Харківський національний медичний університет
Кафедра медичної та біоорганічної хімії

«Біологічна та біоорганічна хімія»

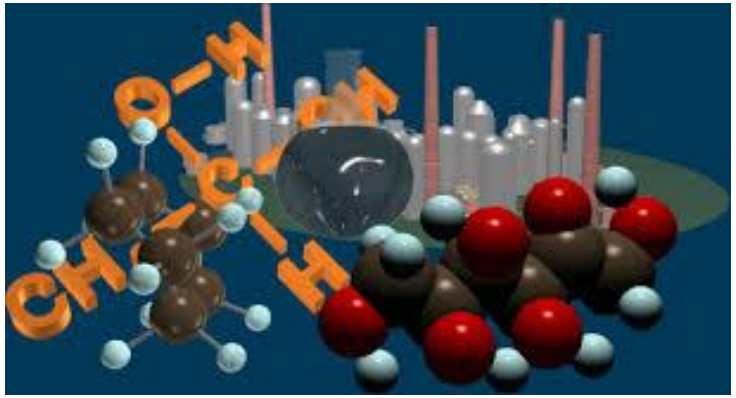
Лекція № 1

КЛАСИФІКАЦІЯ, БУДОВА І РЕАКЦІЙНА ЗДАТНІСТЬ БІООРГАНІЧНИХ СПОЛУК

Лектор: ст. викл. медичної та біоорганічної хімії,

к. фарм. н. Завада О.О.

Предмет біоорганічної хімії

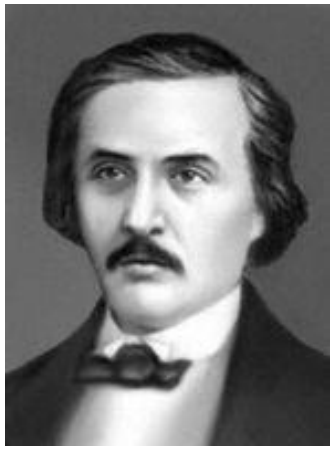
- ***Біоорганічна хімія*** – це наука, яка вивчає будову, фізико-хімічні властивості біологічно активних сполук, а також механізми реакцій, в яких вони беруть участь, з позицій органічної хімії.
- ***Біоорганічна хімія*** (грец. bios — життя + ŏrganon — знаряддя, інструмент, орган) — наука, яка розвивається у тісному зв'язку з молекулярною біологією, біохімією та іншими біологічними дисциплінами.
- 

<u>Біологічно активними</u> ***називаються сполуки, які синтезуються в організмі людини або потрапляють в організм і беруть участь в біохімічних процесах***

Клітина живого організму - дуже складний мікроскопічний реактор

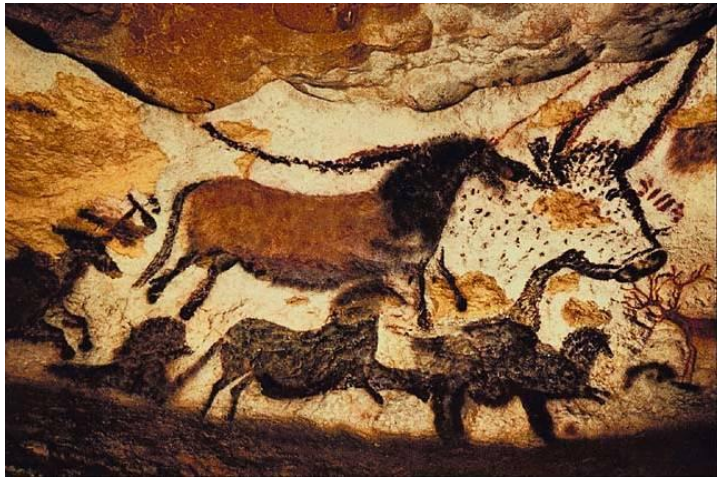
Хімік-органік + біохімік + молекулярний біолог - вивчення і моделювання перетворень, які аналогічні клітинним, *in vitro*.

«Органічна хімія займається вивченням законів, за якими перетворюються речовини, що становлять організми рослин і тварин. Її метою є пізнання способів отримання органічних речовин поза живої природи»



Шарль Жерар

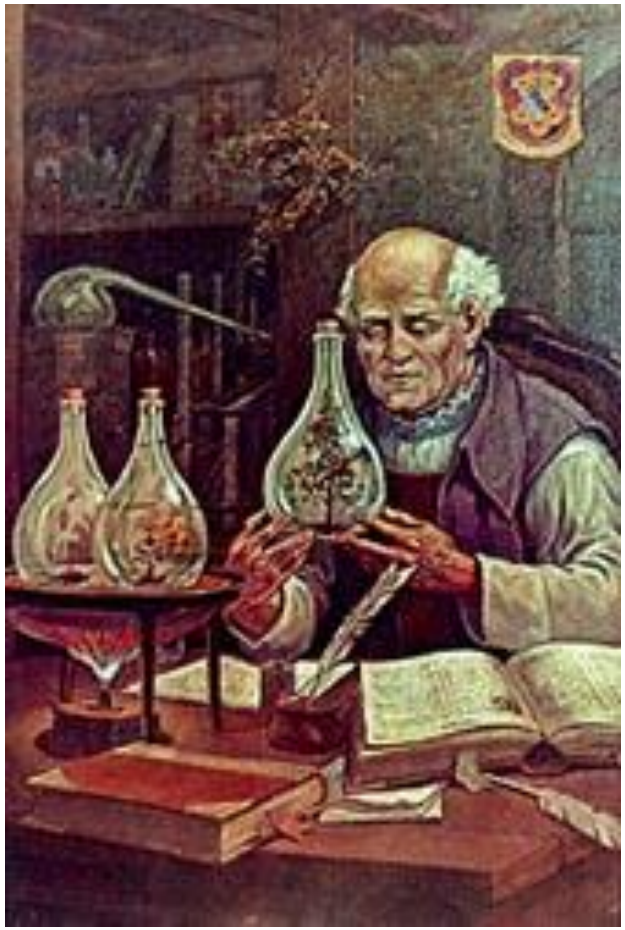
Предмет біоорганічної хімії



Ознайомлення людства з органічними сполуками почалося в стародавніх Єгипті, Індії, Фінікії. Застосовуючи досить прості способи переробки природної сировини, люди отримували такі органічні сполуки, як цукор, барвники (індиго, пурпур та ін.), рослинні, зокрема ефірні, та тваринні олії.

Предмет біоорганічної хімії

- В ***«алхімічний період»*** (IV – XVIст.), не знаючи складу органічних речовин, алхіміки провели значну кількість емпіричних досліджень та добули цілий ряд корисних речовин (було виділено винний спирт, діетиловий етер та ін.)
- XVI-XVIII ст. – період ***«ятрохімії»,*** засновником якої був ***Парацельс***.
- Він вважав, що ***мета хімії*** – це ***пошук*** не золота, а ***ліків***. У цей час з рослинної сировини було виділено значну кількість органічних кислот, таких як щавлева, лимонна, яблучна, галова, слизова, бурштинова та інші, отримано ряд алкалоїдів – опій, колхіцин
-



Предмет біоорганічної хімії

- ***Органічна хімія*** - наука, що вивчає сполуки карбону (вуглецю) з іншими елементами. Найчастіше вуглець утворює сполуки з такими елементами, як гідроген, оксиген, нітроген, сульфур, фосфор.

Назви ***"органічна хімія", "органічні речовини"*** походять від слова "організм". Ці назви ввів у науку у 1806 р. відомий шведський хімік Я.Берцеліус. На його думку, органічна хімія повинна вивчати речовини рослинного та тваринного походження, які він назвав *органічними речовинами*. Був послідовником ***теорії віталізму***, Я.Берцеліус і багато його сучасників вважали, що утворення органічних речовин відбувається з участю потаємної і недоступної для пізнання ***"життєвої сили"***

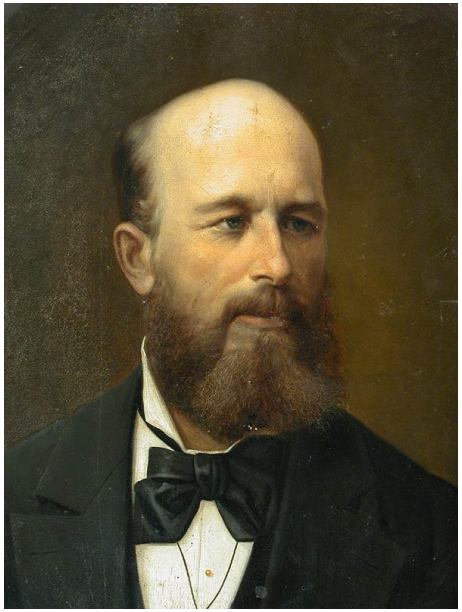
Предмет біоорганічної хімії

- Надзвичайно важливе значення для розвитку органічної хімії мав ***синтез сечовини*** (речовини тваринного походження), який був проведений також ***Ф.Велером у 1828р.***
- У другій половині XIX ст. почала бурхливо розвиватися синтетична органічна хімія.
- У 1845 р. Г. Кольбе синтезував оцтову кислоту,
  використовуючи деревне вугілля, сірку, хлор та воду;
- У 1854 р. М. Бертло
  отримав жири з гліцерину та відповідних карбонових кислот;
- у 1861 р. О.Бутлеров синтезував прості вуглеводи з формальдегіду.
-

Ф.Велер

Теорія хімічної будови органічних сполук О.М.Бутлерова

- 1. Атоми в молекулах органічних речовин сполучені між собою в певному порядку. Послідовність сполучення атомів у молекулі О. М. Бутлеров назвав хімічною будовою, або структурою, молекули.
  2. Властивості молекул органічних речовин залежать від природи атомів, що входять до складу молекул, від кількості цих атомів і від порядку їх сполучення в молекулі, тобто від хімічної будови молекули.
  3. Органічні речовини з однаковим якісним і кількісним складом, але з різною хімічною будовою — ізомери — мають різні хімічні властивості.



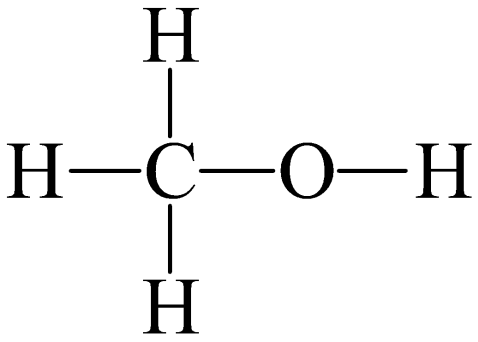
О.М.Бутлеров

- 4. Знаючи властивості органічних речовин, можна встановити їх хімічну будову.
  5. Реакційна здатність (хімічна активність) атомів, що входять до складу молекули органічної речовини, може змінюватись залежно від того, з якими іншими атомами вони зв'язані в даній молекулі. Ця зміна хімічної активності атомів обумовлюється взаємним впливом безпосередньо сполучених (сусідніх) атомів, а також взаємним впливом атомів через інші атоми (посередній вплив).

Теорія хімічної будови органічних сполук О.М.Бутлерова

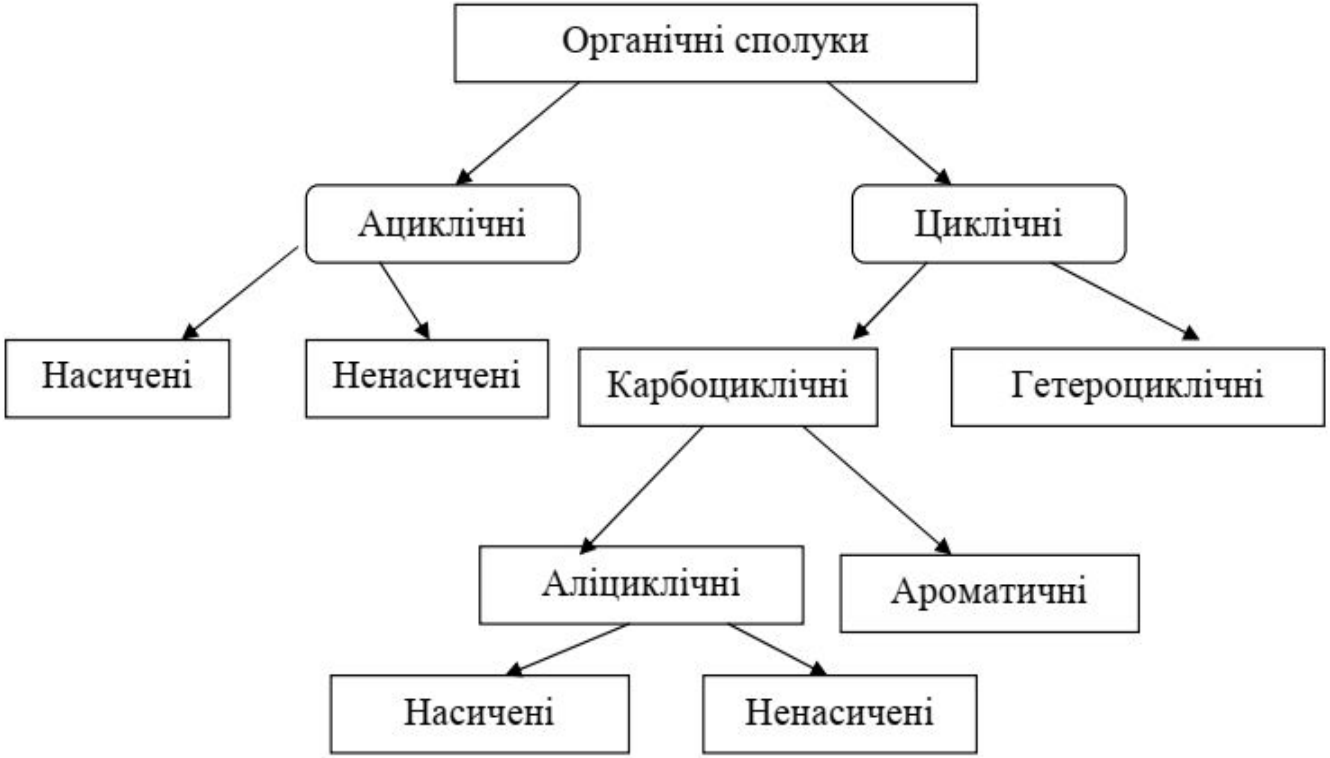
Структурна формула — це зображення послідовності зв'язування атомів в молекулі.

Структурна формула



Брутто-формула – CH_4O **або** CH_3OH

За будовою карбонового ланцюга (карбоновим скелетом)



За наявністю та будовою функціональних груп

Органічні речовини

Вуглеводні
Містять атоми C, H

Представники
Алкани,
Алкіни,
Арени

Оксигеновмісні сполуки
Містять атоми C, H, O
Представники
Спирти,
Кислоти,
Жири,
Вуглеводи

Нітрогено-вмісні сполуки

Містять атоми C, H, N

Представники
Аміни

Класифікація в залежності

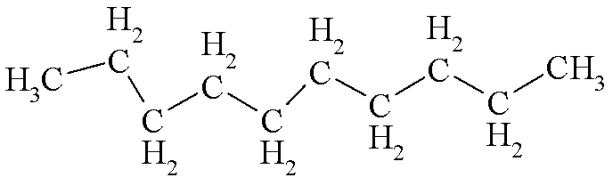
від будови (структури) вуглецевого ланцюга.

Всі органічні сполуки поділяються на два типи:

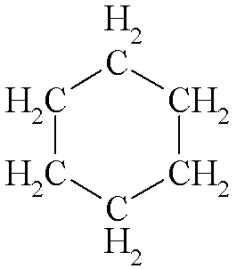
ациклічні та циклічні

Карбонові ланцюги:

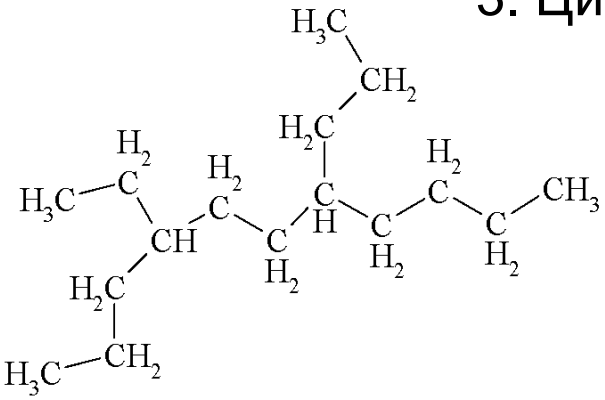
1. Лінійної будови
2. Розгалуженої будови
3. Циклічної будов



1.



3.

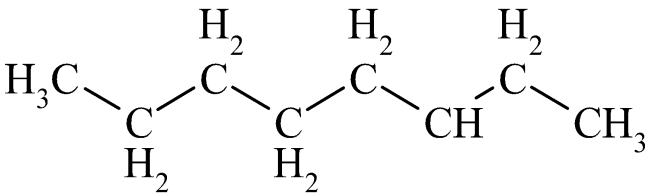


2.

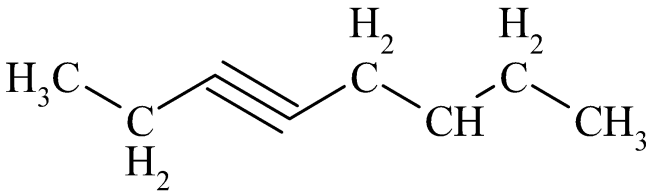
Класифікація органічних сполук

В залежності від характеру зв'язків між атомами карбону

Насичені, прості одинарні ковалентні зв'язки



Ненасичені, в карбонових ланцюгах містяться подвійні чи потрійні зв'язки



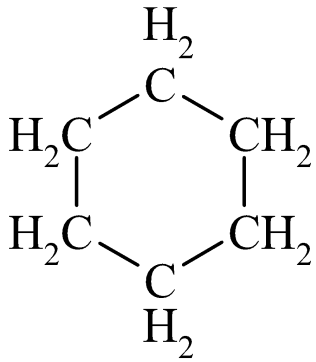
Циклічні

сполуки поділяються на
карбоциклічні та ***гетероциклічні***.

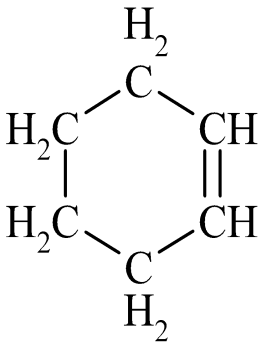
- ***Карбоциклічні*** мають цикл, побудований *лише з атомів вуглецю,* бувають *насичені* та *ненасичені,* а також *ароматичні*
- ***Гетероциклічні*** містять у циклі *поряд з атомами вуглецю різні за природою елементи*

  (переважно N, O, S)

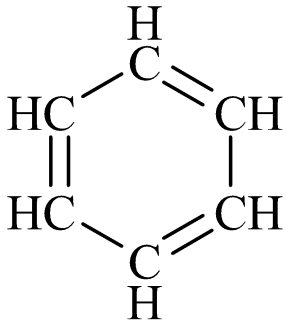
Насичені



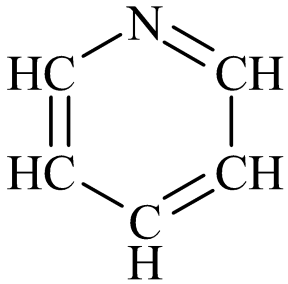
Ненасичені



Ароматичні



Гетероциклічні



Класифікація органічних сполук

- ***Функціональна група*** - це група атомів чи окремий атом, що має невуглеводневу природу і надає речовині певних властивостей, специфічних для даного класу органічних сполук

  Монофункціональні сполуки, до складу яких входить лише одна функціональна група

  Поліфункціональні сполуки, які містять декілька однакових функціональних груп

  Гетерофункціональні сполуки, що мають у своєму складі дві чи більше різних функціональних груп

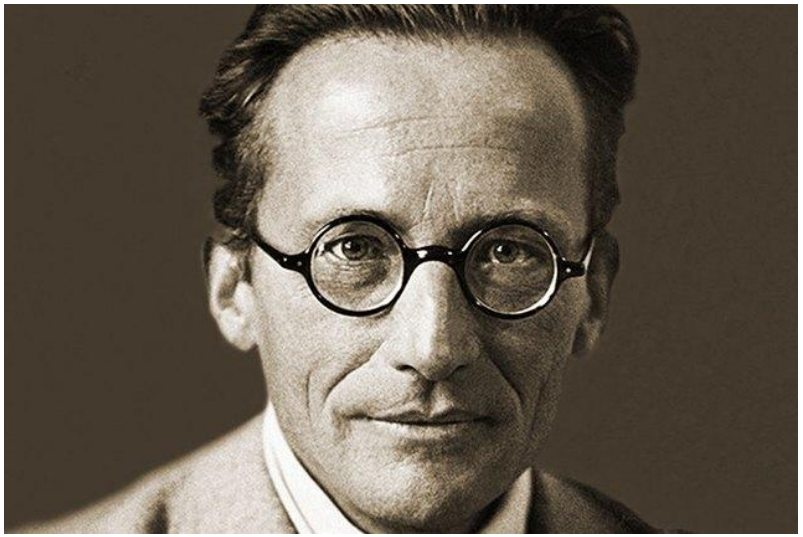
Класифікація органічних сполук

Функціональна група	Клас сполук	Загальна формула
галогени	галогенпохідні	R–Hal
гідроксильна – OH	спирти, феноли	R–OH
карбонільна – C=O	альдегіди кетони	R–C=O, R–C=O H R
карбоксильна – COOH	карбонові кислоти	RCOOH
нітрогрупа – NO_2	нітропохідні	R–NO_2
аміногрупа – NH_2	аміни	R–NH_2
сульфогрупа – SO_3H	сульфонові кислоти	R–SO_3H
меркаптогрупа - SH	тіоспирти (меркаптани)	R–SH

Електронна будова атома карбону та його хімічних зв`язків

- Молекули органічних сполук побудовані з атомів, які як правило, з'єднані один з одним за допомогою ковалентних зв'язків.
- Атоми в складі молекули з'єднані між собою в певному порядку, відповідно до їх валентності. Валентність атома вуглецю − чотири

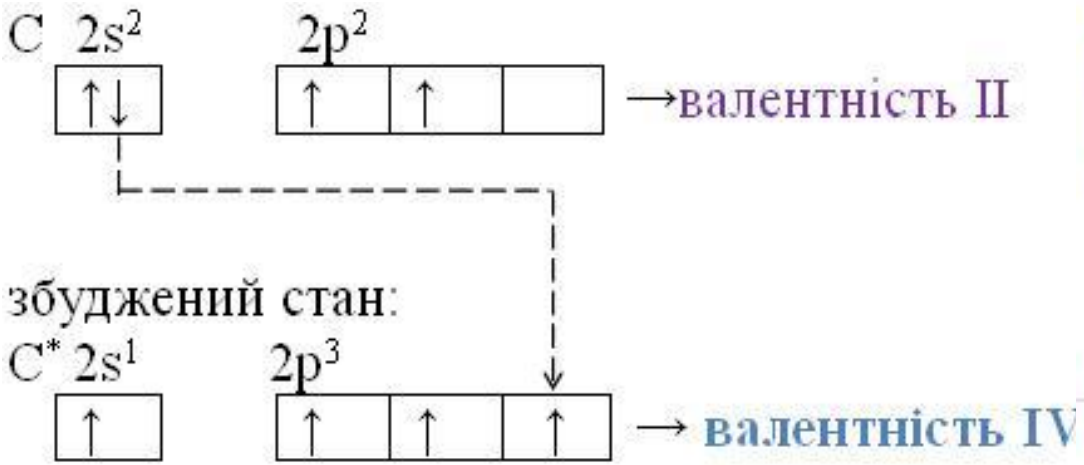
- *Згідно з сучасною теорією молекулярних орбіталей (МО), електрони розподілені на молекулярних орбіталях подібно тому, як в атомах електрони розміщені на атомних орбіталях (АО). Теорія МО заснована на розв' язуванні рівняння Шредингера.*

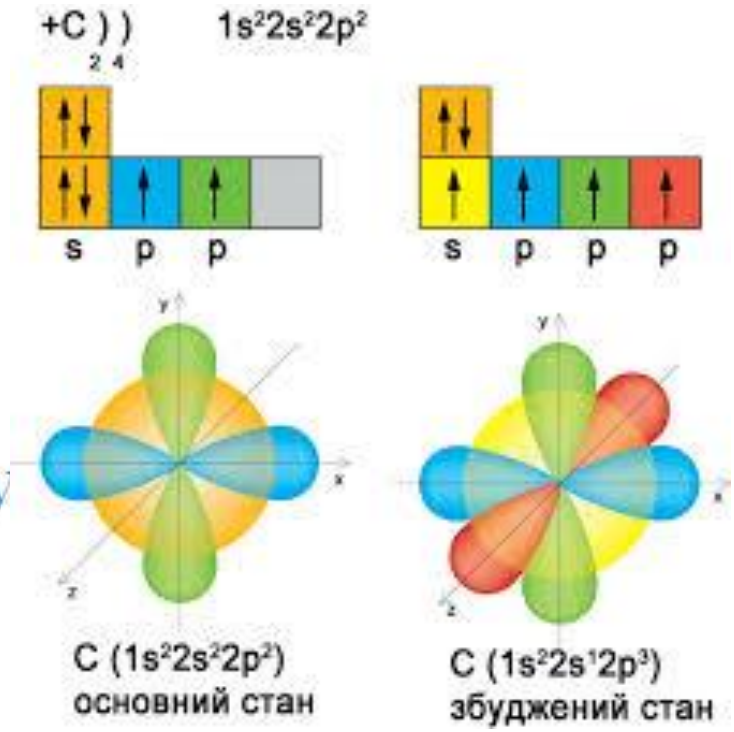


Шредингер

Електронна будова атома карбону та його хімічних зв`язків

Стаціонарний стан Карбону:

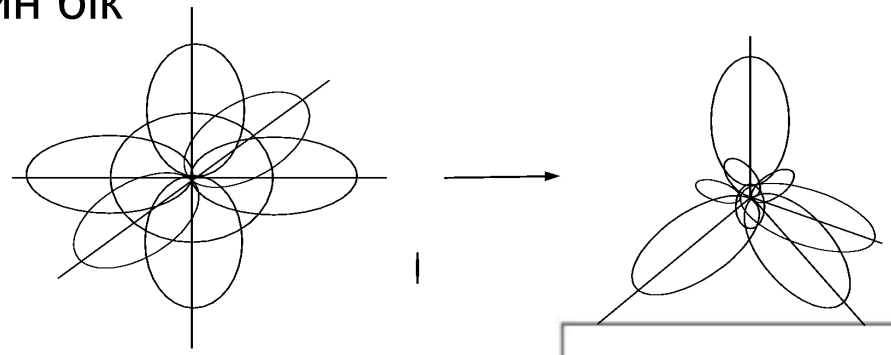




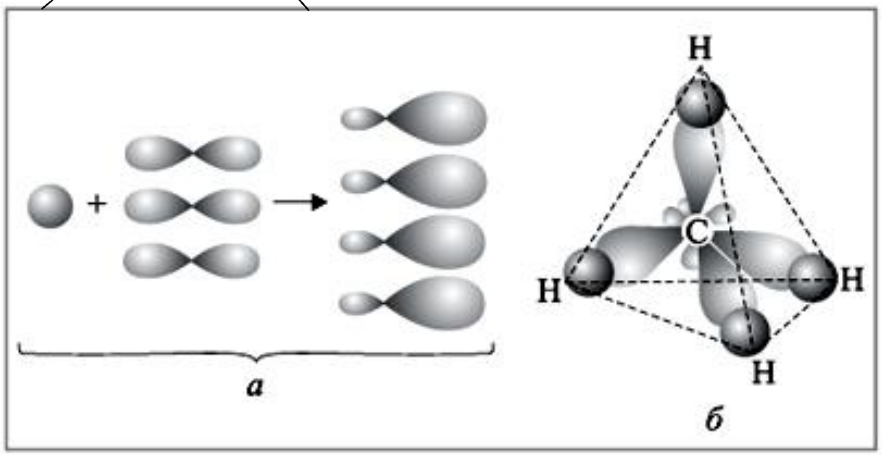
Електронна будова атома карбону та його хімічних зв`язків

- ***Гібридизація*** – це вирівнювання орбіталей за енергією та формою.

- Утворення чотирьох рівноцінних орбіталей з одної s-орбіталі та трьох
- p-орбіталей називається ***sp^3 – гібридизацією***
- (sp^3 означає, що орбіталь гібридна й на чверть складена з s – орбіталі та на три чверті – з p – орбіталей).
- Гібридна sp^3 – орбіталь має форму несиметричної об'ємної вісімки, витягнутої в один бік

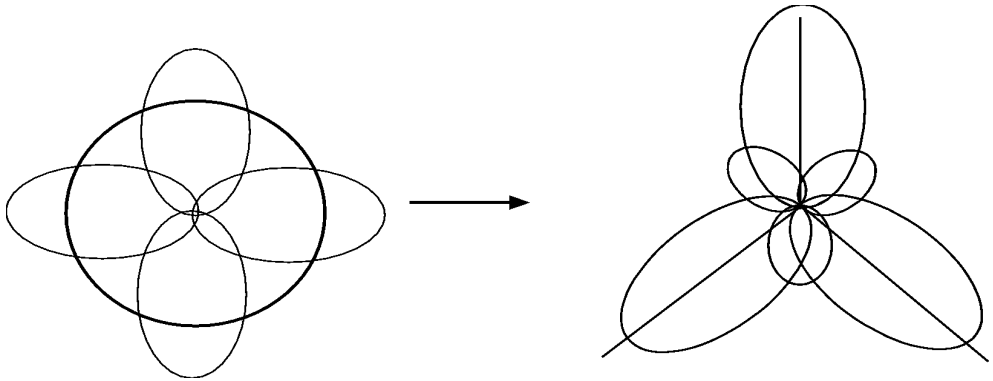


sp^3 – *Гібридні орбіталі направлені під кутом 109°28' і обумовлюють розміщення молекули в просторі. В стані* ***sp^3****–гібридизації карбон пербуває в алканах.*



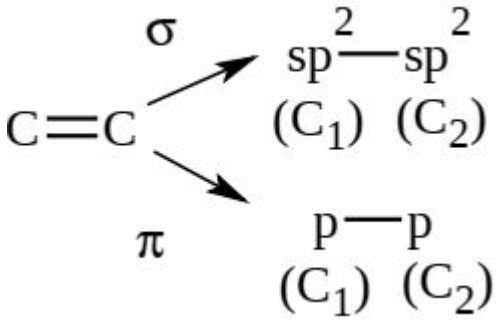
Електронна будова атома карбону та його хімічних зв`язків

- Якщо s – орбіталь атома карбону гібридизується тільки з двома p – орбіталями, то виникають три нові рівноцінні sp^2 – гібридні орбіталі. Тобто sp^2 – гібридна орбіталь на третину складена з s – орбіталей і на 2/3 з p – орбіталей.



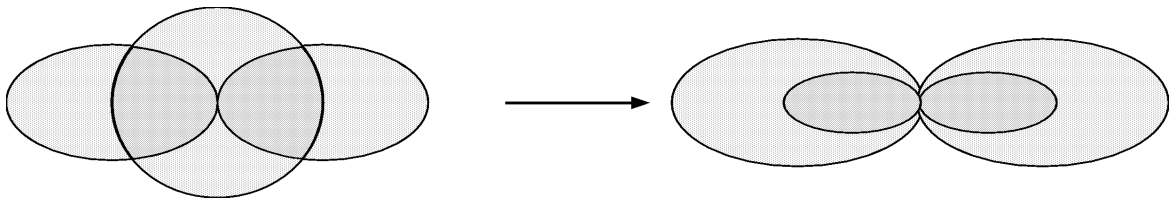
sp2 – Гібридні орбіталі направлені під кутом 120°, тобто молекула розташована в площині.

В стані sp^2 - гібридизації *атом карбону перебуває* в алкенах

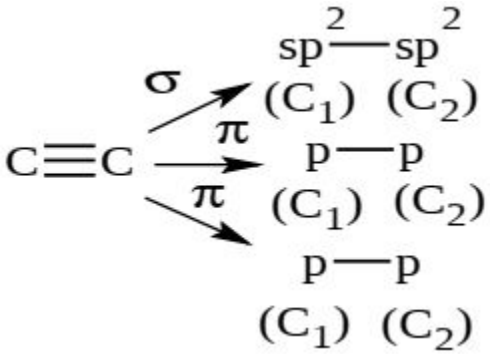


Електронна будова атома карбону та його хімічних зв`язків

- Якщо гібридизується одна s – орбіталь з p – орбіталлю, то утворюються дві нові однакові sp – гібридизовані орбіталі, які складаються з s- і наполовину з p – орбіталей.



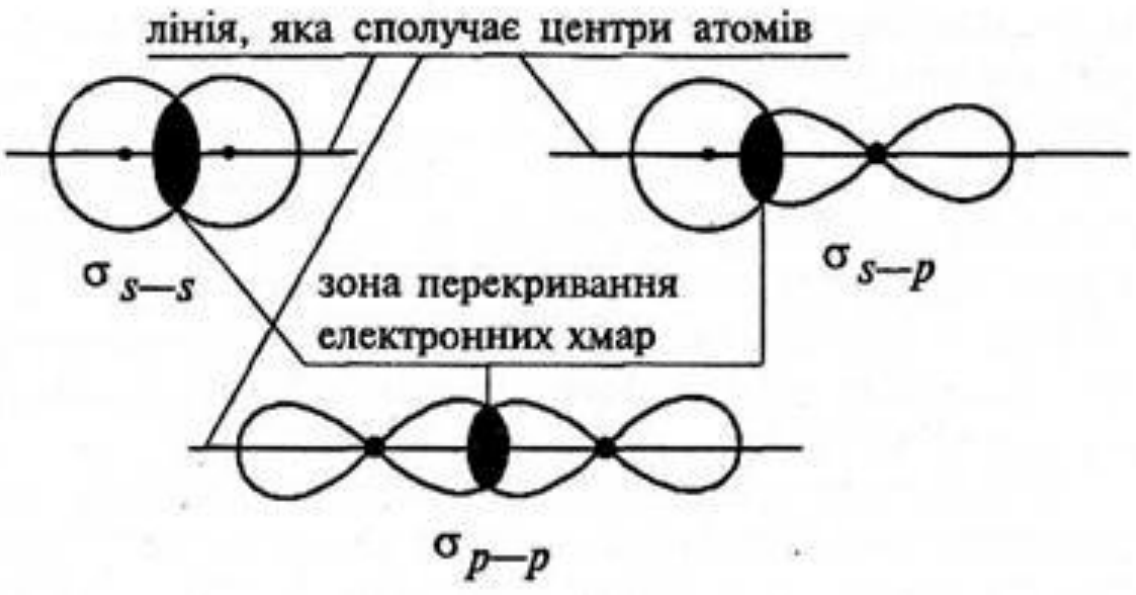
У стані sp – гібридизації *атом карбону перебуває* в алкінах. *sp – Гібридні орбіталі направлені під кутом 180°, тобто молекула має лінійну конфігурацію.*



В біологічно активних сполуках атом карбону в основному перебуває в стані sp^3 – гібридизації та sp^2 – гібридизації.

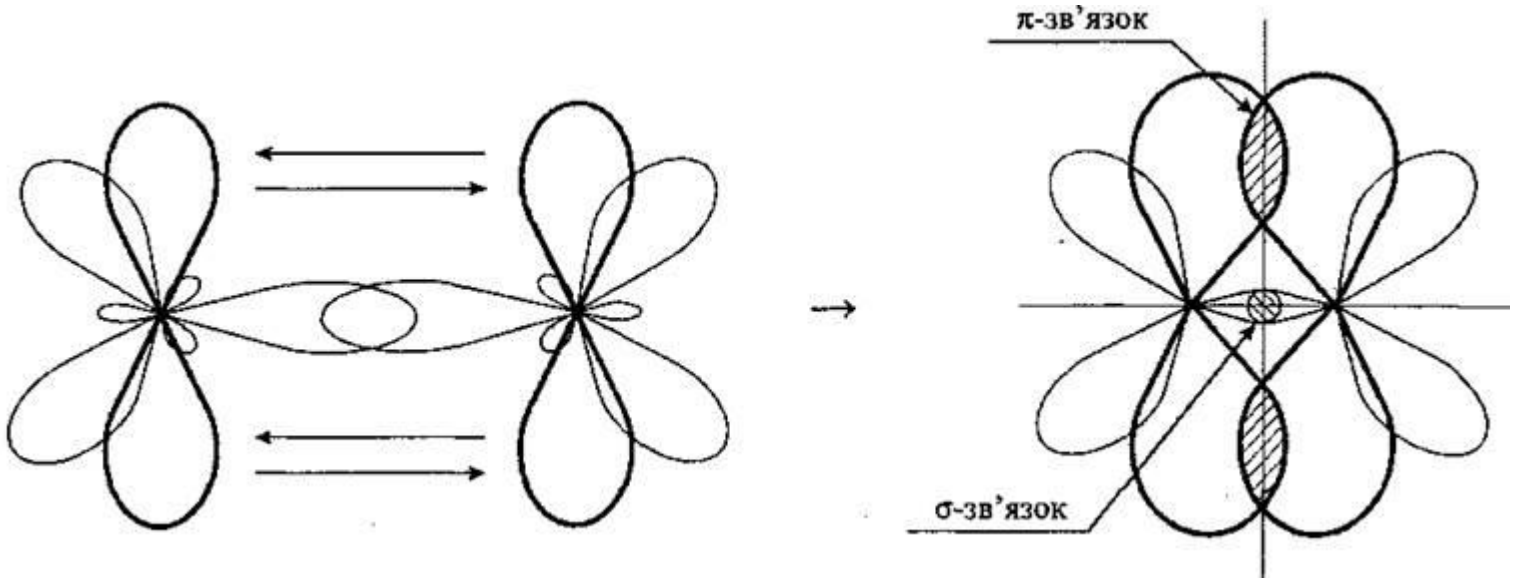
Електронна будова атома карбону та його хімічних зв`язків

- Міцність зв’язку залежить від ступеня перекривання атомних орбіталей.
- **σ-**зв`язок - ковалентний зв'язок, утворений перекриванням атомних орбіталей вздовж осі, що з'єднує ядра атомів



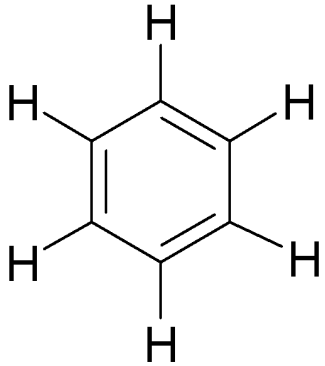
Електронна будова атома карбону та його хімічних зв`язків

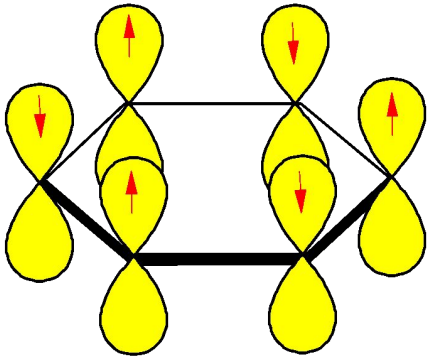
- ***π - зв’язок-*** ковалентний зв'язок, утворений ***перекриванням,*** якщо орбіталі орієнтовані паралельно одна одній, а максимум перекривання знаходиться поза лінією, що з’єднує атомні ядра

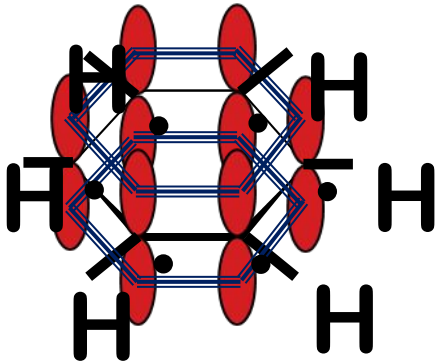


Ароматичні структури

Ароматичними вуглеводнями або ***аренами*** називаються сполуки карбоциклічного ряду, молекули яких містять стійке циклічне угрупування - бензенове кільце (циклогексантриєновий цикл). Структурну формулу запропонував А.Кекулє (1868).



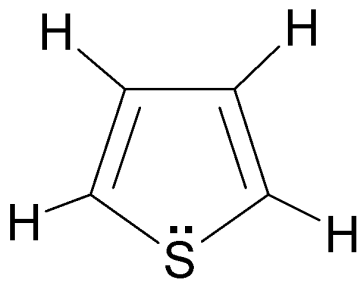


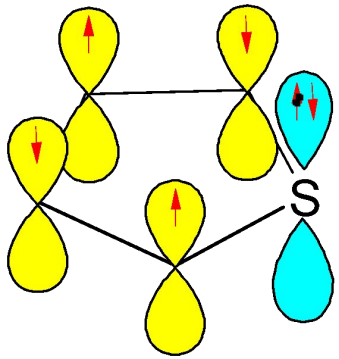


1. Плоский скелет молекули (обумовлений sp^2– гібридизацією атома Карбону);
2. Безперервний ланцюг спряження (в результаті наявності π,π або р,π-спряження);
3. Число делокалізованих електронів ***N=4n+2***
 де n повинно бути цілим числом ***(правило Хюккеля)***

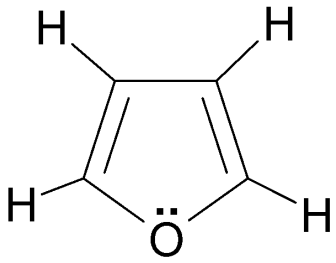
Ароматичні структури

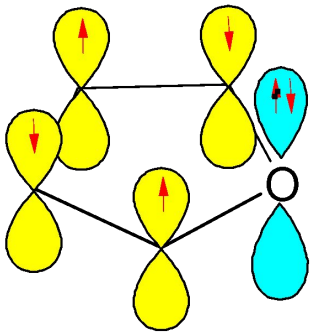
Правилу Хюккеля підпорядковуються і проявляють ароматичний характер деякі сполуки, які не є похідними бензену. Їх називають ***небензоїдними ароматичними системами***, наприклад катіон циклопропенілію

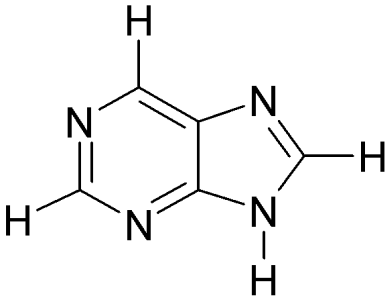


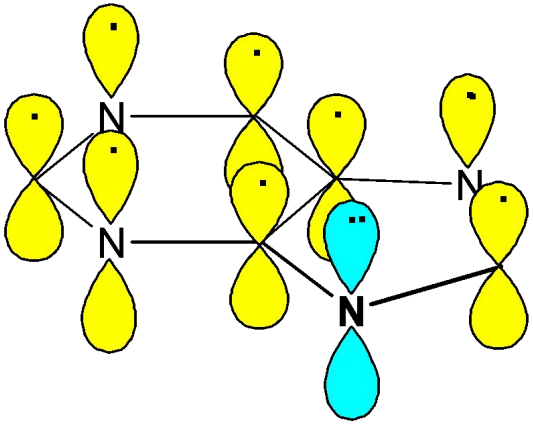


p-π-Сопряжение



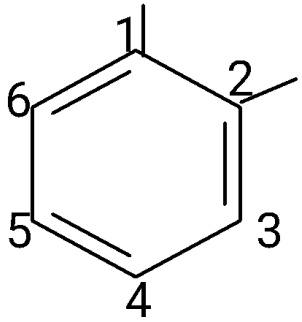




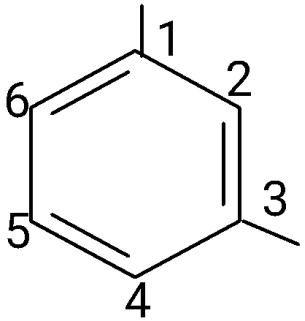


НОМЕНКЛАТУРА, ІЗОМЕРІЯ

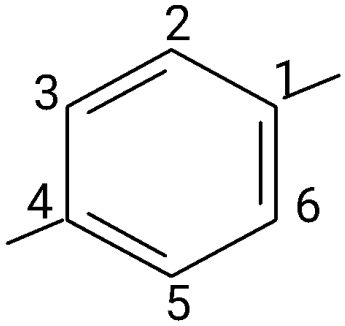
- За правилами номенклатури IUPAC, назви аренів повинні закінчуватися на ***-ен***, тобто не бензол, а бензен. Однак, історично залишився суфікс ***–ол*** (не потрібно його змішувати із суфіксом ***-ол*** у спиртів). Сьогодні використовуються дві назви: ***бензол*** і ***бензен***.
- Крім цього, для ароматичних сполук до цього часу збережені і широко застосовуються тривіальні назви.
- Для двозаміщених бензенів існує три ізомери:



1,2-***Орто***-ізомер або (***о***-)



1,3-***Мета***-ізомер або (***м***-)



1,4-***Пара***-ізомер або (***п*** -)

Електронні ефекти органічних сполук

- ***Індуктивний ефект (І) - це зсув електронної густини до електронегативнішого атома по σ– зв'язку***

CH3→CH=CH2

+ І – ефект

(зміщення електронної густини від себе на сусідні зв’язки (відштовхують від себе електронну густину)) виявляють :

а) менш електронегативні, ніж карбон елементи, наприклад, лужні метали;

б) групи з повним негативним зарядом, наприклад O- ;

в) алкільні групи, наприклад: H_3C - ; CH_3 – CH_2 – та інші.

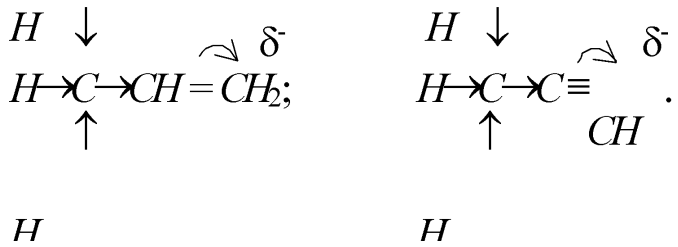
-І – ефект

-(атом або група атомів відтягують електронну густину сусідніх зв’язків на себе)

- виявляють елементи більш електронегативні, ніж карбон, наприклад: $–NH_2$; - OH; - $COOH$; - CHO; - NO_2 та інші.

Електронні ефекти органічних сполук

Мезомерний ефект (М) або ефект супряження - зсув електронної густини по супряженій системі



Мезомерний ефект буває позитивним (+М) і негативним (-М). Позитивним вважають такий ефект, при якому атом або група атомів викликає зміщення електронної густини до π - зв'язків. При негативному мезомерному ефекті атом або група атомів викликає зміщення електронної густини від π - зв'язків до себе, у свій бік.

+М – ефект виявляють атоми і групи атомів, які мають вільні електронні пари. Наприклад:

$-\ddot{N}H_2$; $-\ddot{O}H$; $-\ddot{Cl}$; $-\ddot{Br}$; $-\ddot{J}$ та інші.

-М – ефект виявляють атоми, які мають вакантну низькорозташовану орбіталь, і групи, які мають π - зв'язок між атомами з різною електронегативністю

$>\overset{\delta^+}{C}=\overset{\delta^-}{O}$, $-\overset{\delta^+}{C}\equiv\overset{\delta^-}{N}$, $-\overset{\delta^+}{N}\overset{\delta^-}{O_2}$, $>\overset{\delta^+}{C}=\overset{\delta^-}{N}H$, $>\overset{\delta^+}{S}\overset{\delta^-}{O_2}$

Взаємний вплив атомів в молекулі

Індуктивний ефект

$CH_3—H$

$H_3\overset{\delta^+}{C}\rightarrow\overset{\delta^-}{\mathbf{Cl}}$

$H_3\overset{\delta^+}{C}\rightarrow\overset{\delta^-}{\mathbf{OH}}$

метан

Зв'язок С–Н малополярний

хлорметан

Зв'язок С–Cl полярний

метанол

Зв'язок С–О полярний

Зміщення електронної густини по лінії σ-зв'язків називається індуктивним ефектом і позначається буквою I.

Взаємний вплив атомів в молекулі

Індуктивний ефект

Електроноакцепторні замісники – це атом або група атомів, що зміщують електронну густину σ-звязку від атома Карбону, проявляють *негативний індуктивний ефект* (-І-ефект).

Електронодонорні замісники — це атом або група атомів, що зміщують електронну густину σ-звязку до атома Карбону, проявляють позитивний індуктивний ефект (+І-ефект).

Взаємний вплив атомів в молекулі

Індуктивний ефект

1. Индуктивный эффект проявляется всегда при наличии в молекуле атомов
с различной электроотрицательностью.
2. Индуктивный эффект распространяется только через σ-связи и всегда
в одном направлении.
3. Индуктивный эффект затухает в цепи через 3—4 σ-связи.

Взаємний вплив атомів в молекулі

Індуктивний ефект

+I-Ефект проявляють аліфатичні вуглеводневі радикали, наприклад, алкільні радикали ($–CH_3$, $–C_2H_5$ і т. д.).

Більшість функціональних груп проявляють *-I-ефект*: –Hal, $–NH_2$, –OH, >C=O, –COOH.

пропен

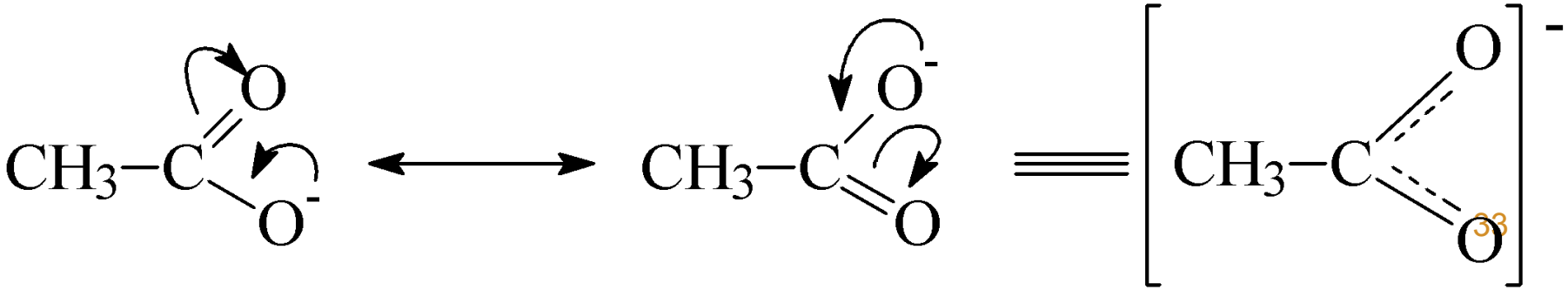
Взаємний вплив атомів в молекулі

Мезомерний ефект (ефект спряження)

Сопряженной называют систему, состоящую из чередующихся простых и кратных связей, или же когда рядом с углеродным атомом, образующим кратную связь, находится атом, p-АО которого заполнена одним электроном, двумя или вакантна.

Сопряжение связей обусловливает образование единого делокализованного электронного облака.

Делокалізований зв'язок



Гомологи

Групи органічних сполук однотипної структури з однаковими функціональними групами, що відрізняються один від одного на одну або декілька груп CH_2 у вуглецевому ланцюгу, складають гомологічний ряд.

Гомологічний ряд метана

CH_4 CH_3CH_3 $CH_3CH_2CH_3$ $CH_3CH_2CH_2CH_3$

Гомологічний ряд ізобутану

$$CH_3CH(CH_3)CH_3$$

$$CH_3CH(CH_3)CH_2CH_3$$

$$CH_3CH(CH_3)CH_2CH_3$$

$$CH_3CH(CH_3)CH_2CH_2CH_2CH_3$$

- ***Ізомерія*** **– це існування органічних сполук із однаковим якісним та кількісним складом, але різними властивостями, що обумовлене різною будовою (структурою) органічних сполук**
- **Ізомерія**

Структурна

Статична

1. Ізомерія вуглецевого скелету

2. Ізомерія положення функціональної групи

3. Ізомерія самих функціональних груп (метамерія)

Динамічна (таутомерія)

Просторова (Стереоізомерія)

Конфігураційна

Оптична

1. Енантіомерія

2. Діастереомерія

Геометрична

Конформаційна (поворотна)

Структурна ізомерія

а) ізомерія вуглецевого скелета

$H_3C - CH_2 - CH_2 - CH_3$

Бутан

$H_3C - CH(CH_3) - CH_3$

Ізобутан

б) ізомерія положення

$H_3C - CH_2 - CH_2 - CH_2 - Cl$ і $H_3C - CH_2 - CH(Cl) - CH_3$

1 – Хлорбутан 2 - Хлорбутан

в) ізомерія взаємного положення

г) метамерія

$H_2C(Cl) - CH_2 - CH_2 - CH_3$ і $H_3C - CH(Cl) - CH(Cl) - CH_3$

1,3 – Дихлорбутан 2,3 - Дихлорбутан

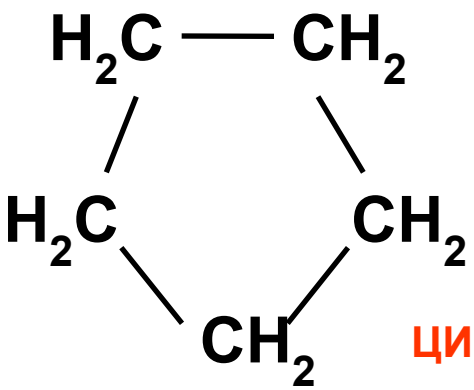
$H_3C - CH_2 - O - CH_2 - CH_3$ і $H_3C - O - CH_2 - CH_2 - CH_3$

Діетиловий ефір Метилпропіловий ефір

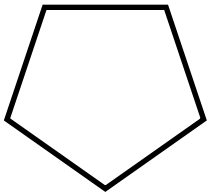
Міжкласова ізомерія

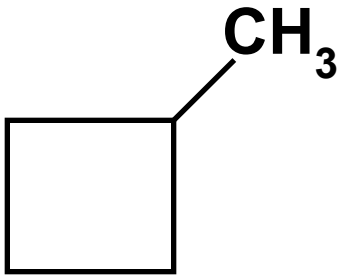
C_5H_{10}

$CH_2{=}CH{-}CH_2{-}CH_2{-}CH_3$ ПЕНТЄН-1

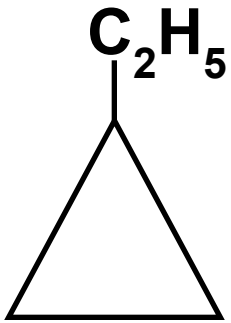


ЦИКЛОПЄНТАН



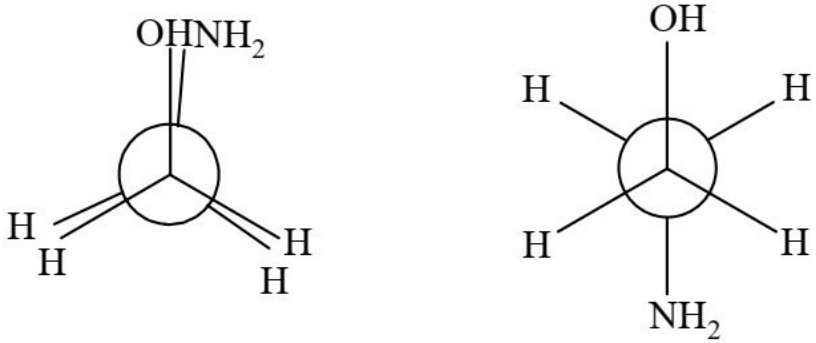


МЕТИЛЦІКЛОБУТАН



ЕТИЛЦІКЛОПРОПАН

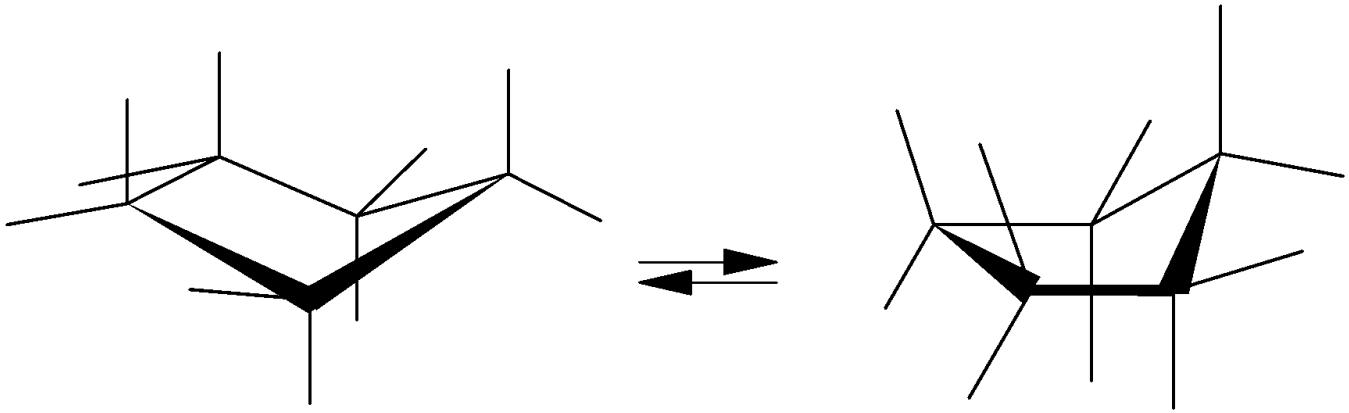
- ***а) поворотна ізомерія (конформація)***



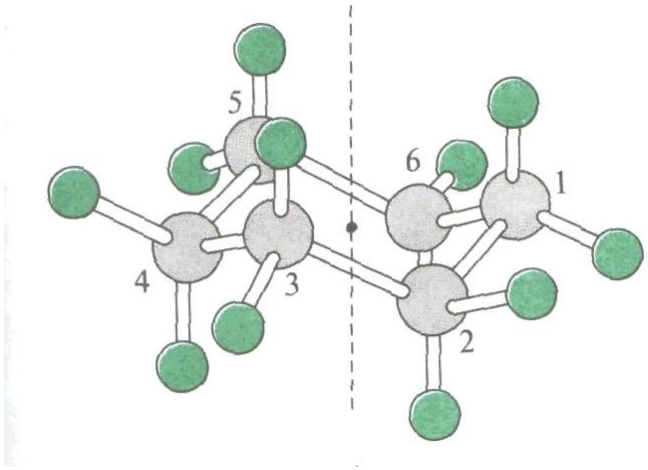
затінена конформація (а) загальмована конформація (б)

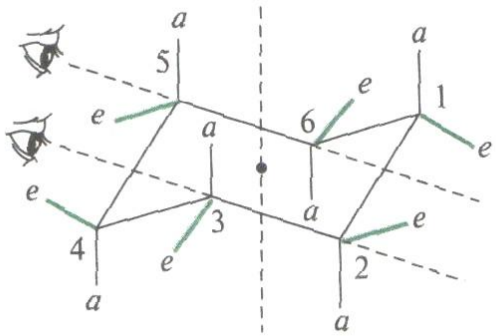
Конформаційна ізомерія циклоалканів пов'язана з особливостями їх будови. конформаційного аналізу К. Пітцера (1947 р.), враховує ттеорія орсійні напруження, що приводить до зміни конформацій циклу.

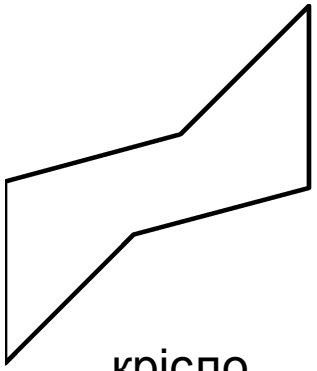
Так, циклопентан існує у вигляді фігури, що нагадує конверт:



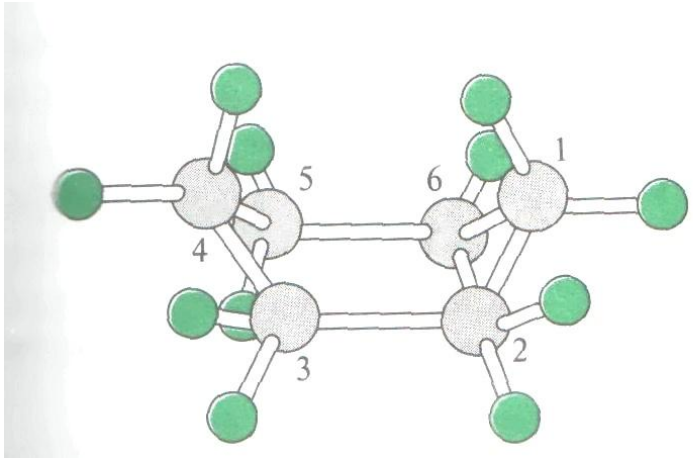
Циклогексан існує в декількох конформаціяй, які швидко переходять одна водну в процесі інверсії циклу. Найбільш стійкою є конформація *крісла* та *ванни*.

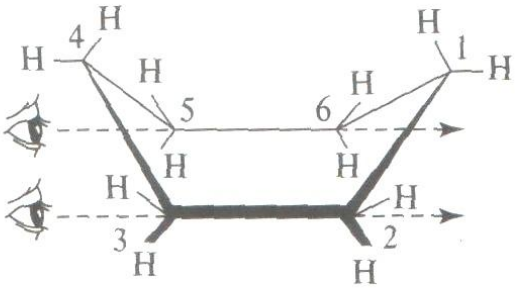


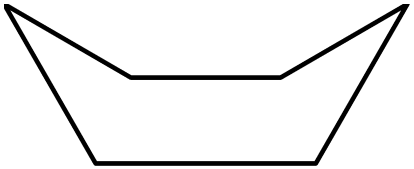




крісло

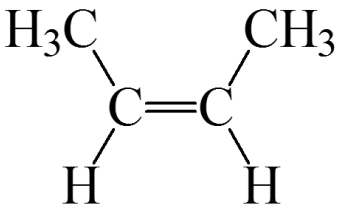




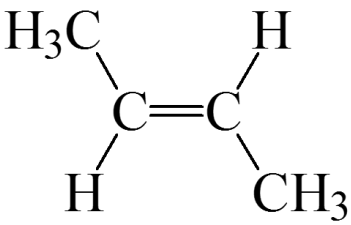


ванна

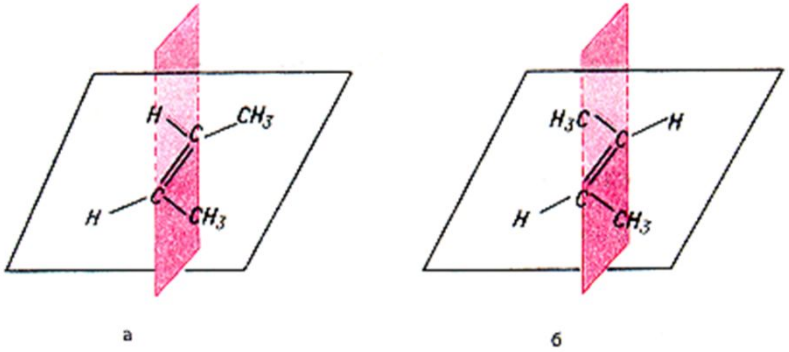
- **б) геометрична (цис-, транс-) ізомерія**



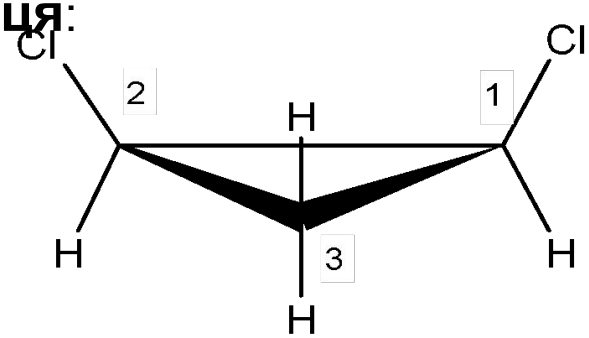
цис-бутен-2
$T_{кип}$=4°C



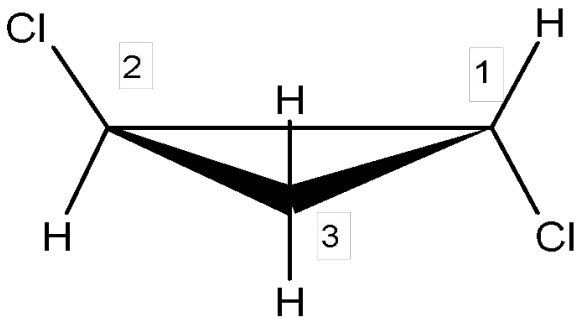
транс-бутен-2
$T_{кип}$=1°C



Геометрична ізомерія в циклоалканах виникає завдяки жорсткому розташуванню замісників в циклі, внаслідок чого вони не здатні змінювати своє положення відносно площини кільця:



цис-1,2-Дихлороцикло-пропан (Z-ізомер)



транс -1,2-Дихлороцикло пропан (Z-ізомер)

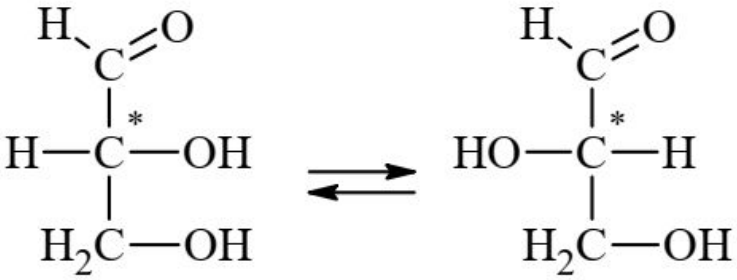
в) оптична (дзеркальна) ізомерія

Енантіомерія – вид ізомерії обумовлений здатністю речовин обертати площину поляризації.

Здатність деяких речовин обертати площину поляризації називається **оптичною активністю.**

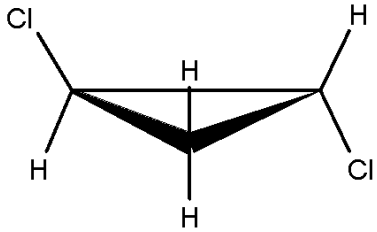
Хіральність – це здатність речовини існувати у вигляді пари несумісних один із одним дзеркальних відображень.

Хіральний центр – це атом карбону в sp^3- гібридизації і зв'язаний із чотирма різними замісниками.



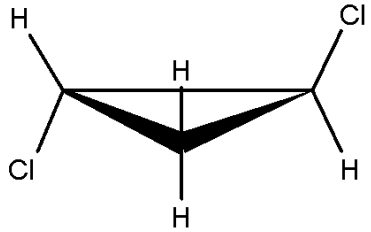
D-гліцеральдегід L-гліцеральдегід

Енантіомерія аліциклічних сполук виникає при наявності хірального атома Карбону і відсутності елементів симетрії, в першу чергу площини симетрії. Так, циклопропан з двома замісниками в *транс*-1,2-положенні або з двома різними як у *транс*-1,2-положенні, та і в *цис*-1,2-положенні існує у вигляді енантіомерів:

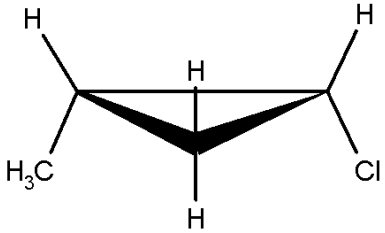


Енантіомери (не суміщаються при накладанні)

Дзеркало

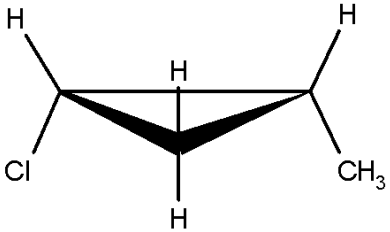


транс -1,2-Дихлороцикло-пропан (Z-ізомер)

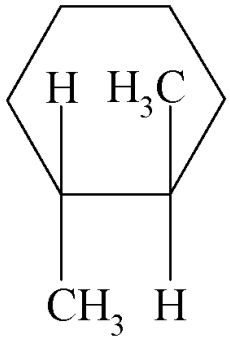


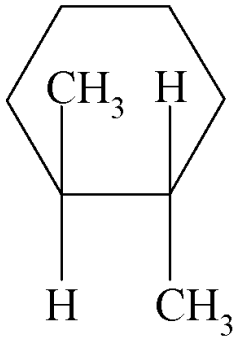
Енантіомери (не суміщаються при накладанні)

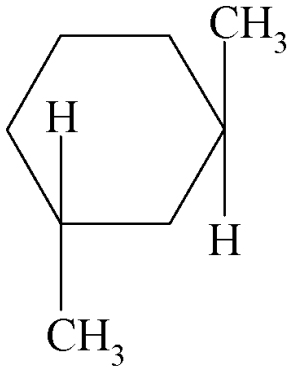
Дзеркало

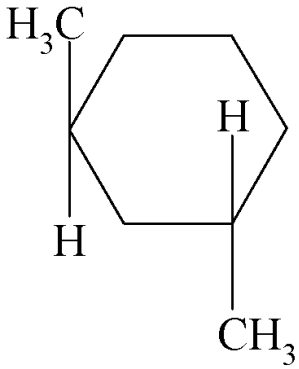


цис-1-Метил-2-хлоро-циклопропан



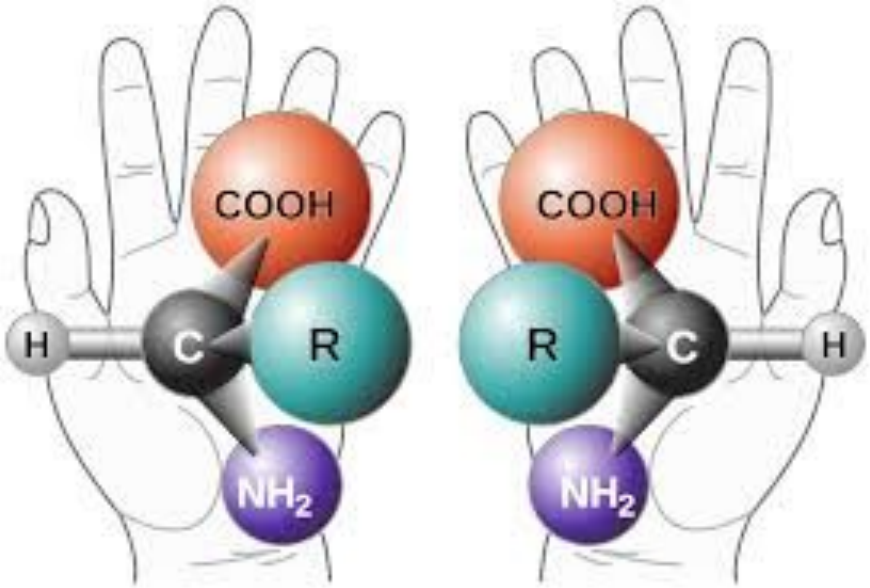


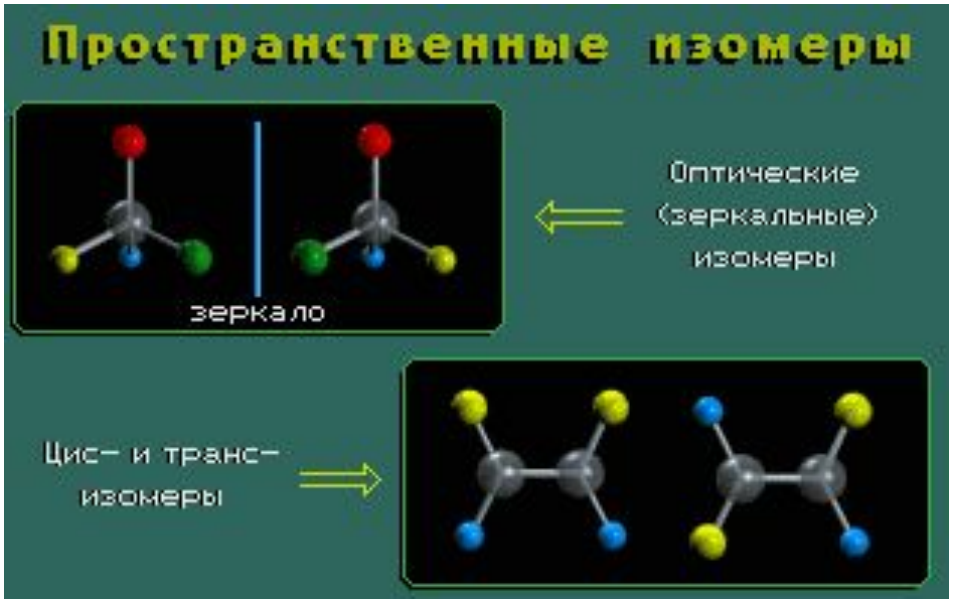




Ізомери

- ***Структурні ізомери*** – сполуки, які мають однаковий кількісний склад, але відрізняють порядком зв'язування атомів, тобто хімічною будовою.
- ***Просторові ізомери*** (**стереоізомери**) – сполуки, які мають однаковий кількісний склад, хімічну будову, але розрізняються розташуванням атомів у просторі.

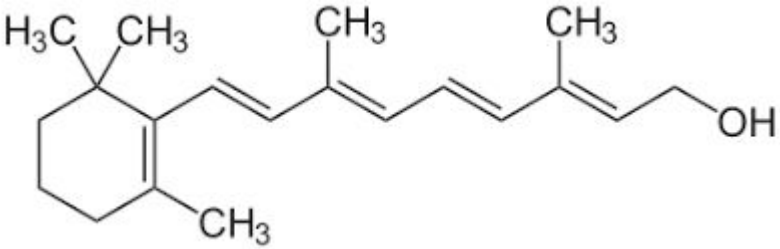




Біологічне значення просторової ізомерії

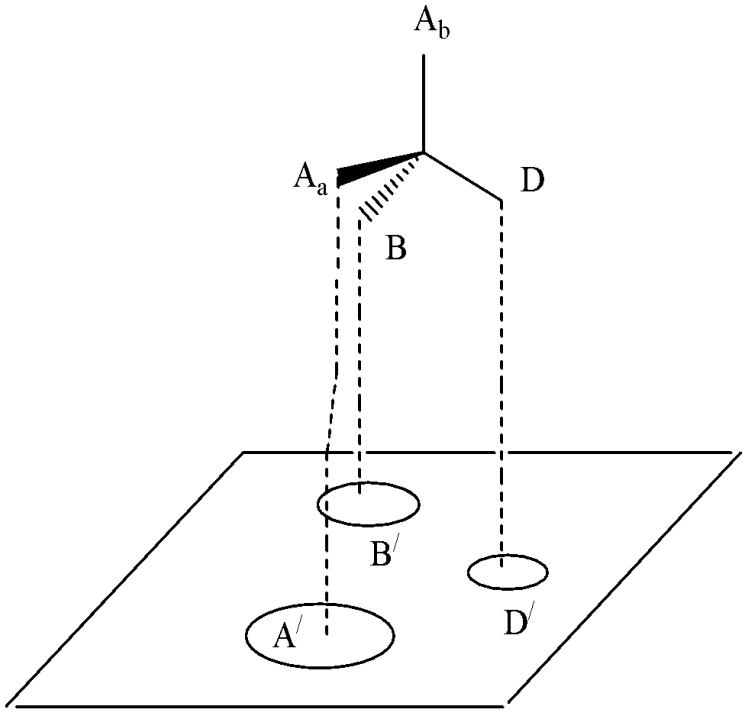
- ***1) Фумарова кислота утворюється в організмі людини в нормі в циклі Кребса. Утворення в організмі людини малеїнової кислоти викликає захворювання шкіри псоріаз.***

2) Ретинол (вітамін А) має транс- конфігурацію. В організмі людини він ізомеризується і набуває цис- конфігурації

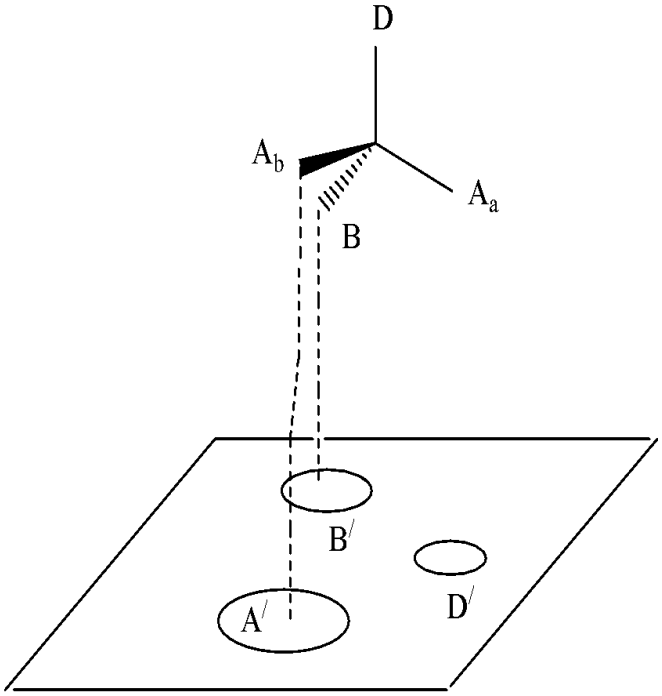


Біологічне значення просторової ізомерії

- ***В організмі людини субстрат та активні центри ферментів є оптичними антиподами, тобто вони підходять один до одного як «ключ до замка».***
- ***<u>Тільки в цьому випадку вони можуть взаємодіяти!</u>***



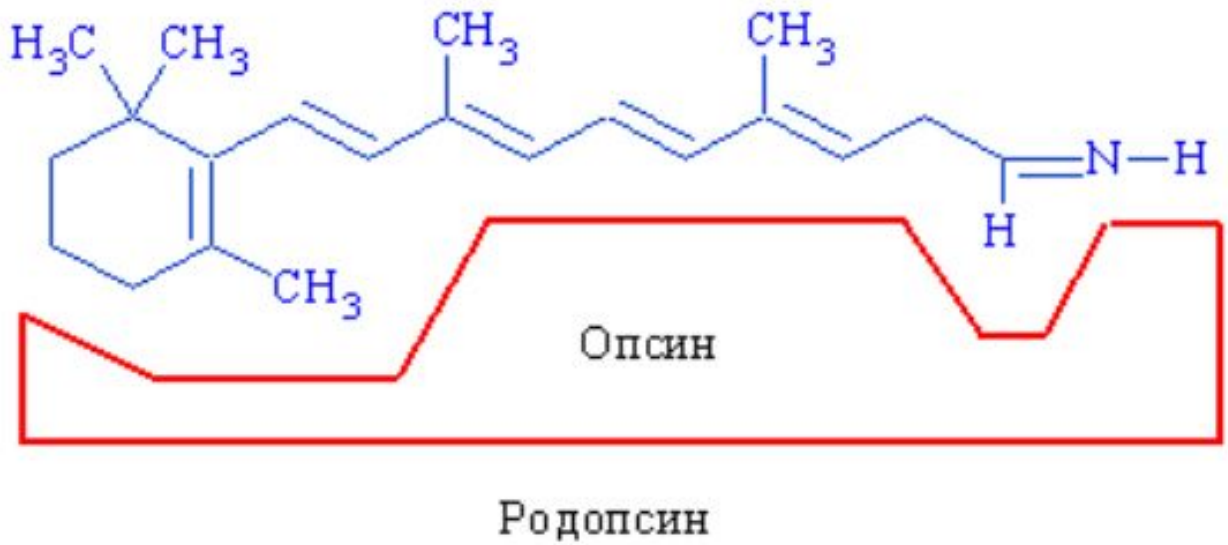
Фермент і субстрат скоординовані трьома точками



Трьохточкова взаємодія ферменту і субстрату не відбувається

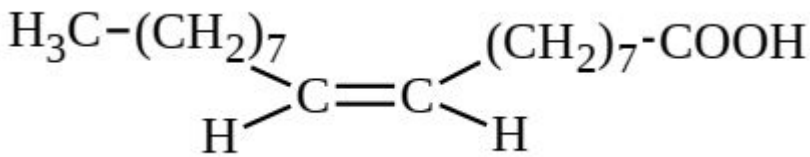
Біологічне значення просторової ізомерії

- ***Ретиналь та білок опсин є оптичними антиподами. В цьому випадку вони взаємодіють, і утворюють комплекс родопсин, який бере участь в процесі зору.***



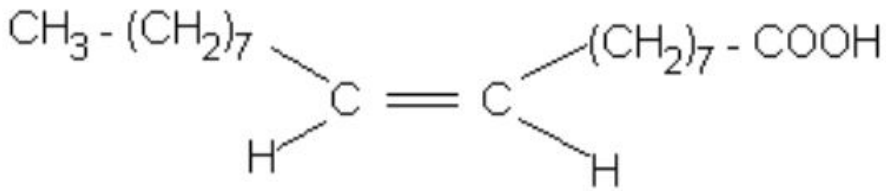
Біологічне значення просторової ізомерії

- 3) ***Вищі ненасичені жирні кислоти в складі ліпідів мають цисконфігурацію.***



Це обумовлює їх скорочений та зігнутий вигляд, що має значення для підтримки структури клітинної мембрани.

Природні сполуки поліпреноли, які транспортують вуглеводи в організмі людини, мають цис-конфігурацію



поліпреноли

Біологічне значення просторової ізомерії

- Два конденсованих ядра циклогексану утворюють декалін, який є основою багатьох біологічно активних речовин.
- Стійкішою формою декаліну є його транс-конфігурація, в якій кожне циклогексанове ядро має конформацію крісла
-

декалін

Декалінове ядро зустрічається в таких біологічно активних сполуках:
холестерин, жовчні кислоти, гормони кори надниркiв (кортікостероіди), статеві гормони (жіночі – естрадіол, естрон; чоловічі – тестостерон, андростерон

Типи хімічних реакцій

- ***Реакційний центр*** ***- атом або група атомів, які беруть участь в утворенні хімічного зв'язку.***

  Субстрат ***– сполука, молекула якої надає для утворення зв'язку атом Карбону.***

  Реагент ***– сполука, яка атакує субстрат***

- ***Механізм реакції*** ***– це сукупність та послідовність, елементарних стадій, через які проходить хімічна реакція від вихідних речовин до кінцевих продуктів.***

- ***Елементарна стадія*** ***– проміжний одиничний процес протягом хімічної реакції, який не може бути розділений на прості акти хімічної взаємодії***

Класифікація органічних реакцій

- ***Класифікація органічних реакцій за типами хімічних перетворень зв'язків***

- *Реакції дисоціації та рекомбінації*

  - $A\text{-}B \longrightarrow A^{+} + B^{-}$ $(A^{\cdot} + B^{\cdot})$

- *Реакції заміщення – S (від Substitution):*

  - $A\text{-}B + C\text{-}D \longrightarrow AD + BC$

Реакції приєднання – A (від Addition)

$$A + B \longrightarrow AB,$$

- *Реакції відщеплення – E (від Elimination):*

  - $AB \longrightarrow A^{+} + B^{-}$

- Основними типами сучасної номенклатури органічних сполук є: тривіальна, раціональна та міжнародна (IUPAC).

Тривіальна номенклатура

Перші назви, які давали органічним сполукам, найчастіше відображали способи добування речовин (пірогалол – продукт піролізу галової кислоти), їх відмінні властивості або природне джерело, з якого сполуку вперше було виділено (мурашина кислота, лимонна кислота, тощо). Такі назви складають тривіальну номенклатуру.

Раціональна номенклатура

- Головний принцип раціональної номенклатури полягає в тому, що будь який член будь якого ряду розглядається як похідне від родоначальника цього ряду. Наприклад, алкани розгалуженої будови розглядаються як похідні метану, в молекулі якого атоми Гідрогену заміщені на радикали:
- - за основу назви вибирають центральний (метановий) атом Карбону, який має найбільше замісників. Найчастіше – це третинний або четвертинний атом Карбону;
- - записують назви замісників (радикалів), сполучених з метановим Карбоном, починаючи з найменшого. Однакові радикали об' єднують пре-фіксами (ди – 2, три – 3, тетра – 4);
- - в кінці назви складного алкану додають слово метан.
- Слід відзначити, що для назв складних хімічних структур раціональна номенклатура не придатні

Міжнародна номенклатура (IUPAC).

- ***Правила сучасної номенклатури були розроблені у 1957 році на XIX конгресі Міжнародного союзу теоретичної і прикладної хімії (International Union of Pure and Applied Chemistry – IUPAC).***

Правила утворення назви органічної речовини за IUPAC номенклатурою

- 1. *Визначаємо в молекулі органічної речовини найдовший ланцюг з атомів Карбону (корінь). Якщо між атомами Карбону є кратні 7 зв'язки, то вони повинні бути у карбоновому ланцюзі. Також у карбоновому ланцюзі мають бути усі функціональні групи та замісники.*
- *2. За допомогою локантів (чисел) проводимо нумерацію карбонового ланцюга (кореня) починаючи з того кінця, де ближче знаходиться функціональна група. Якщо функціональних груп кілька і вони різні - нумерацію карбонового ланцюга починаємо з того кінця, де ближче знаходиться старша функціональна група. У разі її відсутності – де ближче знаходиться кратний зв'язок, а якщо ланцюг – насичений вуглеводень, то з того кінця, де ближче вуглеводневий радикал чи галоген.*

Правила утворення назви органічної речовини за IUPAC номенклатурою

- 3. На початку назви органічної речовини локантом (числівником) вказуємо місце в карбоновому ланцюжку вуглеводневого замісника та галогенів і функціональних груп, менших по старшинству, розміщуючи їх в алфавітному порядку (префікси). Якщо однакових замісників, галогенів чи функціональних груп, менших по старшинству, кілька, перед назвою вказуємо їх кількість префіксом: ди-(два), три-(три), тетра-(чотири), пента-(п’ять) і т. п .

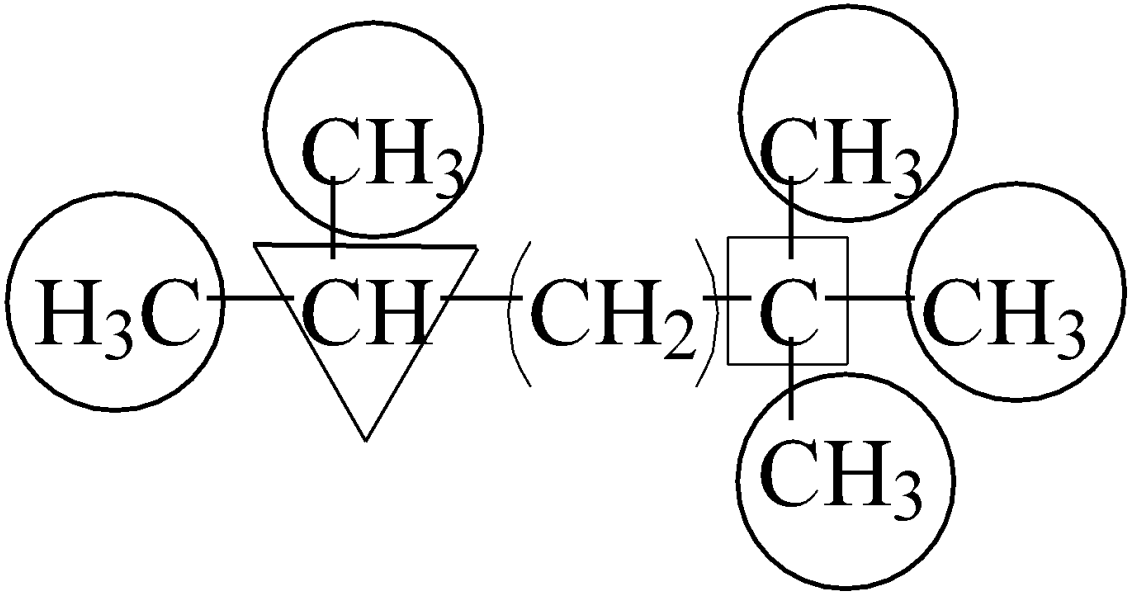
Правила утворення назви органічної речовини за IUPAC номенклатурою

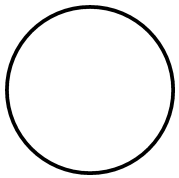
- *4. Назва карбонового ланцюга (кореня) утворюється від назви відповідного вуглеводню із суфіксом¹: -ан для насиченого ланцюга, ен (-єн) для ланцюга з подвійним зв'язком, -ин (-ін, -їн) – з потрійним. Перед суфіксом¹ локантом позначаємо номер атома Карбону, від якого починається кратний зв'язок. Якщо однакових кратних зв'язків кілька, то перед суфіксом¹ їх кількість позначаємо префіксом: ди-(два), три-(три) і т.п .*

Правила утворення назви органічної речовини за IUPAC номенклатурою

- 5. В кінці назви органічної речовини функціональну групу, яка визначає її належність до певного класу, а при наявності кількох різних функціональних груп, то старшу з них позначаємо суфіксом², перед яким локантом (числівником) позначаємо його місце в карбоновому ланцюзі. Якщо однакових функціональних груп кілька, то після локанта перед суфіксом² їх кількість позначаємо префіксом: ди-(два), три-(три) і т.п

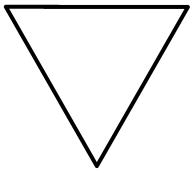
Приклади:



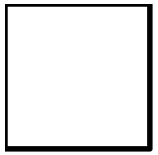


Первинний

Вторинний



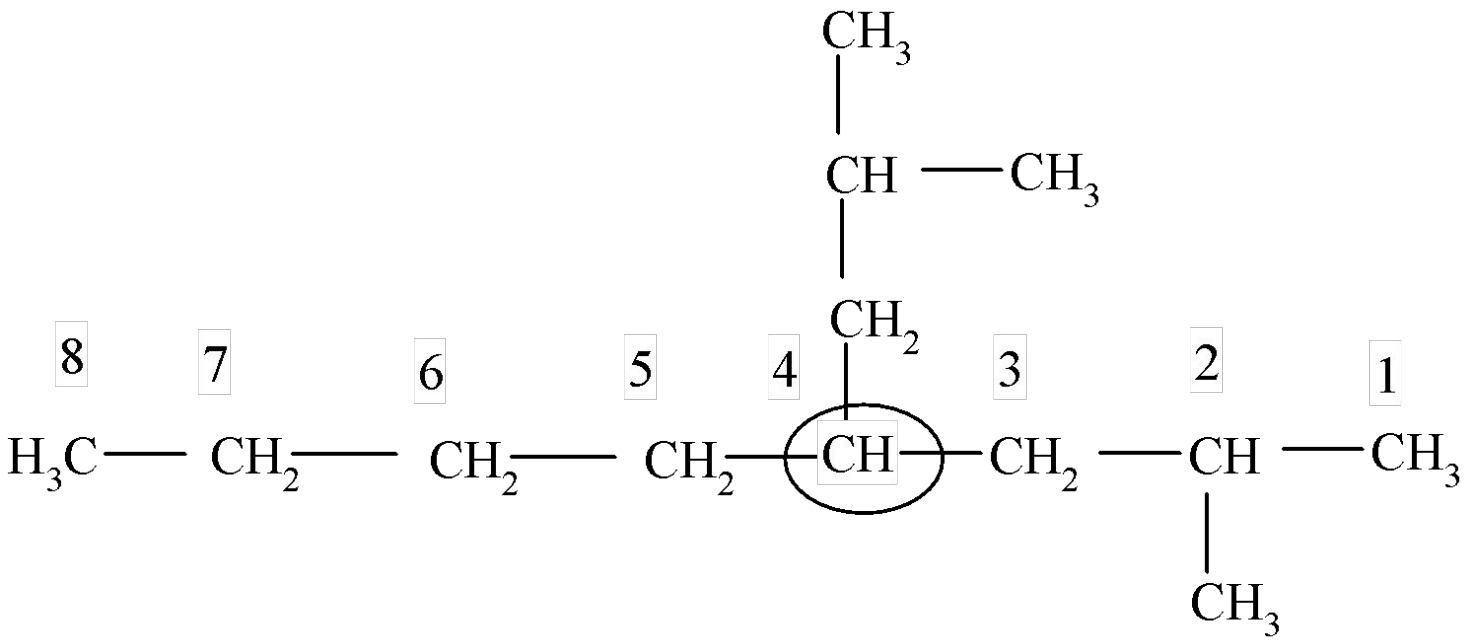
Третинний



Четвертинний

2,2,4-триметилпентан

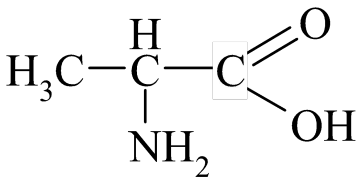
Приклади:



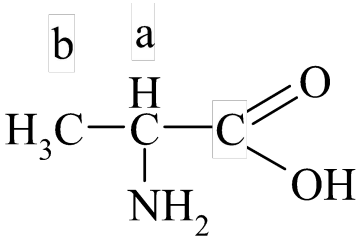
за раціональною номенклатурою –бутилдіізобутилметан

за ІЮПАК – 4-ізобутил-2-метилоктан

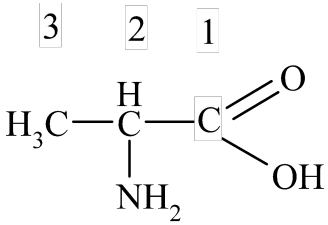
У випадку наявності в сполуці декількох функціональних груп, то саме старша функціональна група визначає приналежність до класу, а замісники позначають літерами грецького алфавіту α, β, γ, δ і т. д., причому літерою α позначається перший атом від функціональної групи, а для назви родоначальної структури використовують тривіальну назву:



аланін (тривіальна назва)



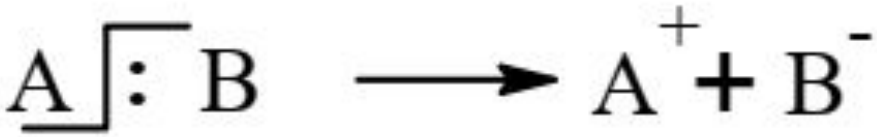
α-амінопропіонова кислота (радикально-функціональна)



2-амінопропанова кислота (замісникова ІЮПАК)

Класифікація органічних реакцій за типами розриву зв’язку

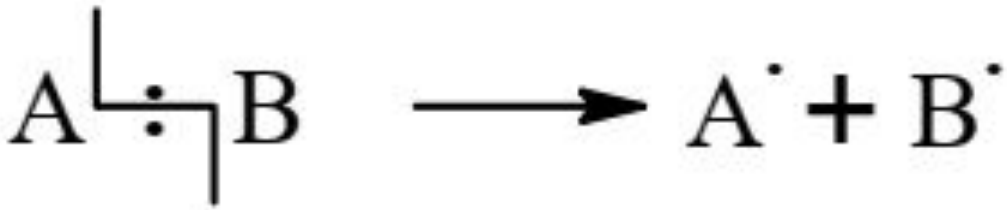
- При **гетеролітичному розриві** зв’язку (гетеролізі) обидва електрони зв’язку залишаються на одному з фрагментів, який набуває негативного заряду, тоді як інший фрагмент набуває позитивного заряду і має вільну орбіталь.



Класифікація органічних реакцій

- ***Класифікація органічних реакцій за типами розриву зв'язку***

При гомолітичному розриві зв'язку (гомолізі) утворюються частинки однакові за електронною будовою – вільні рпдикали.



Класифікація органічних реакцій

- ***Класифікація органічних реакцій за типами реагентів***

- ***Нуклеофільні реакції*** ***– це реакції, в яких реагентами виступають нуклеофіли (ті, що люблять ядро) – частинки або молекули з електронодонорними властивостями. Вони мають хоча б одну неподілену пару електронів і віддають її для утворення ковалентного зв' язку атому, з яким вони вступають в реакцію.***
- ***Електрофільні реакції*** ***– це реакції, в яких реагентами виступають електрофіли (ті, що люблять електрони) – частинки або молекули з електроакцепторними властивостями, які здатні утворювати ковалентний зв' язок за допомогою своєї вакантної орбіталі або внаслідок високої спорідненості до електрона.***

- ***Нуклеофіл*** ***– частинка, що в хімічній реакції виступає донором електронної пари.***
- ***Електрофіл*** ***– частинка, що в хімічній реакції виступає акцептором електронної пари.***
- ***Нуклеофуг*** ***– група, що відходить при реакції нуклеофільного заміщення.***
  Карбокатіон ***– частинка, що хоча б у одній з резонансних форм із суттєвим вкладом має формальний позитивний заряд на атомі карбону.***
  Електронодонори ***– замісники, які збільшують електронну густину в системі.***
  Електроноакцептори ***– замісники, які зменшують електронну густину в системі.***

Реакційна здатність алканів

Загальна формула алканів:

CnH2n+2

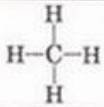
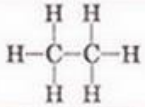
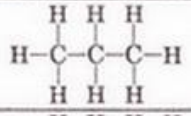
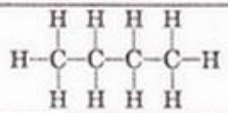
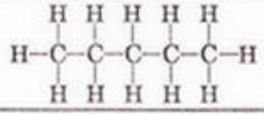
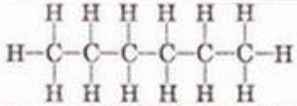
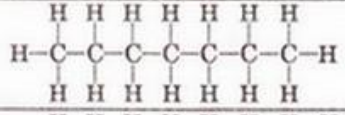
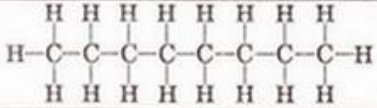
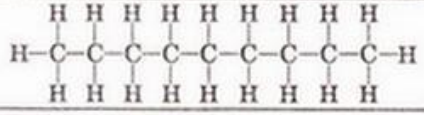
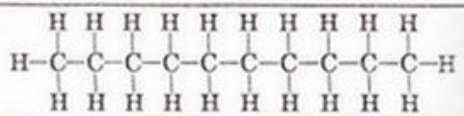
Для алканів характерні два типи хімічних реакцій:

1) заміщення Гідрогену, в основному за радикальним механізмом;

2) розщеплення молекули за зв"язками С–С або С–Н.

3) горіння

Гомологи метану

Назва	Молекулярна формула	Повна структурна формула
Метан	CH_4	
Етан	C_2H_6	
Пропан	C_3H_8	
Бутан	C_4H_{10}	
Пентан	C_5H_{12}	
Гексан	C_6H_{14}	
Гептан	C_7H_{16}	
Октан	C_8H_{18}	
Нонан	C_9H_{20}	
Декан	$C_{10}H_{22}$	

Реакції заміщення

Галогенування (Механізм реакції)

Ініціювання

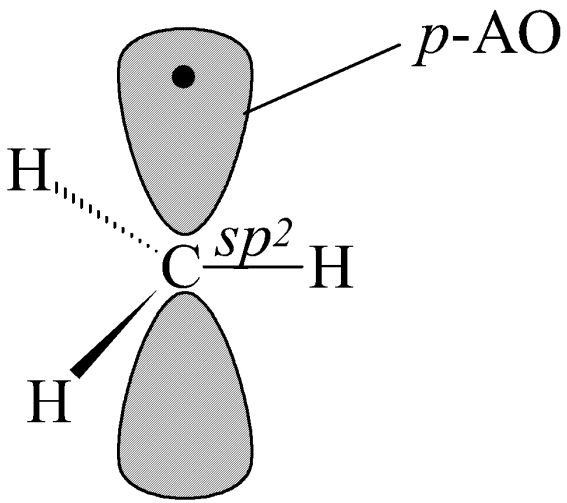
$$Cl : Cl \xrightarrow{h\nu} 2Cl\bullet$$

Ріст ланцюга

$$H_3C : H + \bullet Cl \longrightarrow H_3C\bullet + H : Cl$$

$$H_3C\bullet + Cl : Cl \longrightarrow H_3C : Cl + Cl\bullet$$

хлорметан



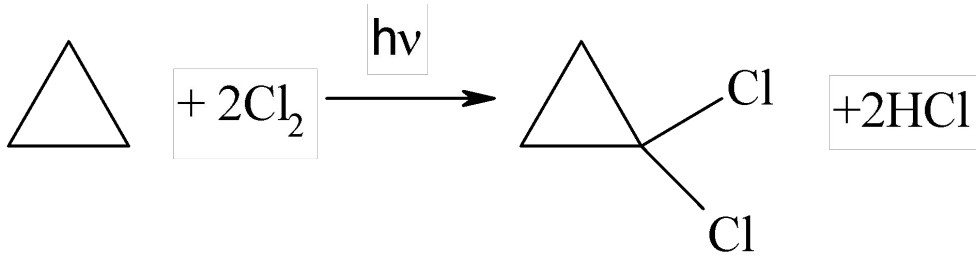
Обрив ланцюга

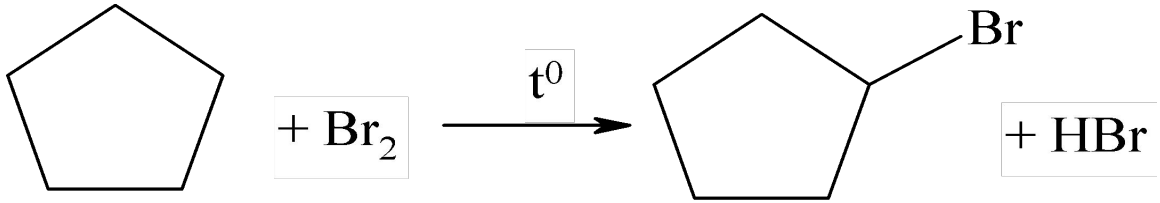
$$Cl\bullet + \bullet Cl \longrightarrow Cl_2$$

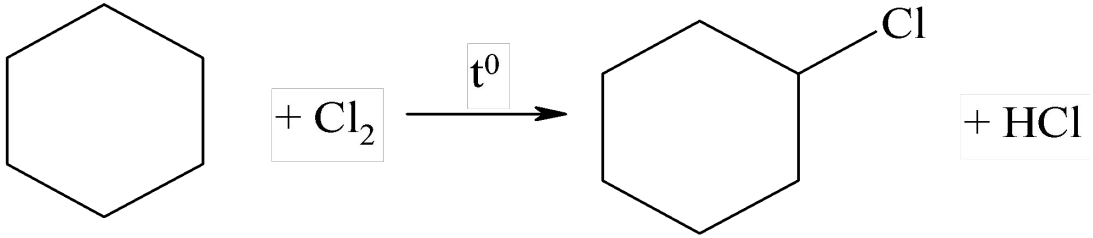
$$Cl\bullet + \bullet CH_3 \longrightarrow CH_3Cl$$

$$\bullet CH_3 + \bullet CH_3 \longrightarrow CH_3CH_3$$

Реакції заміщення







Реакційна здатність алкенів

Загальна формула алканів:

- ***CnH2n***

Для алкенів характерні типи хімічних реакцій:

1) Реакції приєднання;

2) Реакції окиснення

3) Реакції заміщення

4) Полімерізації

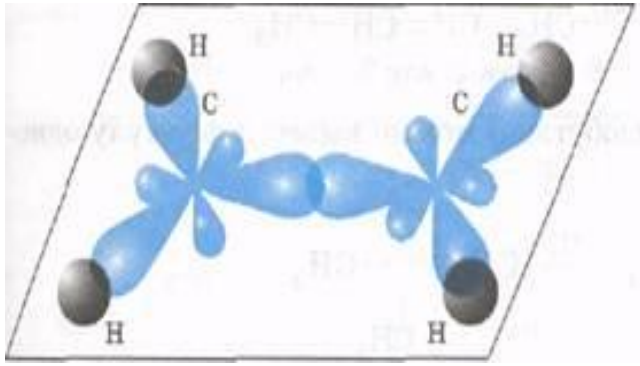
Ñòðóêòóðí à ôî ðì óëà	Í î ì åí êëàòóðà		Ñêåëåòí à ôî ðì óëà
	²Þ Ï ÀÊ	Òðèâ³àëüí à	
$ÑH_2=CH_2$	Åòåí	Åòèëåí	
$ÑH_3-CH=CH_2$	Ï ðî ï åí	Ï ðî ï ³åí	
$CH_3-CH_2-CH=CH_2$	1-Áóòåí	α-Áóòèëåí	
$CH_3-CH=CH-CH_3$	2-Áóòåí	β-Áóòèëåí	öèñ, òðàí ñ-
$CH_3-C(CH_3)=CH_2$	2-Ì åòèëï ðî ï åí	²çî áóòèëåí	
$CH_3-CH_2-CH_2-CH=CH_2$	1-Ï åí òåí	α-Àì ³åí	
$CH_3-CH_2=CH-CH_3$	2-Ï åí òåí	β-Àì ³åí	öèñ, òðàí ñ-
$CH_3-CH-C(CH_3)=CH_2$	2-Ì åòèë-1-áóòåí	Í åñèì . ì åòèëåòèëåòèëåí	
$CH_3-CH(CH_3)-CH=CH_2$	3-Ì åòèë-1-áóòåí	α -²çî àì ³åí	
$CH_3-C(CH_3)=CH-CH_3$	2-Ì åòèë-2-áóòåí	β-²çî àì ³åí	

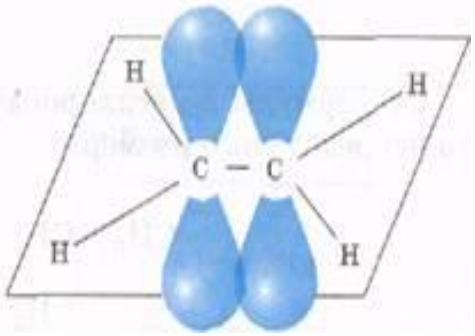
Будова етену

σ - зв'язки

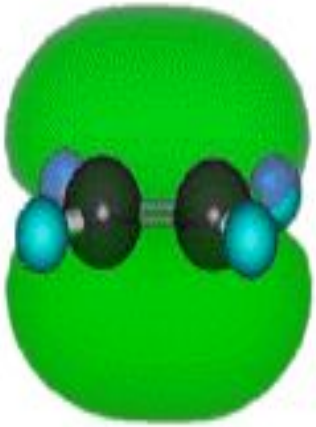
$CH_2 = CH_2$

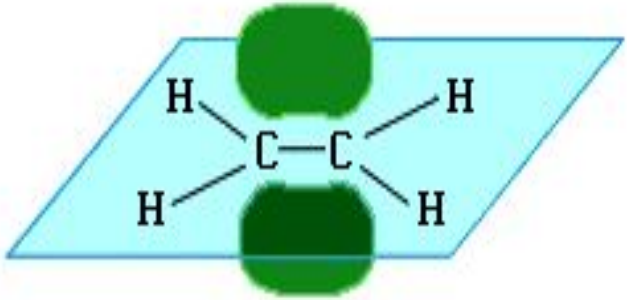
етен

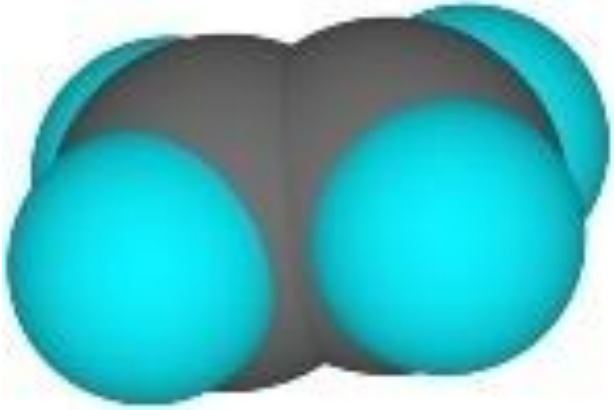




π - зв'язок

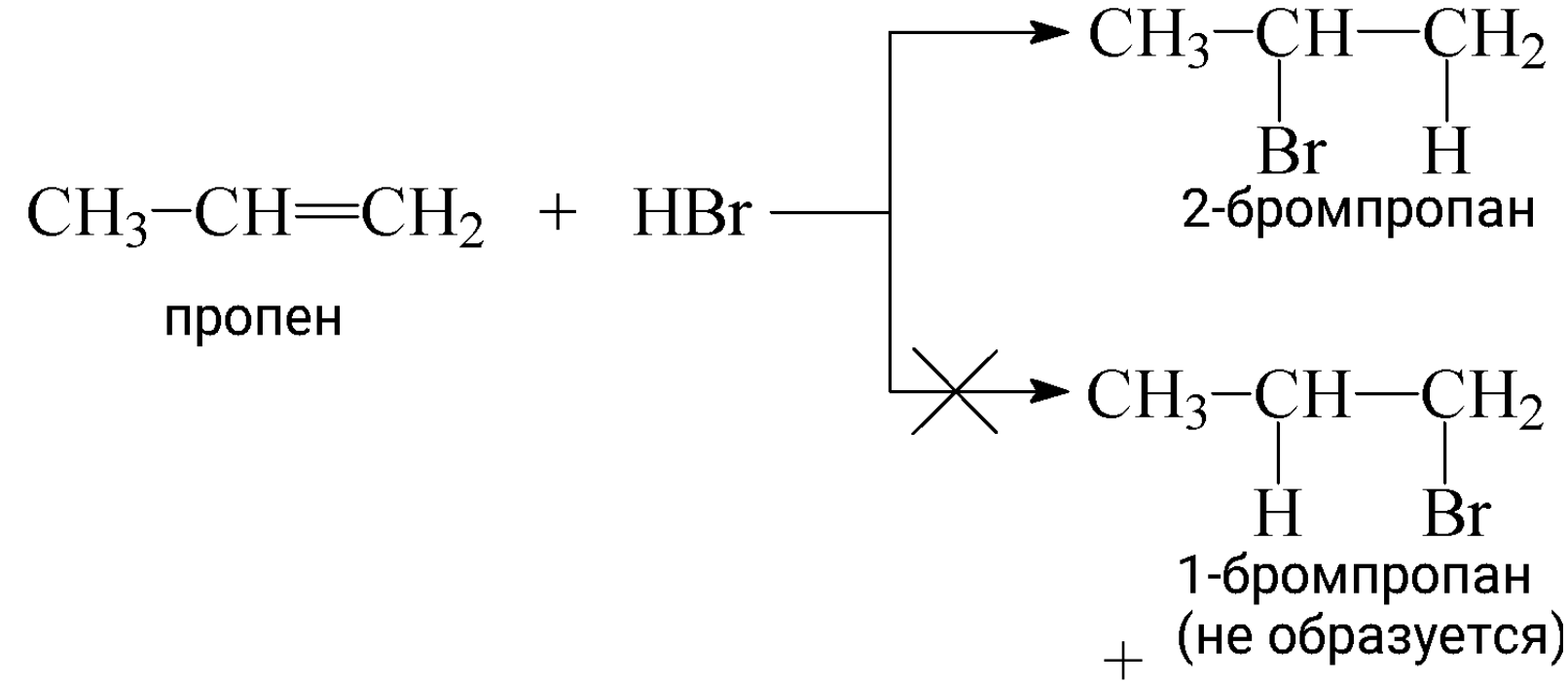


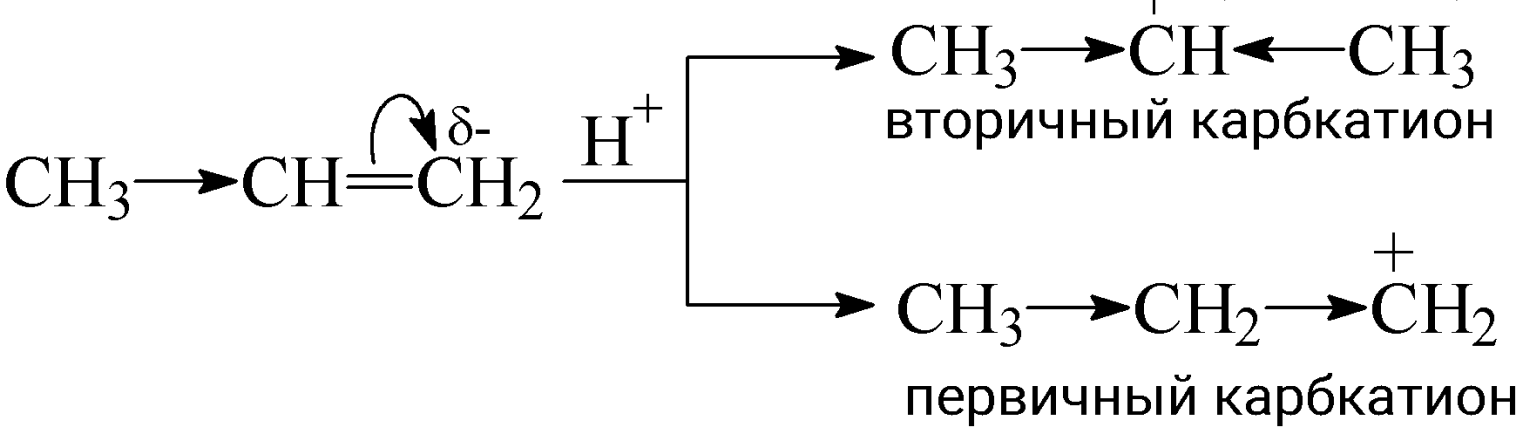




Масштабна модель молекули

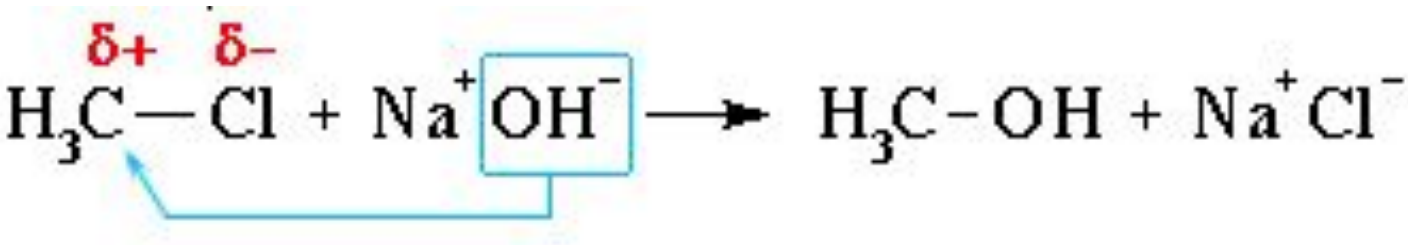
Реакції електрофільного приєднання. Правило Марковникова



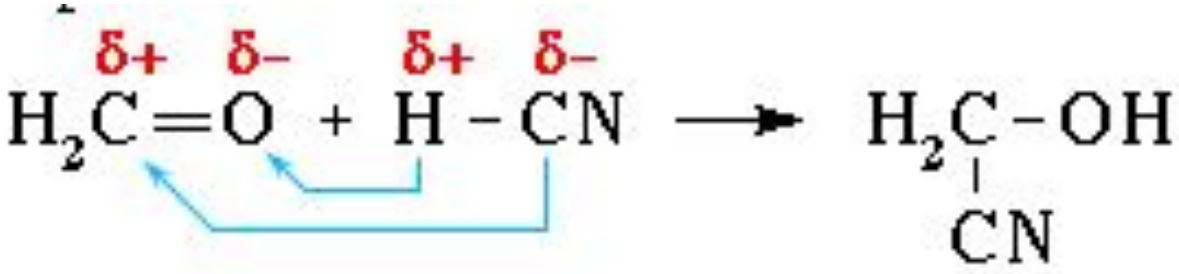


Приклад нуклеофільних реакцій

- Нуклеофільне заміщення:

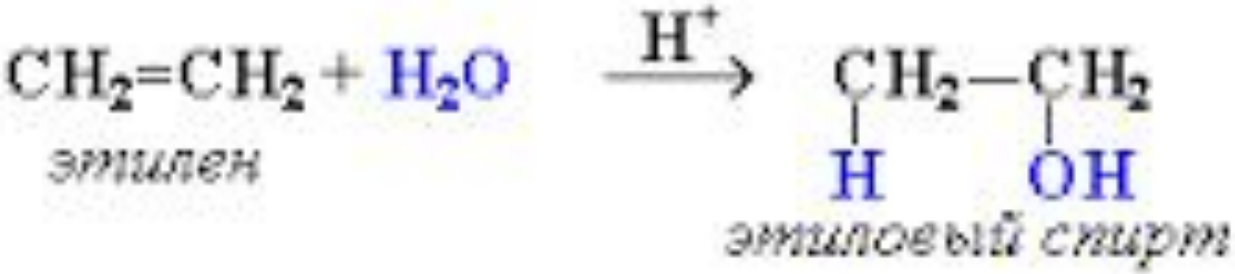


- Нуклеофільне приєднання:

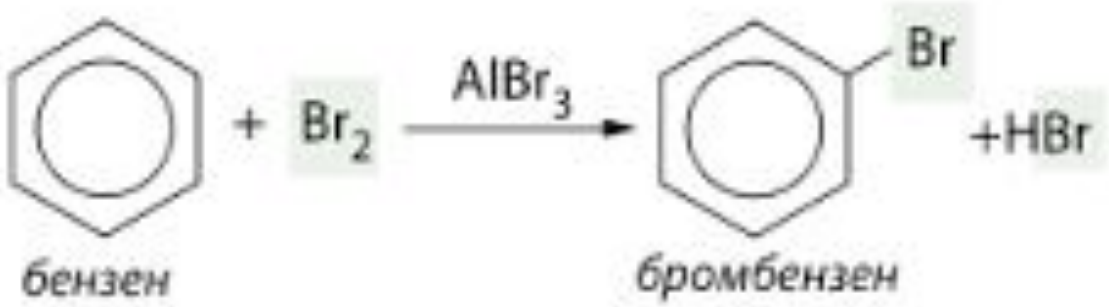


<u>Електрофіли (</u>ті, що «люблять електрони»**<u>)</u>** – це частинки (катіони або молекули), які мають вільну орбіталь на зовнішньому енергетичному рівні

- Реакція електрофільного приєднання



- Реакція електрофільного заміщення



Дякую за увагу!