные молекулы или ионы, принимающие электроны или атомы водорода от органического субстрата.

Символ [O] (или Ox)

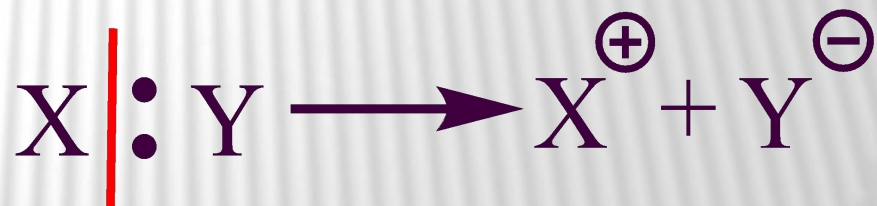
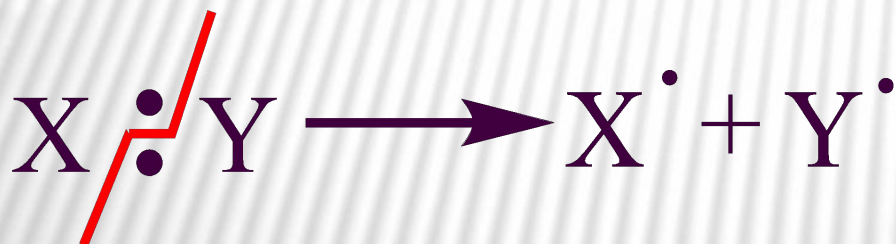
Восстановители - нейтральные молекулы или ионы, отдающие электроны или атомы водорода органическому субстрату.

Символ [H] (или Red)

Способы разрыва ковалентной связи

Гомолитический
(свободнорадикальный)
(гомолиз)

Гетеролитический
(ионный)
(гетеролиз)

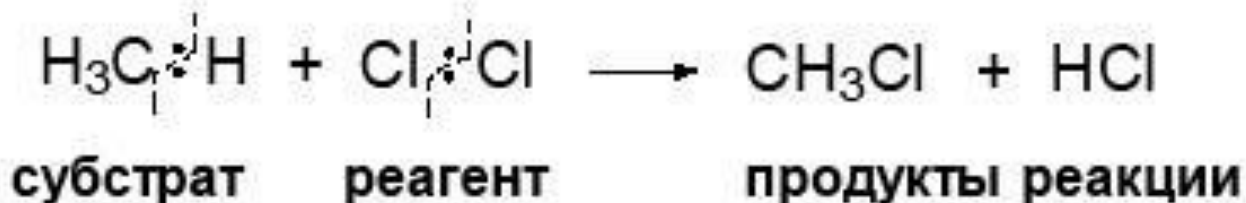


Признаки классификации органических реакций

- ✓ по характеру изменения связей в субстрате и реагенте;
- ✓ по типу реагента;
- ✓ по направлению реакции;
- ✓ по числу молекул, принимающих участие в стадии, определяющей скорость реакции.

Классификация по характеру изменения связей в субстрате

1. Гомолитические реакции



2. Гетеролитические реакции



3. Синхронные реакции



Для синхронных реакций теряют смысл понятия реагента и субстрата.

Классификация по типу реагента

Радикальные
(R)

Электрофильные
(E)

Нуклеофильные
(N)

Окислительные
[O]

Восстановительные
[H]

Классификация по направлению реакции

**Присоединение
(Ad)**

**Отщепление
(элиминирование)
(E)**

**Замещение
(S)**

Перегруппировки

**Окислительно-
восстановительные
реакции**

Классификация по числу частиц

✓ Мономолекулярные (диссоциативные)

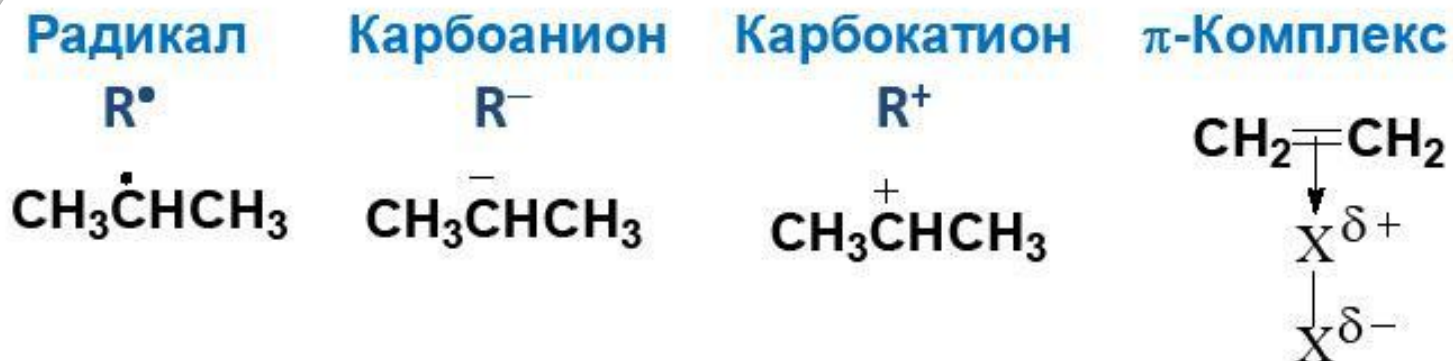


✓ Бимолекулярные (ассоциативные)



Понятие о механизме реакции

Механизм реакции - это детальное описание процесса, в результате которого исходные вещества превращаются в конечные продукты. Механизм реакции включает сведения о всех стадиях процесса, всех возможных промежуточных частицах, способах разрыва связей на каждой стадии процесса.



Факторы, определяющие реакционную способность органических соединений

Статические факторы
(молекула в нереагирующем состоянии)

Электронный фактор

Распределение электронной плотности в молекуле (электроотрицательность атомов, входящих в молекулу, электронные эффекты заместителей, наличие сопряженных и ароматических фрагментов).

Пространственный фактор

Пространственная доступность реакционного центра молекулы.

Динамические факторы (молекула в реагирующем состоянии)

Включают оценку энергии *промежуточных частиц* или *переходного состояния*.

Чем больше возможностей для делокализации (рассредоточения) электронной плотности в промежуточной частице (свободном радикале, катионе, анионе, π -комплексе), или в переходном состоянии, тем более они устойчивы (стабильны), тем ниже их энергия и тем легче идет реакция.

Термодинамический и кинетический контроль реакции

