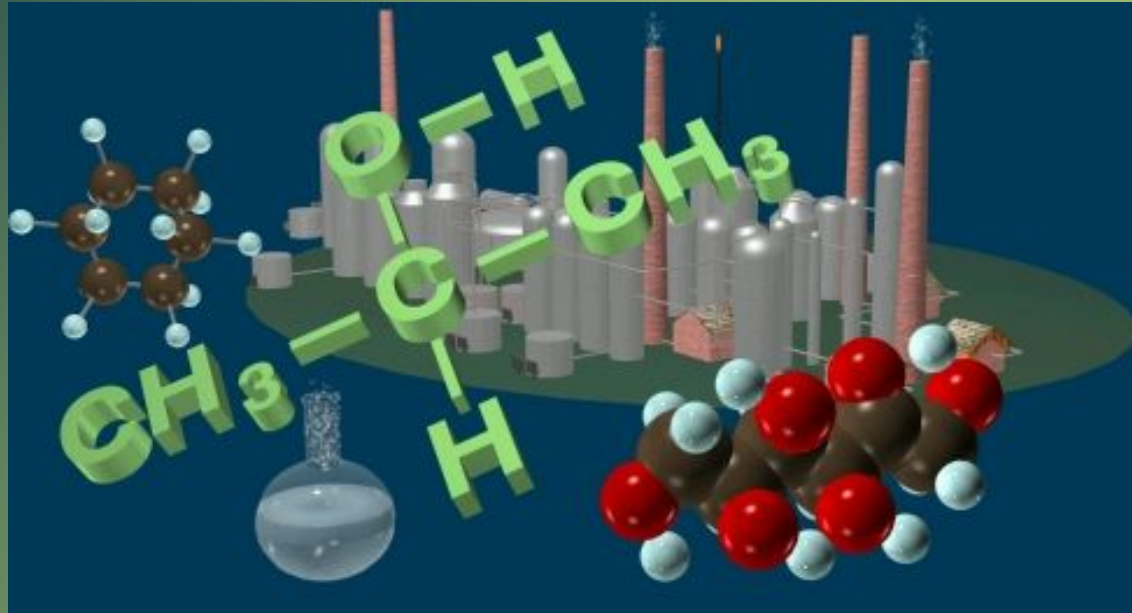


Введение в теорию органической химии. Строение органических молекул



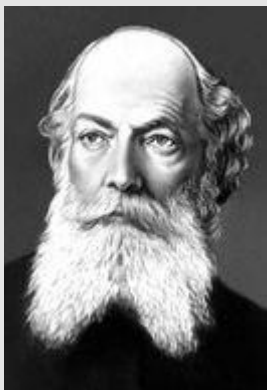
«Химическая натура сложной частицы определяется натурой элементарных составных частей, количеством их и химическим строением. Каждый химический атом, входящий в состав тела, принимает участие в образовании этого последнего и действует здесь определенным количеством принадлежащей ему химической силы»

А.М. Бутлеров, 1861г., из доклада «О химическом строении вещества»

Лекция №2

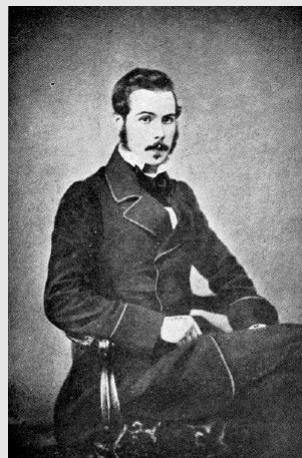
Строение органических молекул

1. Введение
2. Строение атома
3. Проблема химической связи
 - Электроотрицательность;
 - Ковалентная связь;
 - Теория валентных связей;
 - Теория МО.
3. Современные методы исследования структуры органических молекул



Фридрих Август Кекуле

Теория валентности; четырехвалентность атома углерода 1857г.



Арчибальд Скотт Купер



Александр Михайлович Бутлеров

Теория химического строения, 1861г.



Якоб Хендрик Вант-Гофф

Основы стереохимии; тетраэдрическая модель атома углерода 1875г.



Жозеф Ашиль Ле Бель



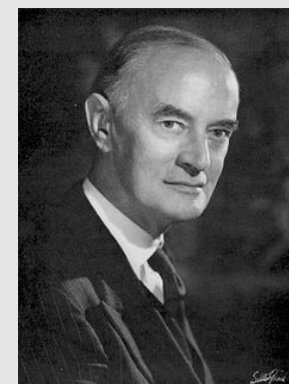
Гилберт Ньютон Льюис

Теория химической связи, 1917г.



Эрих Арманд Артур Йозеф Хюккель

Основы квантовой химии, Квантовая теория двойных связей, 1930г.

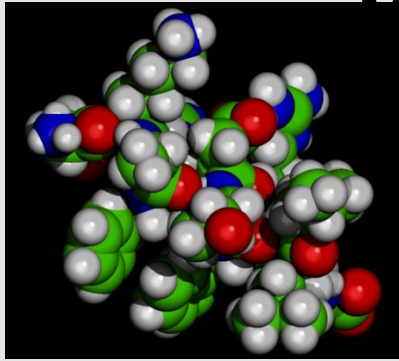


Кристофер Кельк Ингольд

Кинетика реакций замещения при насыщенном атоме углерода

Строение органических

молекул



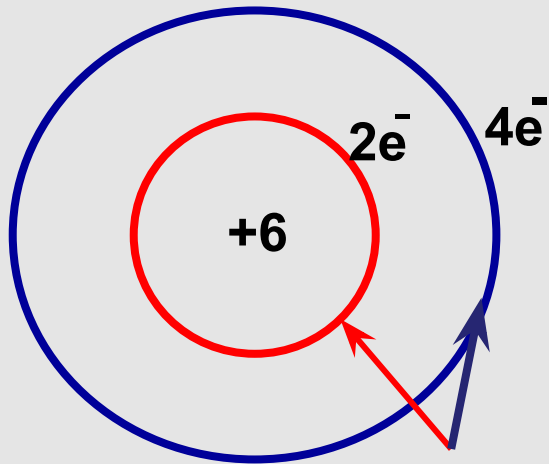
Проблема химической связи

- Электроотрицательность;
- Типы химической связи;
- Октетная теория Льюиса;
- Теория валентных связей;
- Метод молекулярных орбиталей

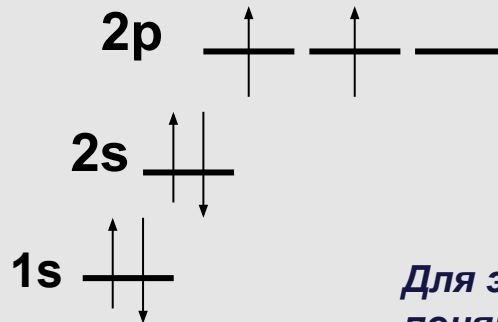
Строение атома

ВСПОМНИМ!

^{12}C



Энергетические уровни



Количество энергетических уровней соответствует номеру периода;

Энергетический уровень состоит из подуровней (s, p, d и т.д.)

Для электрона (микрочастица) неприемлемо понятие о траектории движения

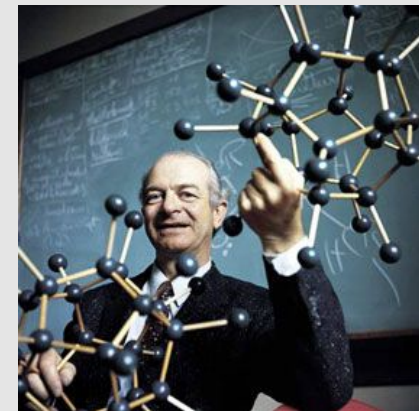
Орбиталь - область пространства, где вероятность пребывания электрона максимальна

Проблема химической СВЯЗИ Электроотрицательность элементов

Электроотрицательность - мера силы связи между ядром данного элемента и электронами на внешних орбиталях

Одной из наиболее известных является шкала электроотрицательности, предложенная Л.К. Полингом

Нобелевская премия по химии 1954г.
«за изучение природы химической связи и его применение к объяснению строения сложных молекул».



Лайнус Карл Полинг

Атом	Na	Mg	Si	B	P	H	C	S	N	Cl	O	F
χ	0.9	1.5	1.8	2.0	2.1	2.1	2.5	2.5	3.0	3.0	3.5	4.0

Проблема химической связи

Типы основных химических связей

Типы химических связей

- Ионная связь;
- Ковалентная связь;**
- Семиполярная связь;
- Водородная связь

Ковалентная связь

Образуется за счет обобществления пары валентных

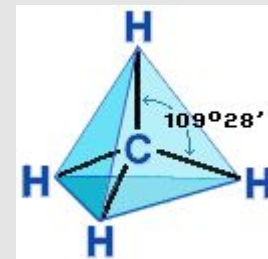
электронов атомов, участвующих в

образовании связи;

Характеризуется направленностью, насыщенностью,

Направленность связи обусловлена молекулярным строением вещества и геометрической формы их молекулы.

Углы между двумя связями называют валентными.



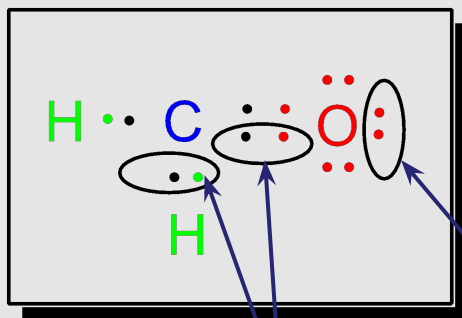
Ковалентная

СВЯЗЬ

Насыщаемость — способность атомов образовывать ограниченное число ковалентных связей. Количество связей, образуемых атомом, ограничено числом его внешних атомных орбиталей.

Октетное правило Льюиса

При образовании молекул атомы удовлетворяют свою потребность в достижении 8 электронной валентной оболочки, подобной электронной конфигурации благородных газов за счет попарного обобществления своих валентных электронов.



Обобществленная электронная пара

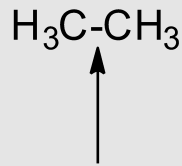
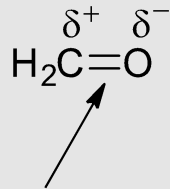
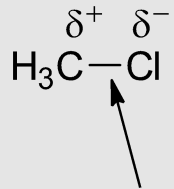
*Пары электронов, находящиеся на гетероатомах и не участвующие в образовании химической связи, называют **неподеленными электронными парами**.*

Неподеленная электронная пара

Ковалентная

связь

Полярность связи обусловлена неравномерным распределением электронной плотности вследствие различий в электроотрицательностях атомов.



Полярная
ковалентная
связь

Неполярная
ковалентная
связь

Полярность связи измеряется молекулярным дипольным моментом, обозначаемым **D** (Дебай) $D = e \cdot l$ (e- величина заряда; l- длина

связи)

Электроны, образующие ковалентную связь, смещены в сторону более электроотрицательного атома, что вызывает **поляризацию**

данной связи. Поляризация приводит к появлению частичных зарядов (обозначаются, как δ^+ или δ^-) на атомах, образующих связь

Средние значения дипольных моментов для некоторых распространенных типов связей

Связь	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$	C-Cl	C-Br	C-N	C-O	C=O
D	0	1.9	1.8	1.0	1.2	2.7

Теория валентных связей.

1927г.

Каждая пара атомов в молекуле удерживается вместе при помощи одной или нескольких общих электронных пар.

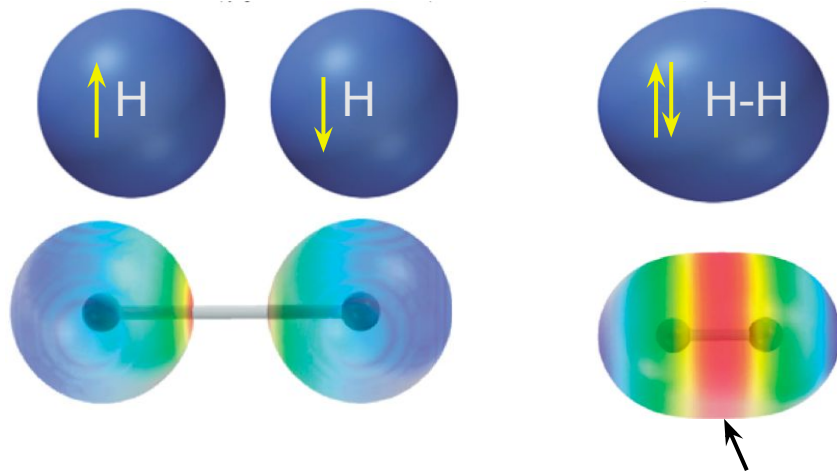
Связывание атомов достигается в результате спаривания спинов двух электронов, находящихся на атомных орбиталях исходных атомов.



Вальтер Генрих Гейтлер



Фриц Лондон



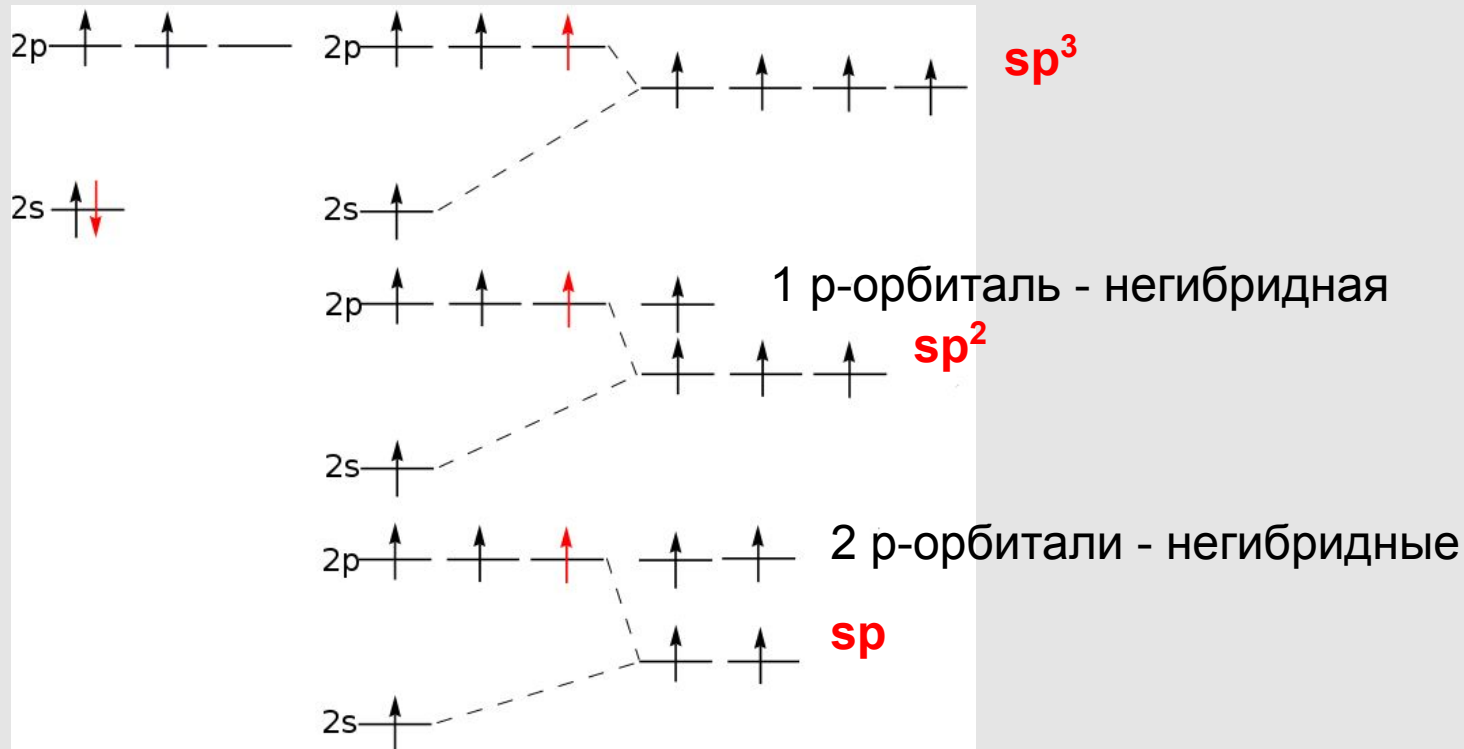
Электронная плотность

Лучшему перекрыванию орбиталей, отвечающих данной валентной связи, способствует гибридизация атомных орбиталей.

Концепция гибридизации атомных орбиталей, 1931г. Л. Полинг

Виды гибридизации

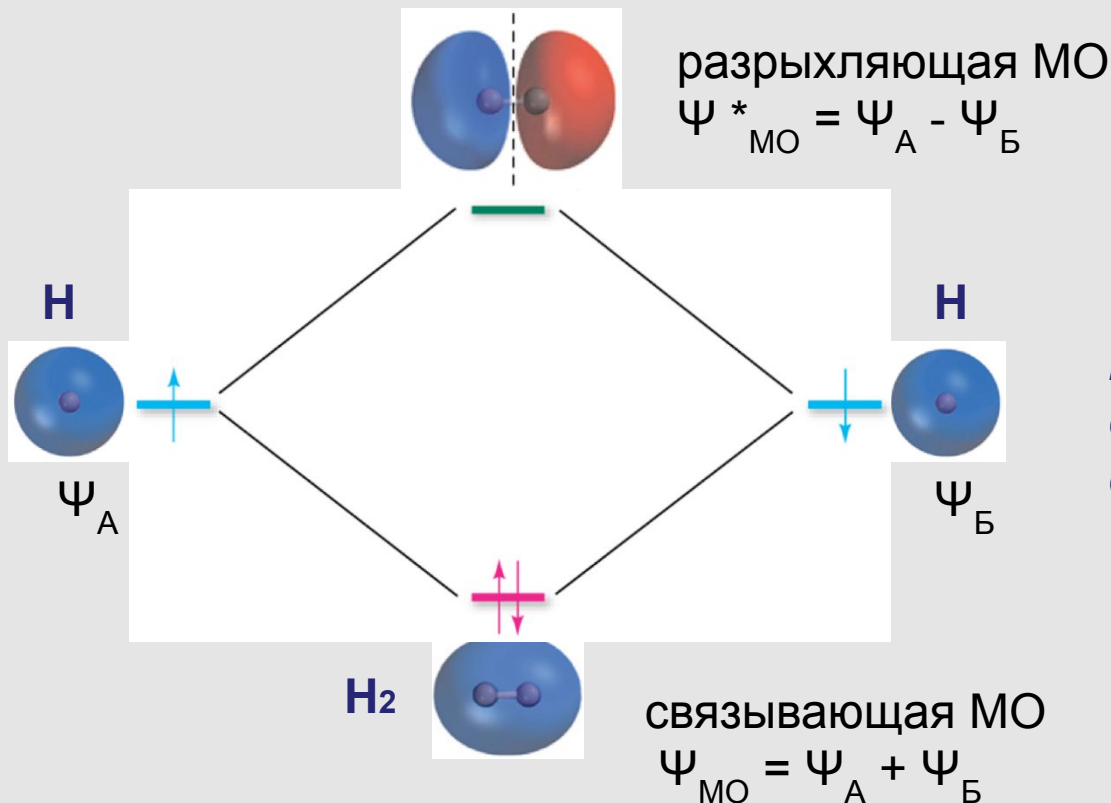
- sp^3 — гибридизация (алканы);
- sp^2 — гибридизация (алкены);
- sp — гибридизация (алкины)



Гибридизация орбиталей — гипотетический процесс смешения разных (s, p, d) орбиталей центрального атома многоатомной молекулы с возникновением того же числа орбиталей, эквивалентных по своим характеристикам.

Теория молекулярных орбиталей

Образование химической связи между атомами - перекрывание (взаимодействие) атомных орбиталей (АО) с образованием молекулярных орбиталей (МО).



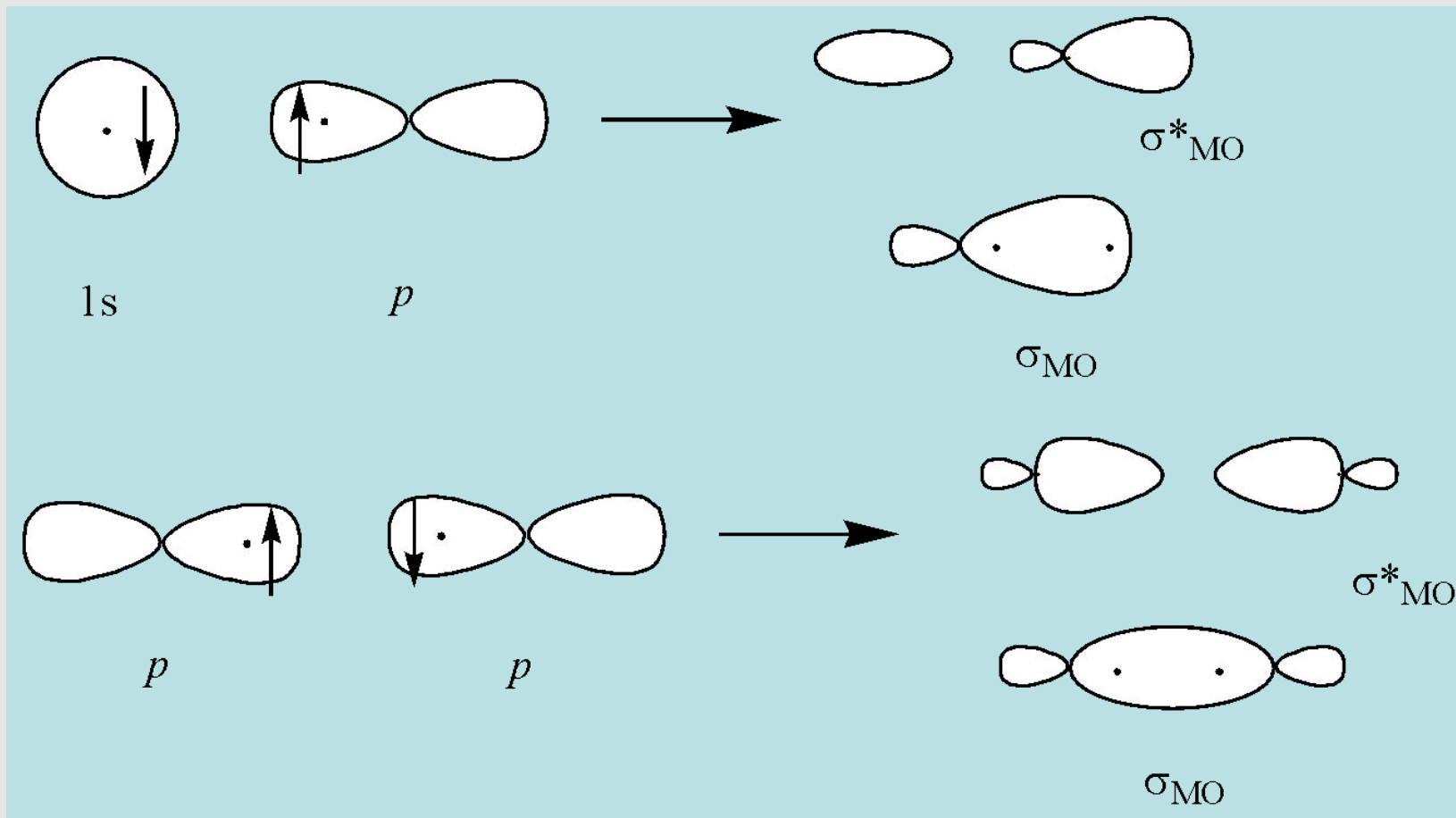
пространственный разрыв между ядрами. Электронная плотность равна нулю (энергетически не выгодно)

При перекрывании двух s АО образуется ковалентная связь, называемая σ -связь

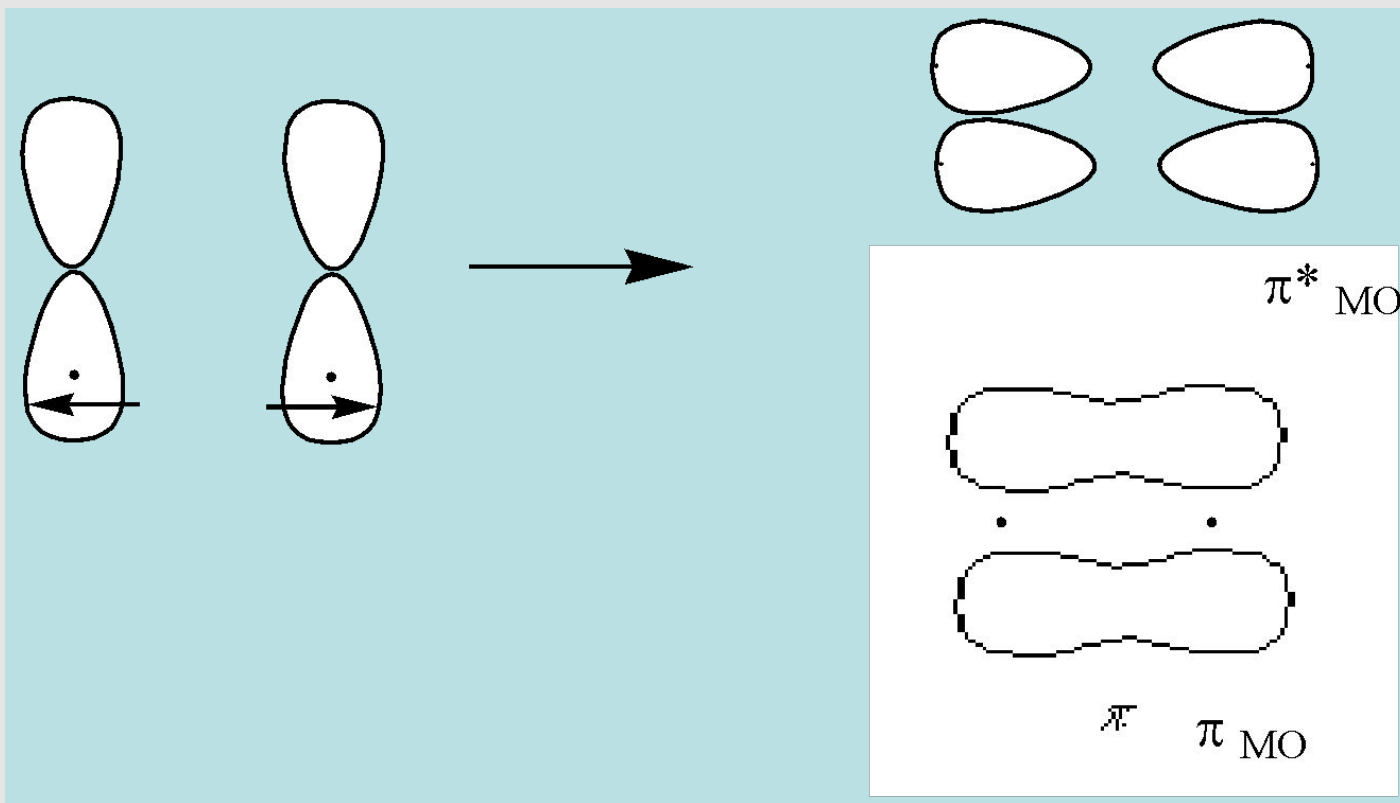
повышенная электронная плотность между ядрами (энергетически выгодно)

Связывающая МО имеет меньшую энергию, чем образующие ее обе АО, т.е. имеет место выигрыш энергии (причина образования связи). Энергия разрыхляющей орбитали больше энергии обеих АО.

σ -Связь образуется и при перекрывании s и p или осевом перекрывании двух p орбиталей:



В случае параллельного расположения перекрывающихся p АО образуется π – связь:



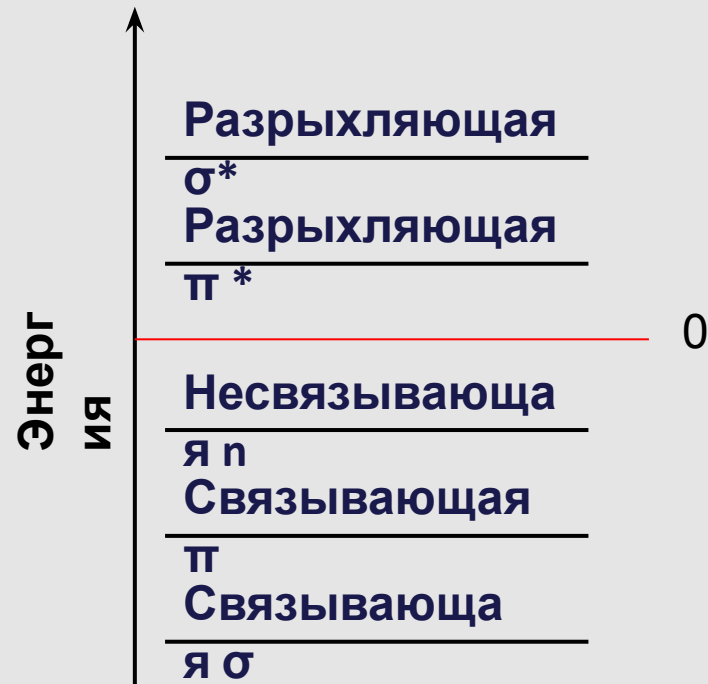
Типы МО

- Связывающие (σ , π);
- Разрыхляющие (σ^* , π^*);
- Несвязывающие (n)

Связывающие МО называют также занятыми МО (ЗМО)

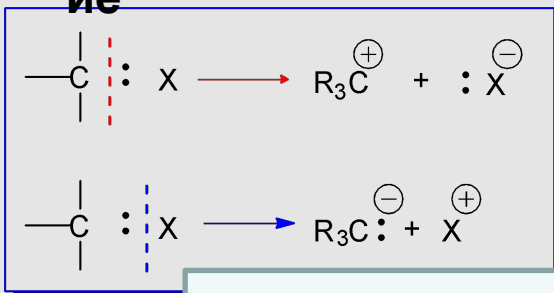
Разрыхляющие МО называют также вакантными МО (ВМО)

МО, расположенные наиболее близко к линии нулевой энергии, называют высшими занятыми (ВЗМО) и низшими вакантными МО (НВМО)

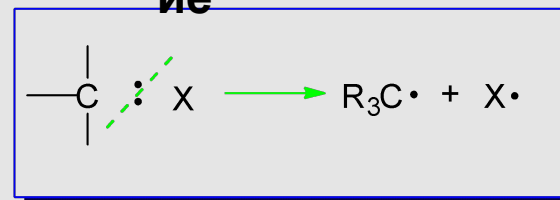


Разрыв ковалентной связи

Гетеролитическое



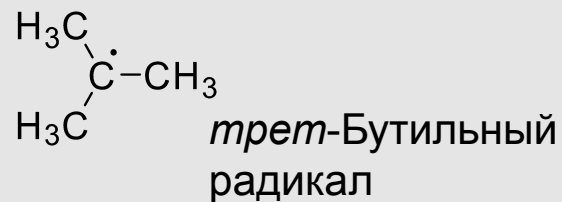
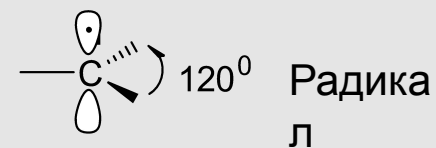
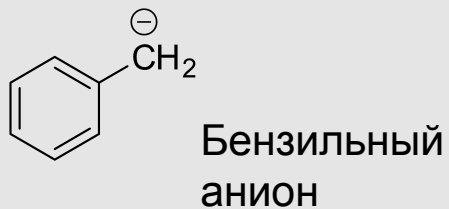
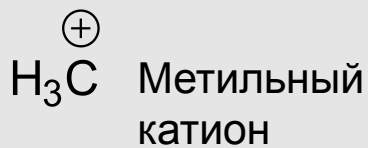
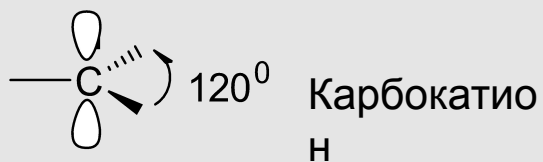
Гомолитическое



Катионы и
анионы

Интермедиаты

Радикалы



Современные методы исследования структуры органических молекул

- Электронная, или ультрафиолетовая спектроскопия
(УФ-спектроскопия, UV)
- Инфракрасная спектроскопия (ИК-спектроскопия, IR);
- Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР-спектроскопия, NMR);
- ~~Масс-спектрометрия (МС, MS);~~
- ~~Рентгено-структурный анализ (X-ray).~~

методы

Экспериментальны
е

- Квантово-химические методы – **Теоретические методы**