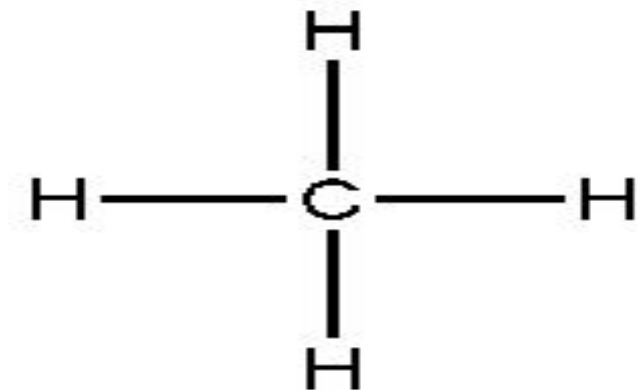


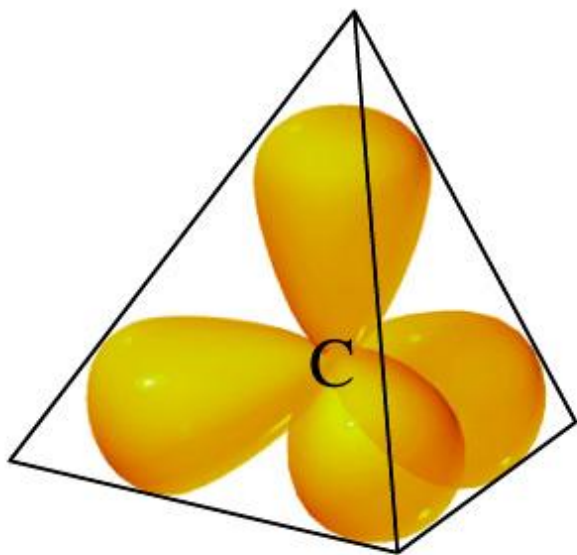
***Электронное и
пространственное
строение молекул
органических
соединений – основа
биологической
активности***

Химическое строение
молекулы определяется
природой и
последовательностью
химических связей атомов в
молекуле.

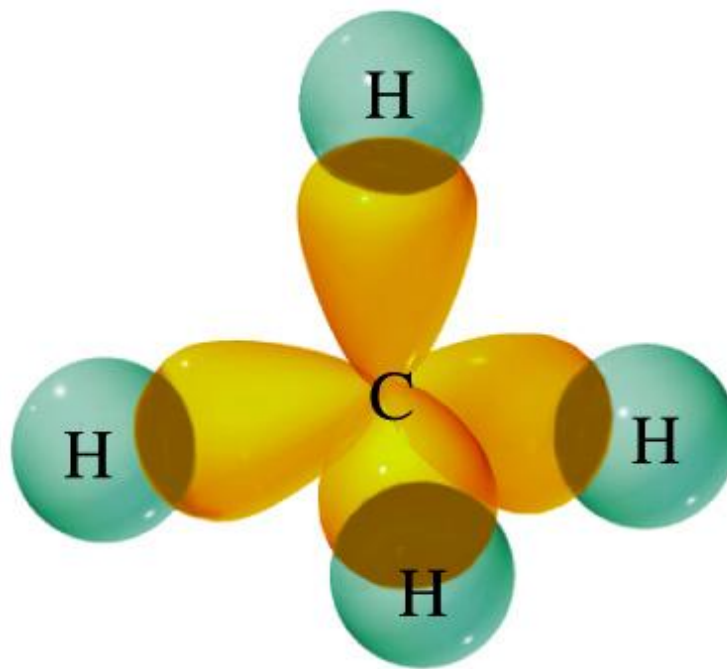


Структурная формула

- **Конфигурация** –
пространственное расположение
атомов или атомных групп.



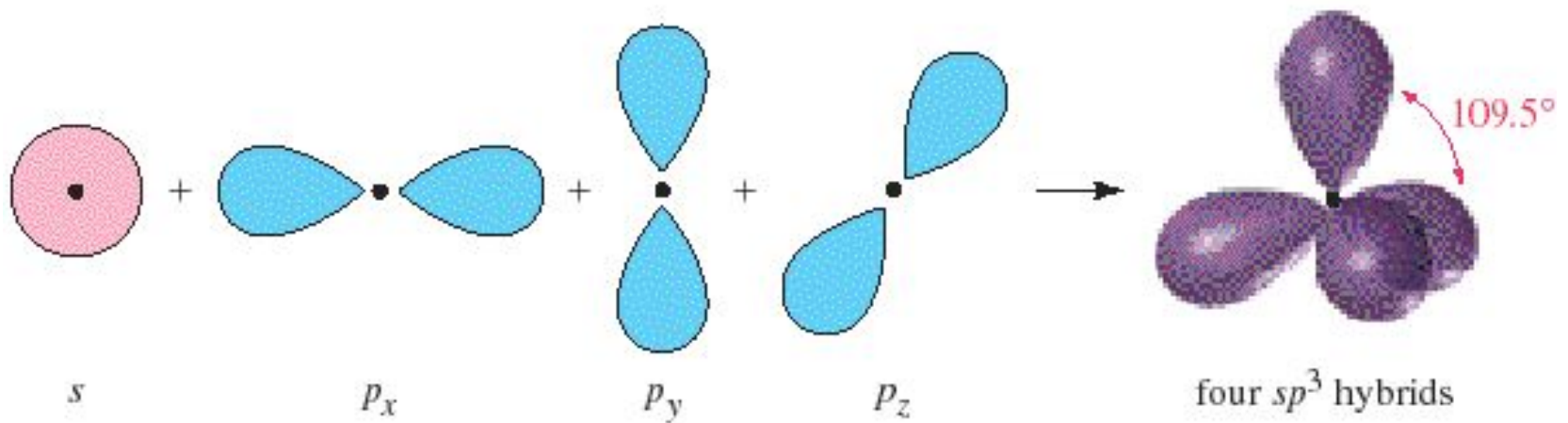
(a)



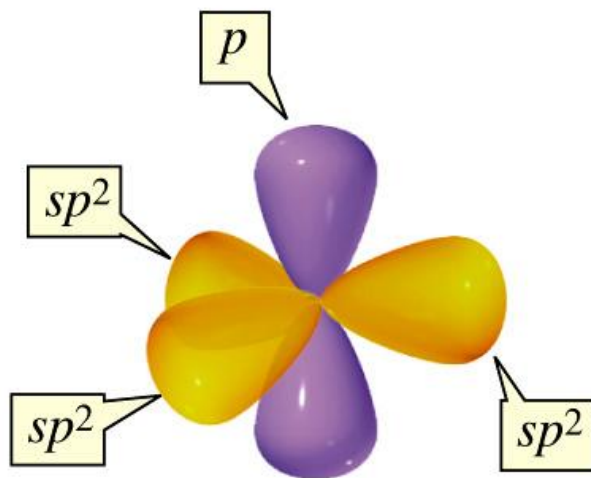
(b)

Гибридизация атомов

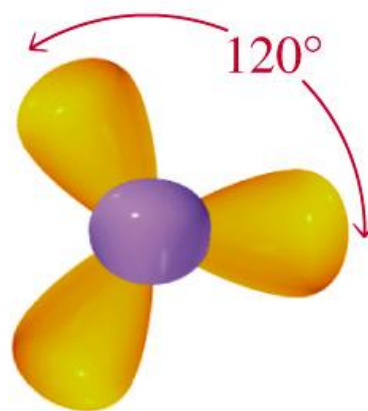
УГЛЕРОДА



sp^2 гибридизация



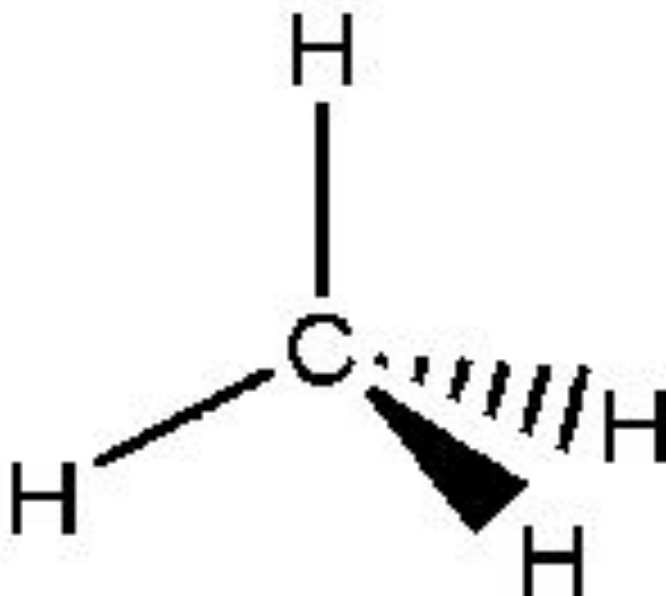
side view



top view

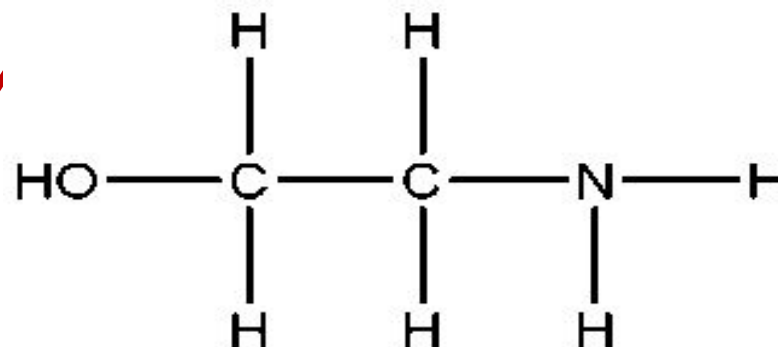
Стереохимическая формула

- Конфигурация молекулы метана



2 – аминокэтанол-1

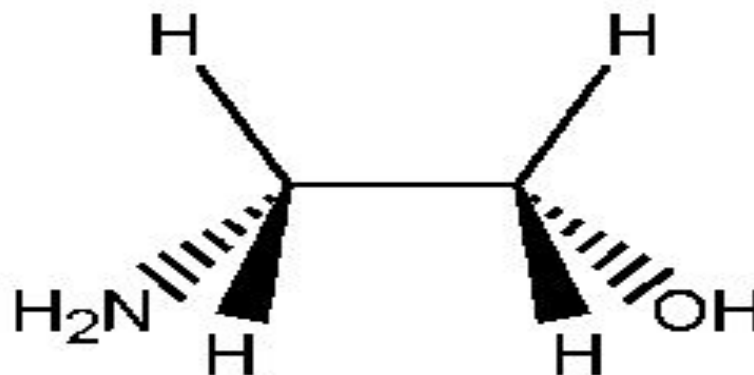
- Химическое строение



Структурная

формула

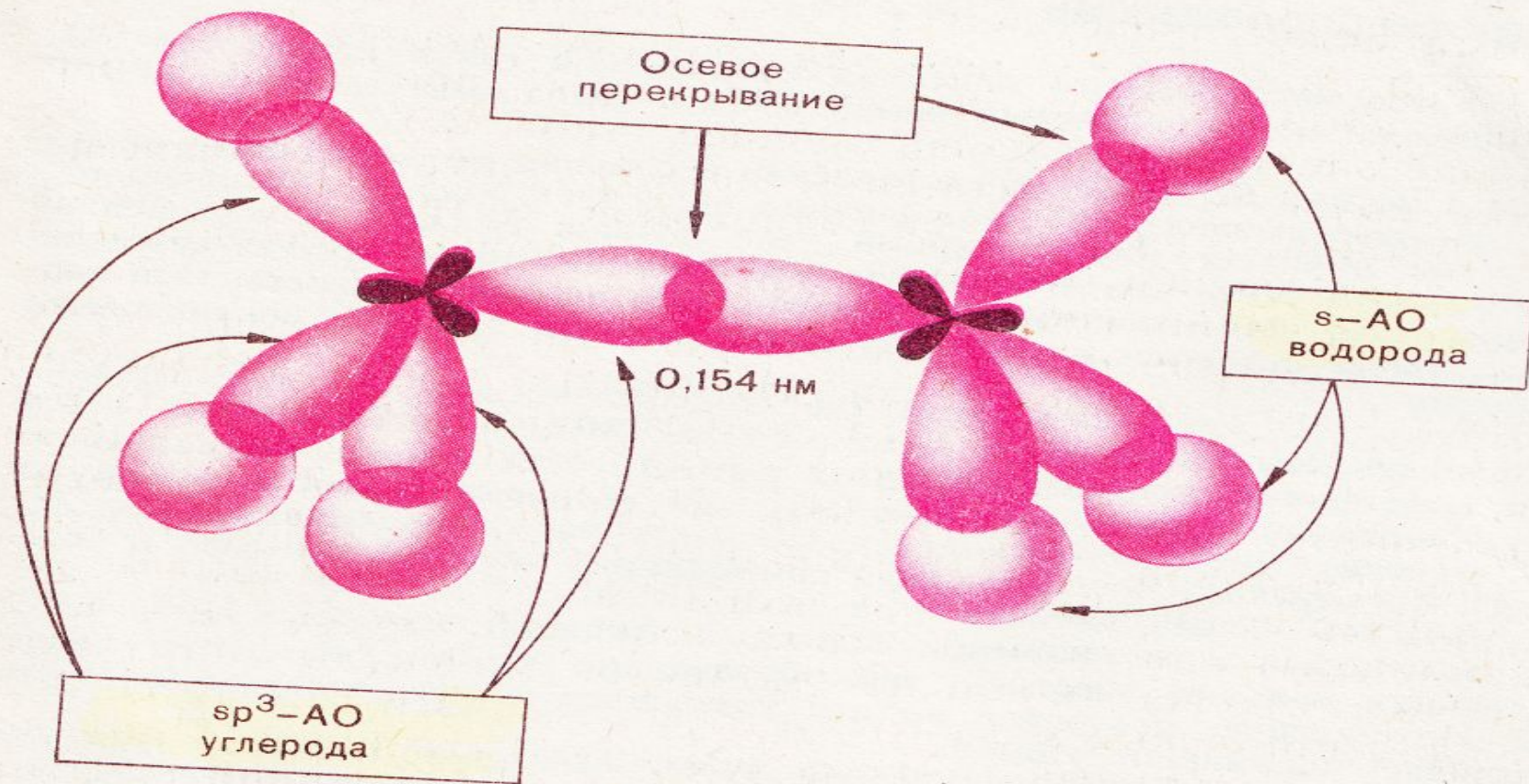
Конфигурация

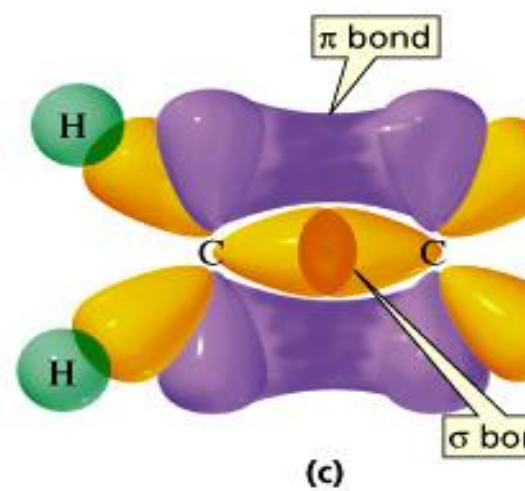
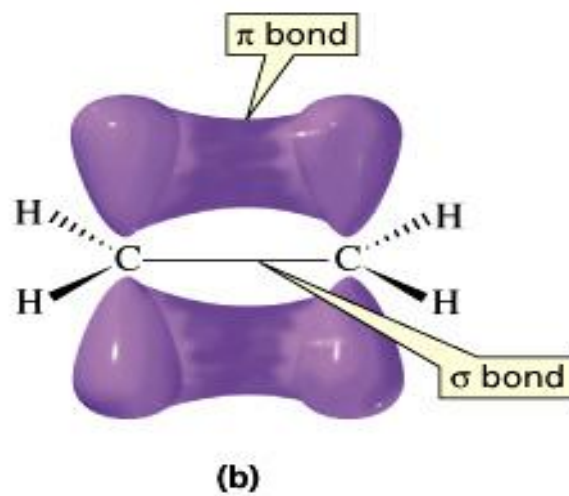
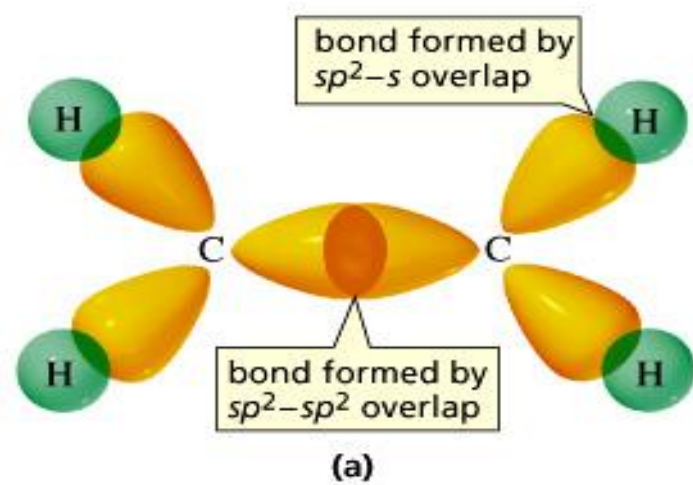


Сtereoхимическая

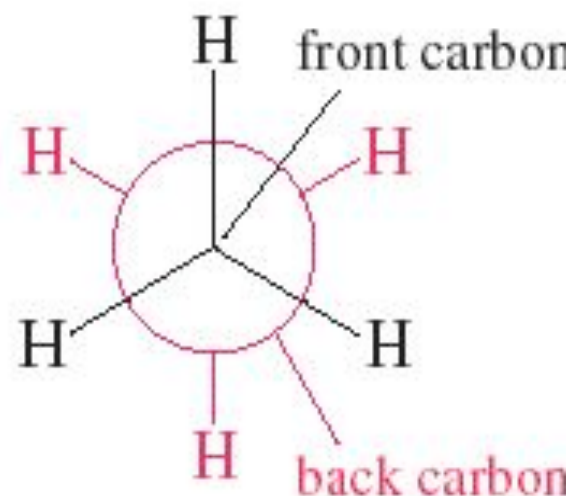
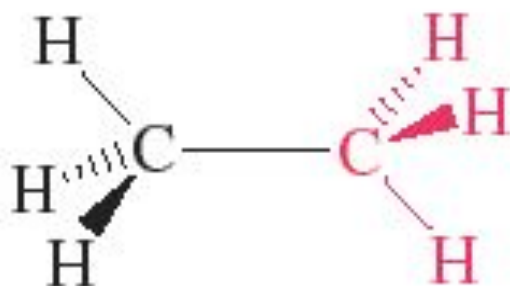
формула

Конформации различных геометрические формы молекулы, возникающие в результате вращения вокруг одинарных связей





Проекции Ньюмена

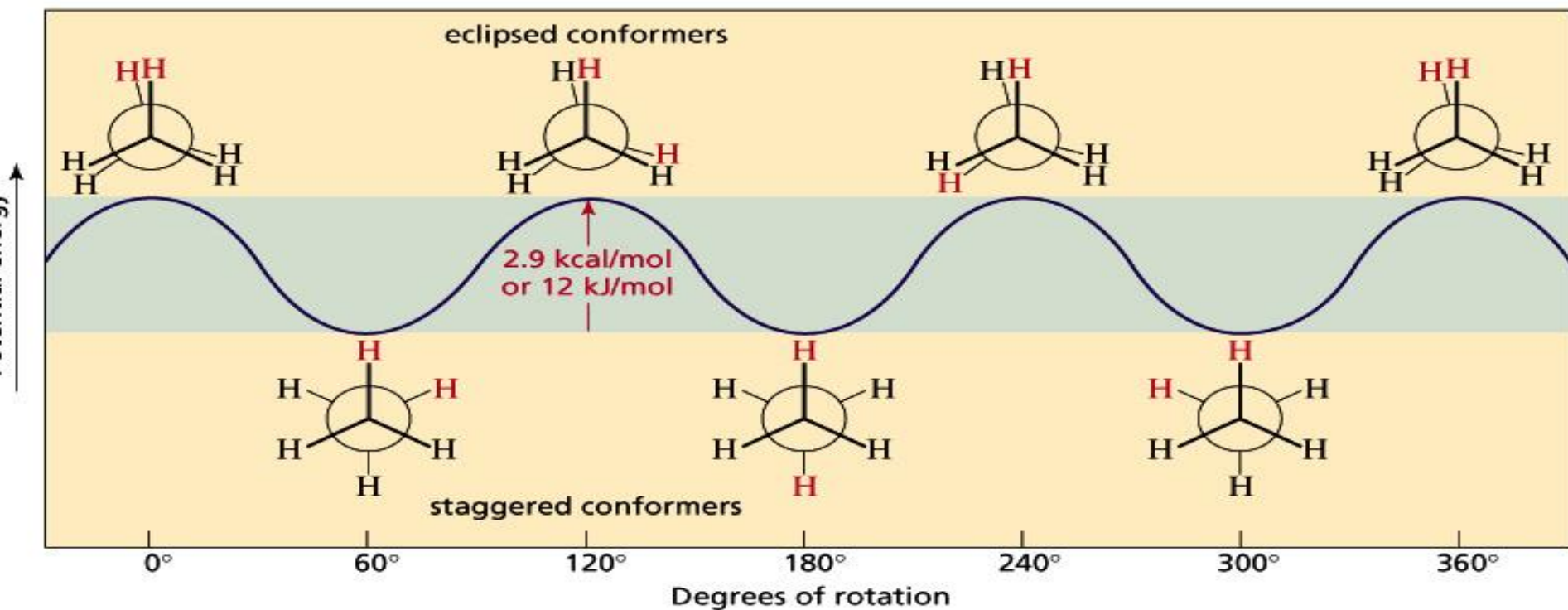


viewed from the end

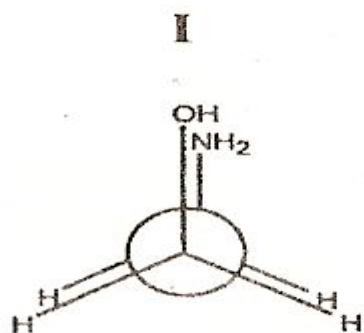
perspective drawing

Newman projection

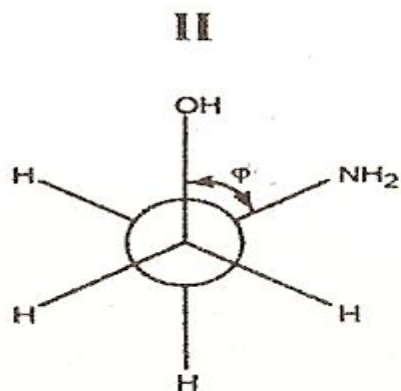
Конформации молекулы этана



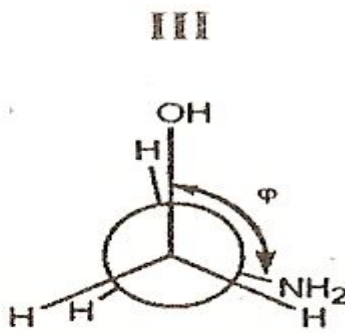
Конформации коламина



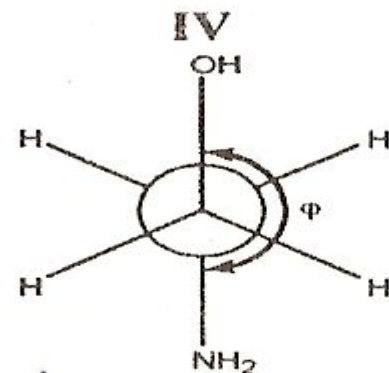
заслоненная
($E_{\max}$, $\varphi = 0^\circ$)



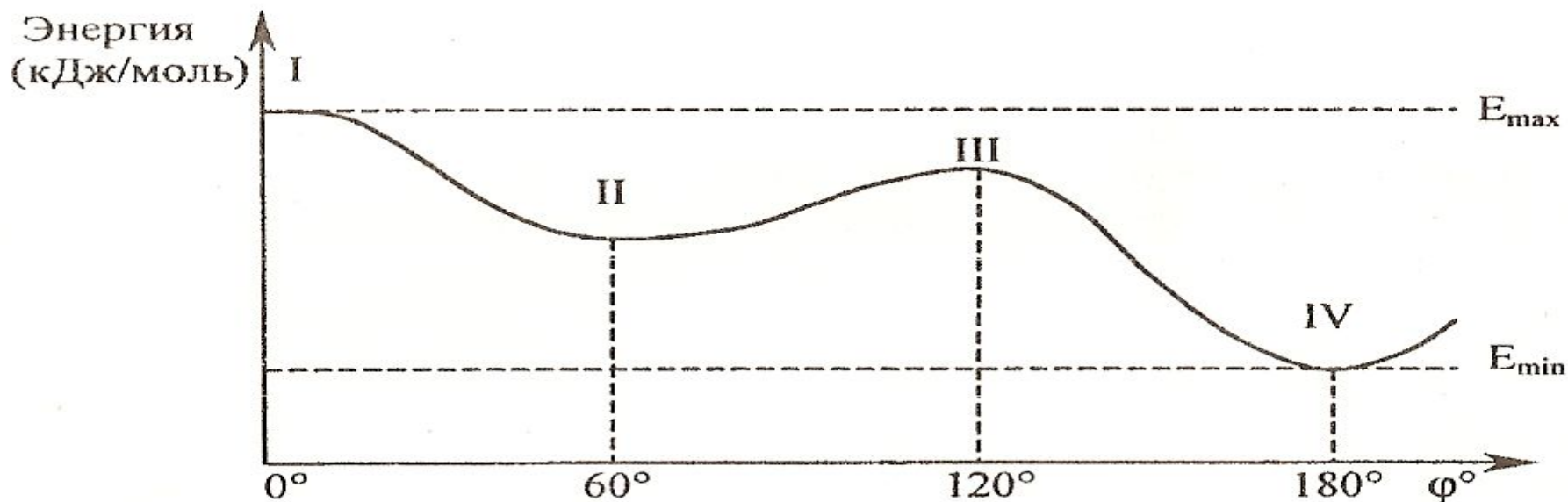
скошенная
(гош-)
($\varphi = 60^\circ$)



заслоненная
($\varphi = 120^\circ$)



заторможенная
(анти-)
($E_{\min}$, $\varphi = 180^\circ$)

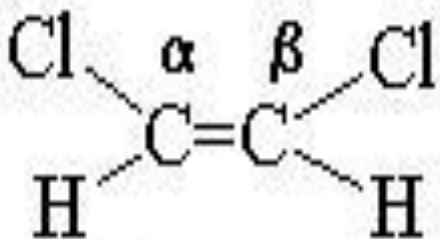




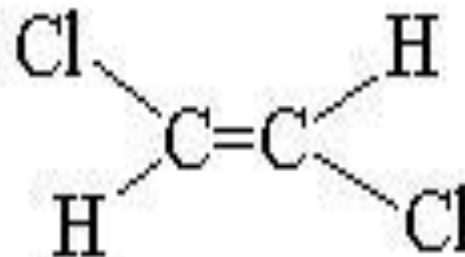
Структурная изомерия

- углеродной цепи
(бутан , изобутан)
- положения кратных связей
(бутен-1,бутен- 2)
- положения функциональных групп
(пропанол-1, пропанол-2)
- межклассовая изомерия
(гексан, циклогексан)

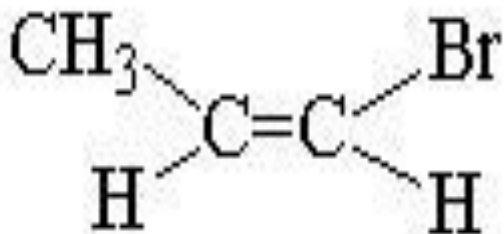
Конфигурационная изомерия



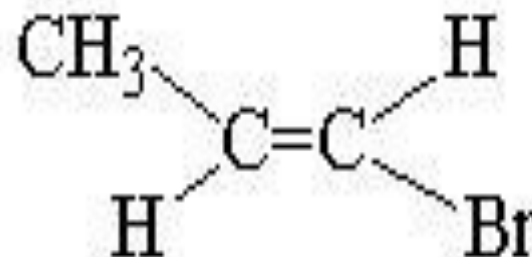
цис-1,2-дихлорэтилен



транс-1,2-дихлорэтилен



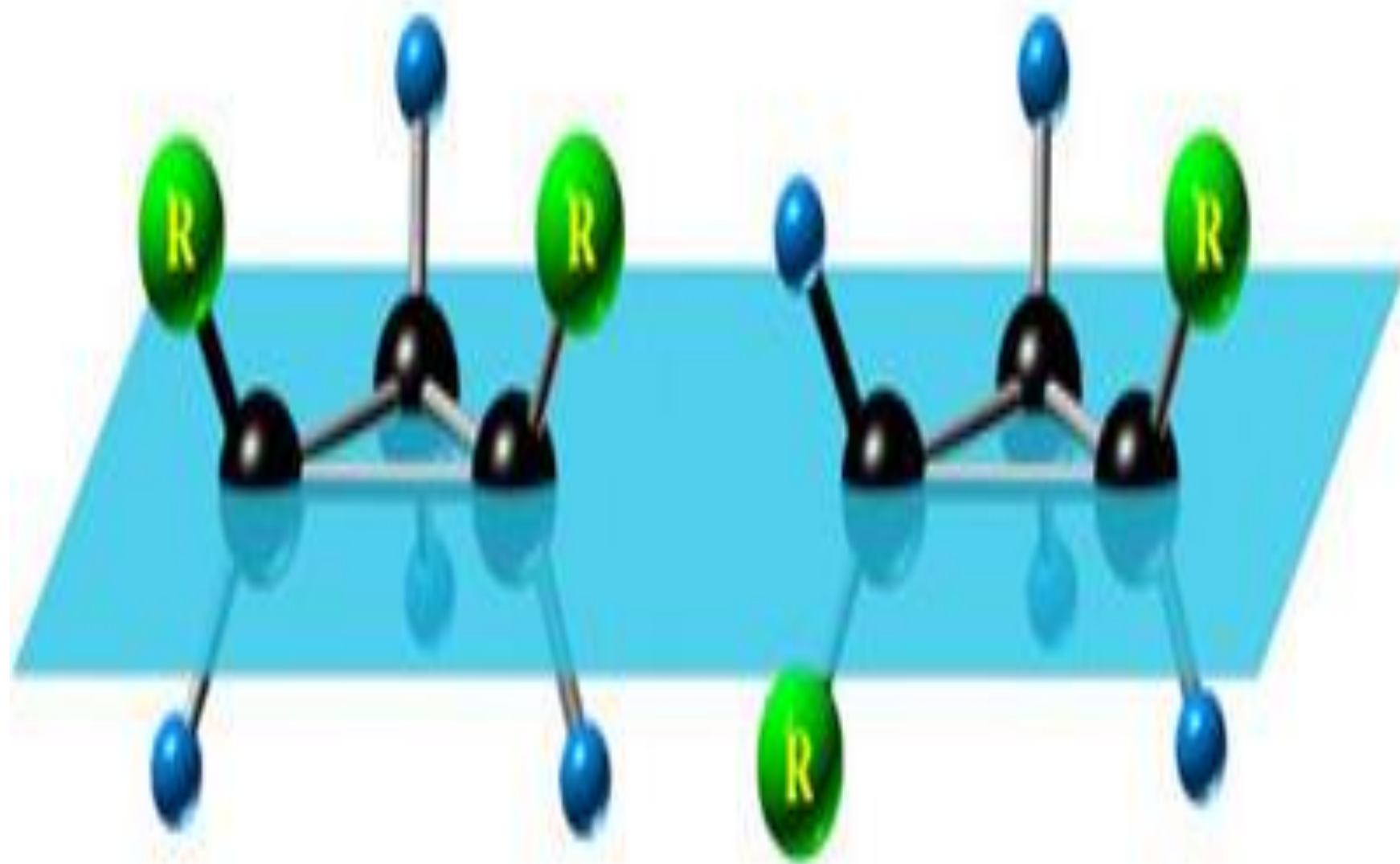
цис-1-бромпропен



транс-1-бромпропен

ЦИС-

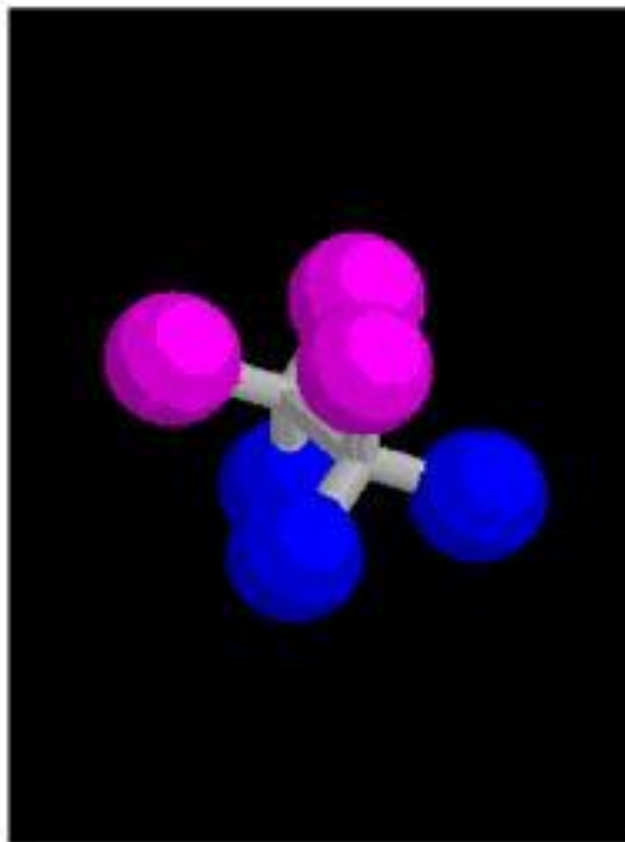
ТРАНС-



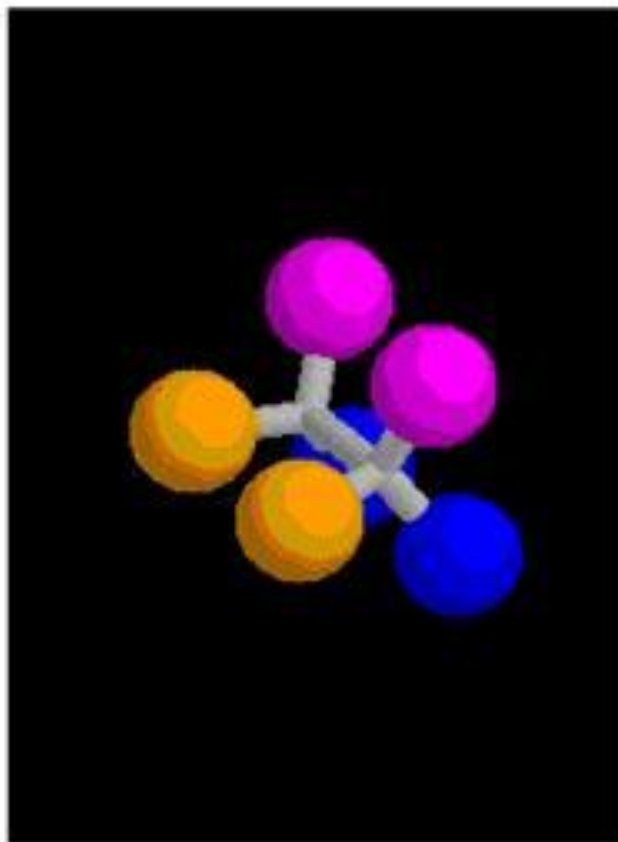
Конформационная изомерия

Конформации этана

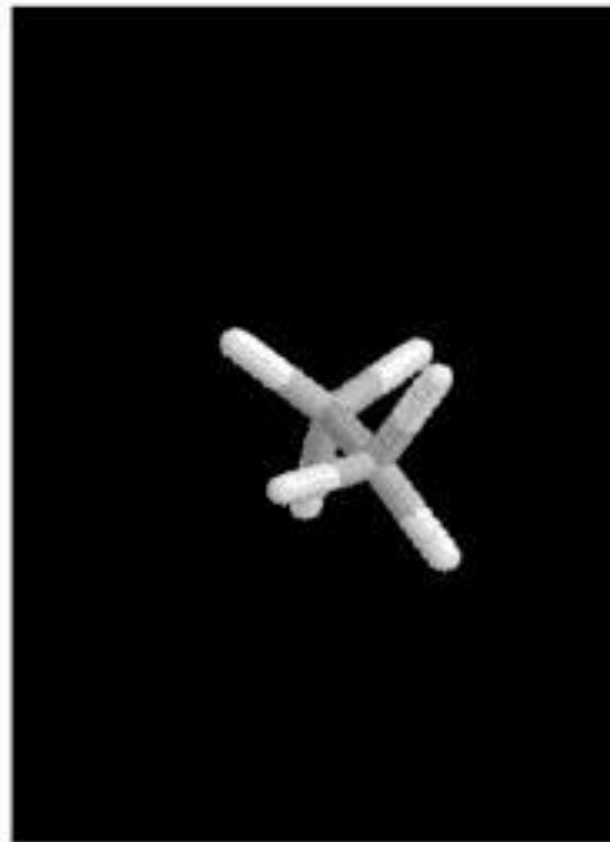
Заторможенная
конформация



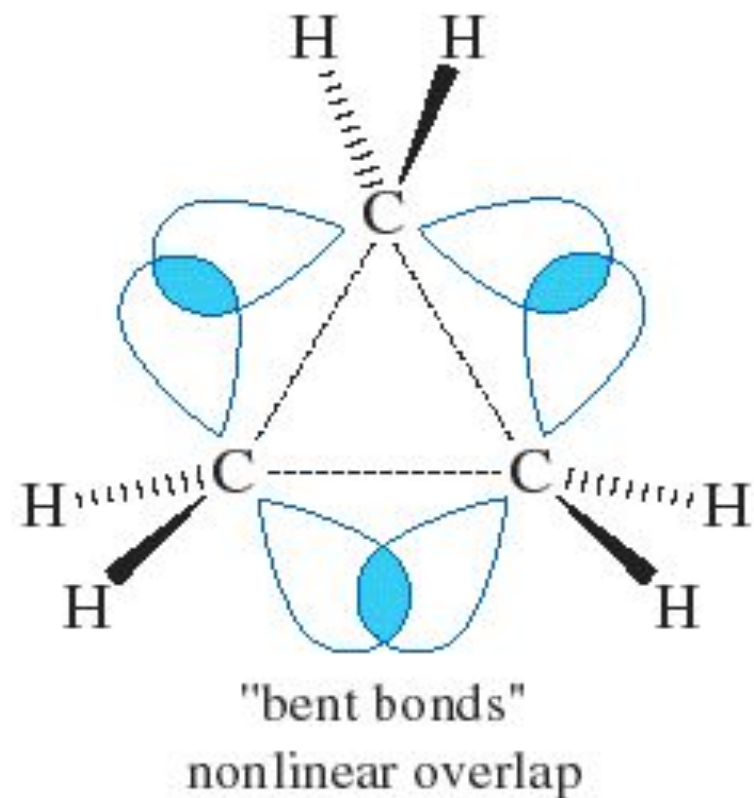
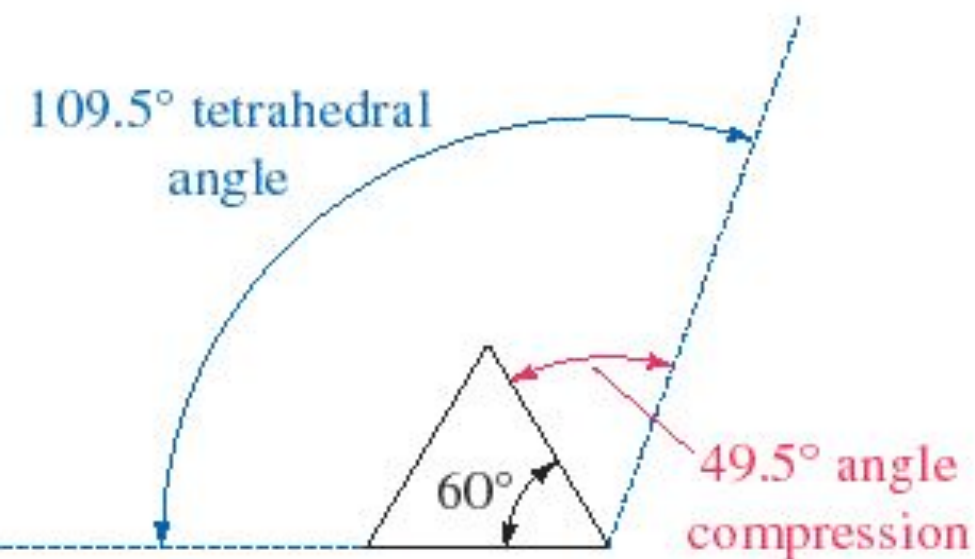
Заслоненная
конформация



Вращение вокруг
связи C-C



Циклические молекулы

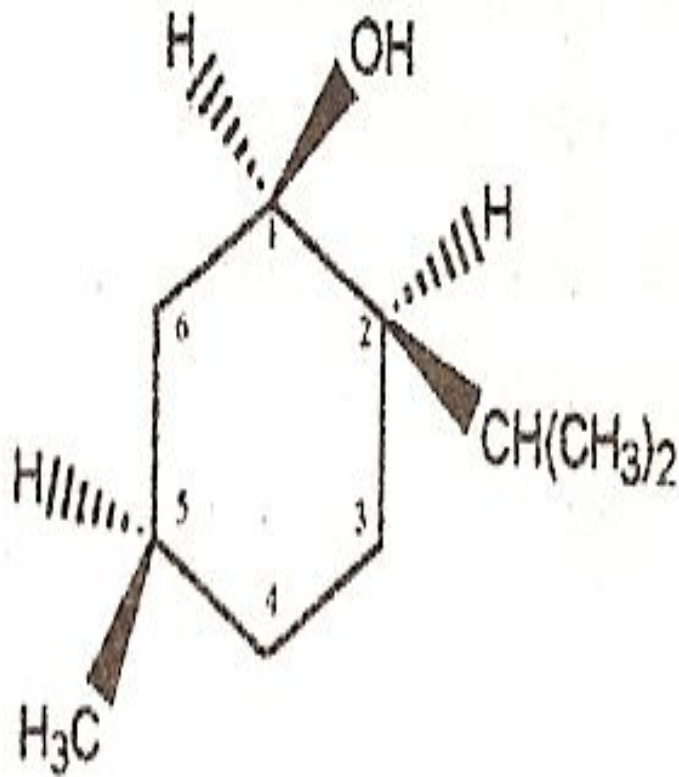


Конфигурация замещенных атомов углерода

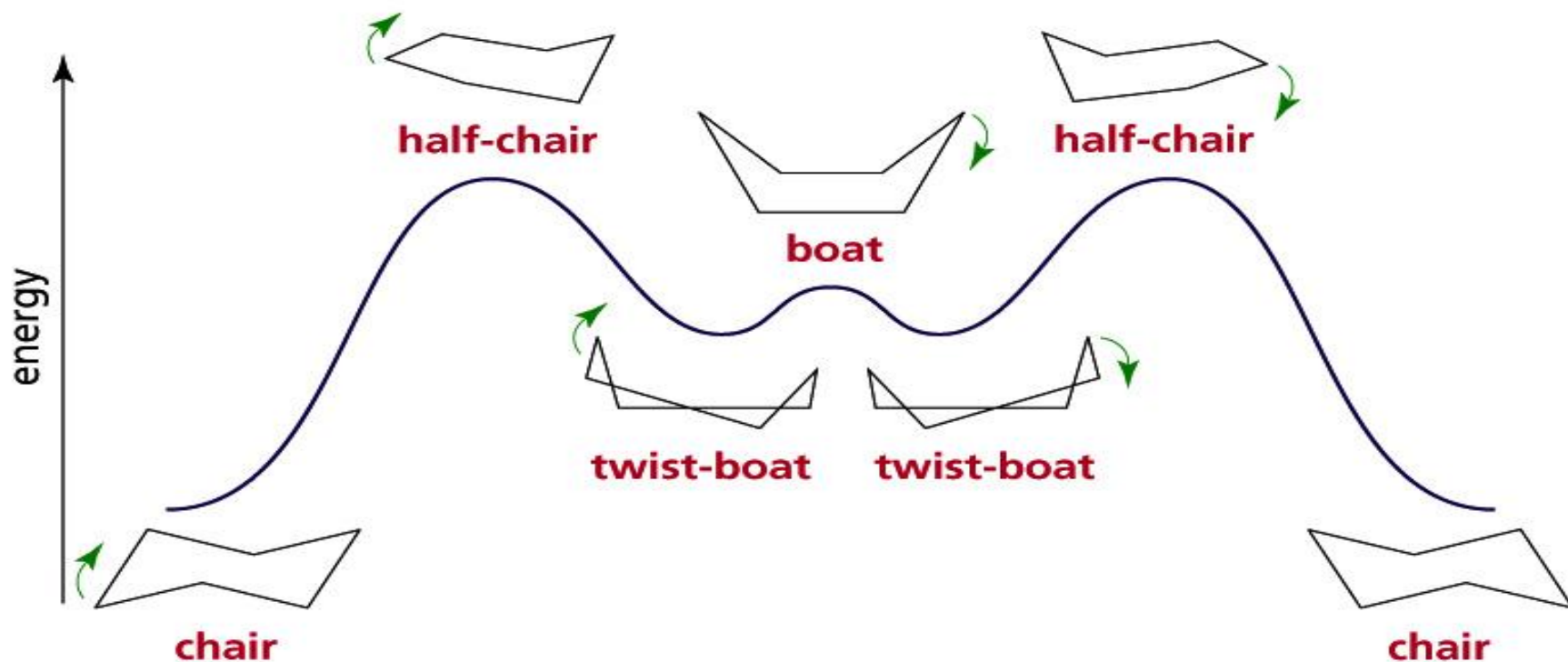
(2-изопропил-5-метил-циклогексанолю)

Угловое напряжение – увеличение энергии молекулы, вызванное отклонением валентных углов в цикле от величины 109° 28'

Торсионное напряжение – увеличение энергии молекулы, вызванное заслоненным положением σ -связей

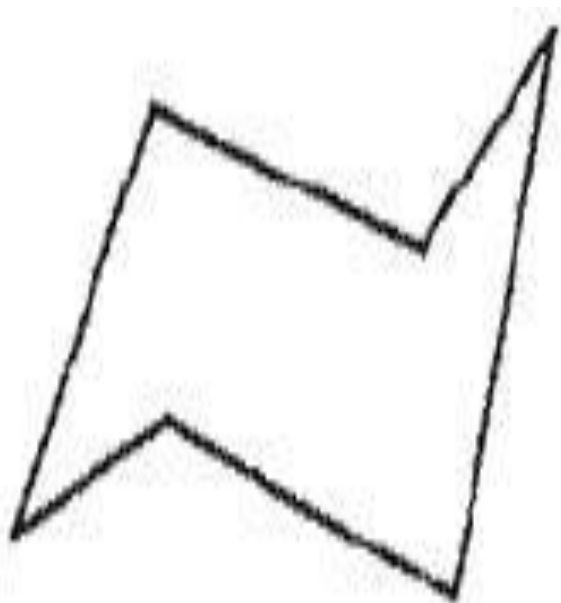


Конформации циклогексана

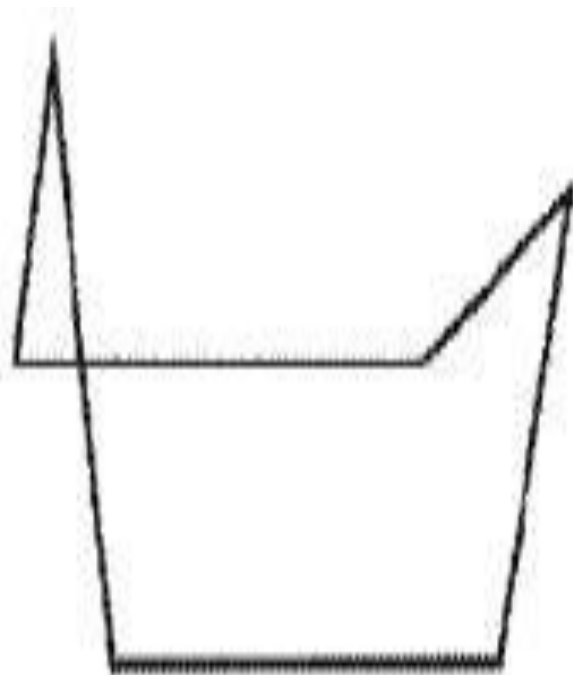


Наиболее устойчивые конформации циклогексана

кресло *ванна*



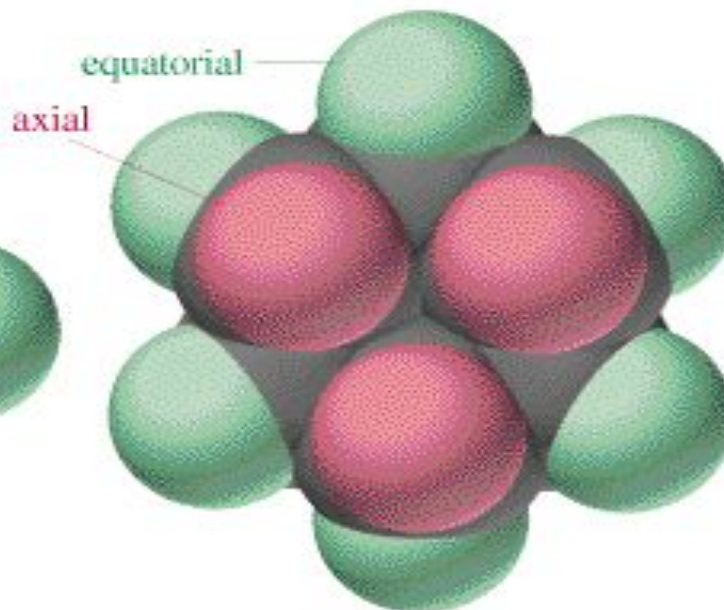
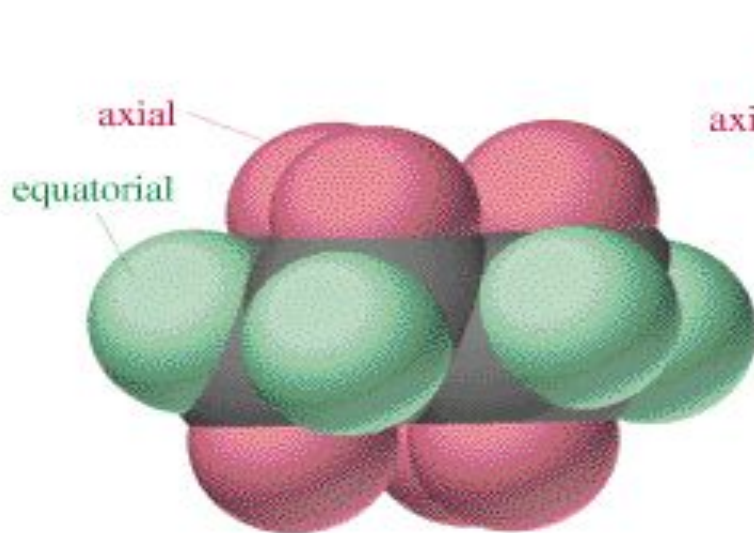
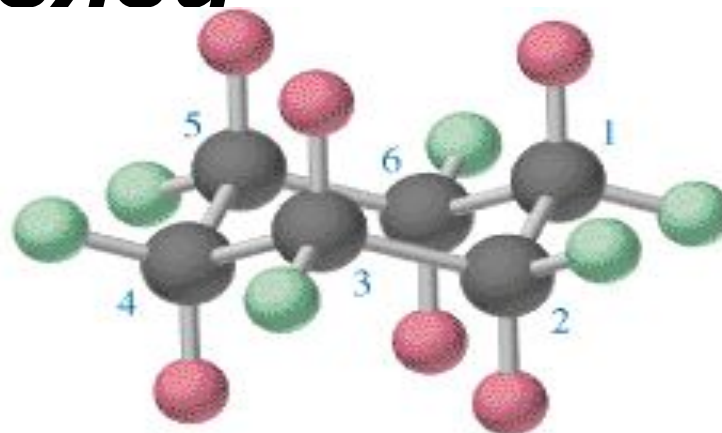
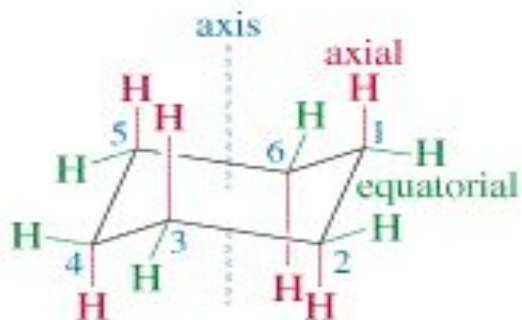
a



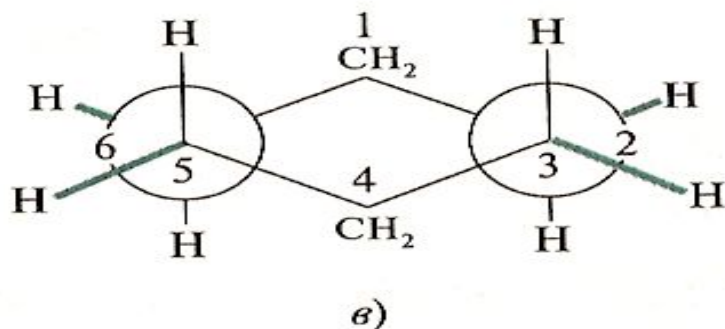
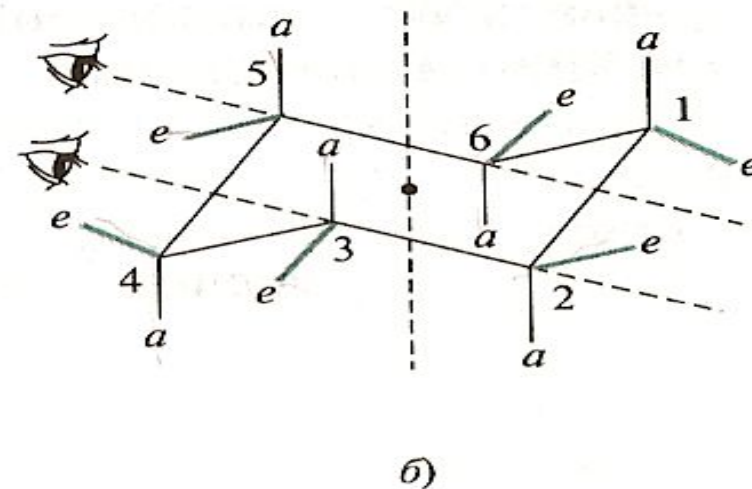
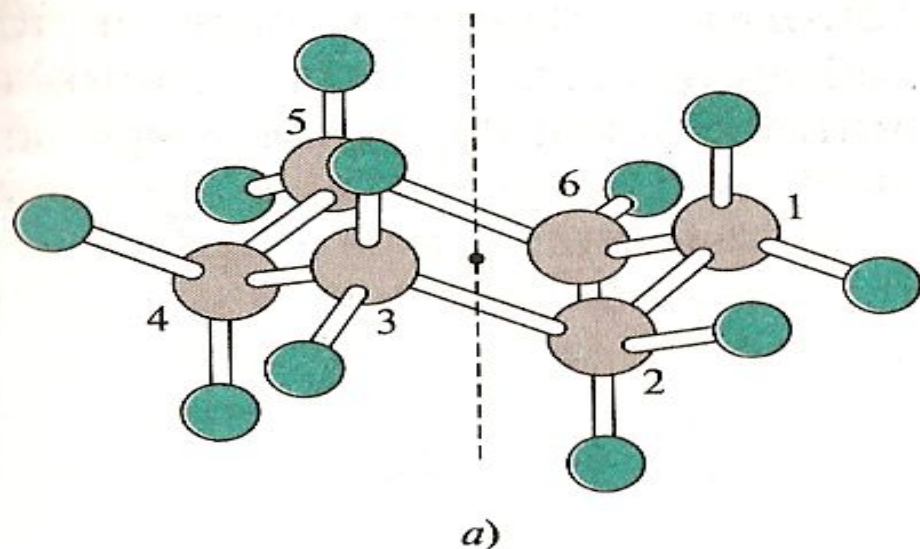
б

Конформация «кресло»

аксиальные и экваториальные связи

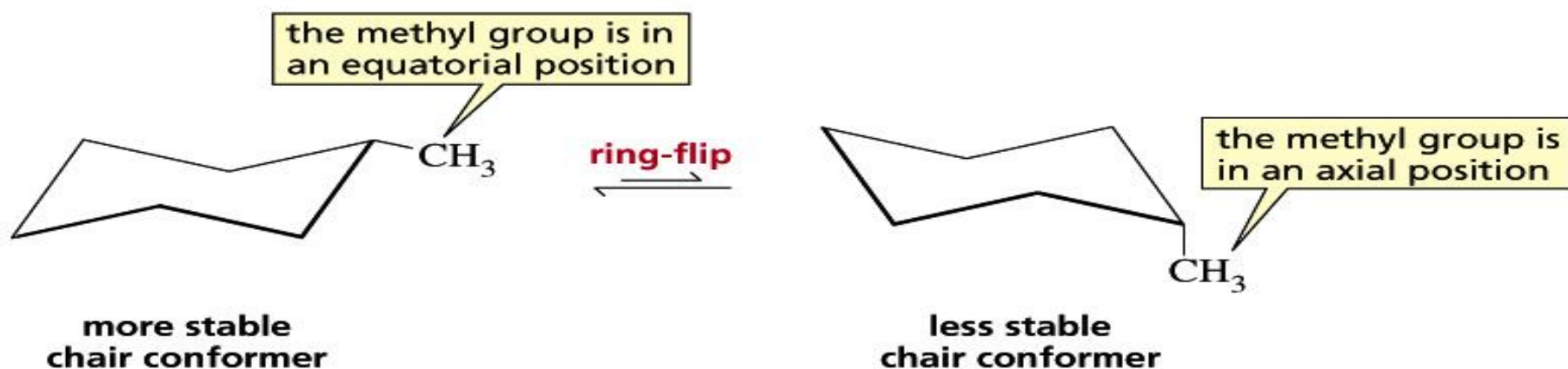


Циклогексан в конформации кресла



а – шаростержневая модель; в – проекция Ньюмена
б – аксиальные (а) и экваториальные (е) связи

Наиболее устойчивая
конформация с
экваториальным положением
заместителей

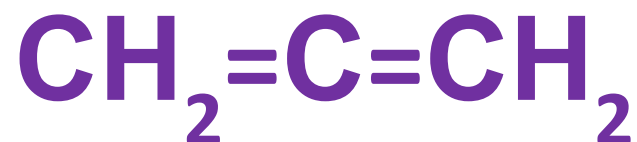


**Сопряжение и ароматичность –
энергетический фактор
стабилизации молекул
биологически активных
соединений**

Классификация двойных связей по расположению в молекуле



Изолированные двойные связи

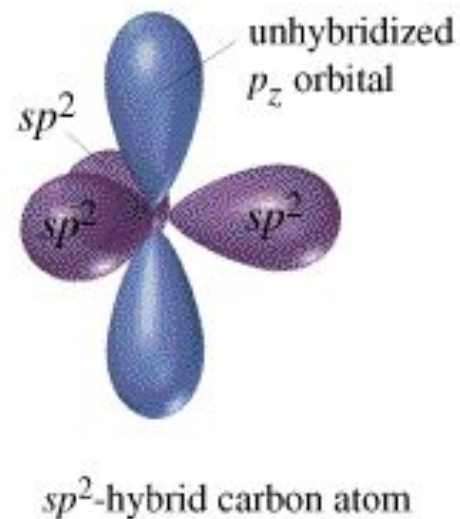
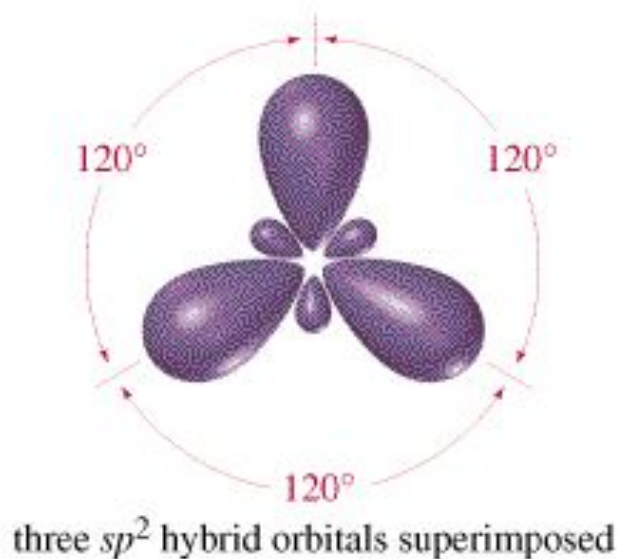
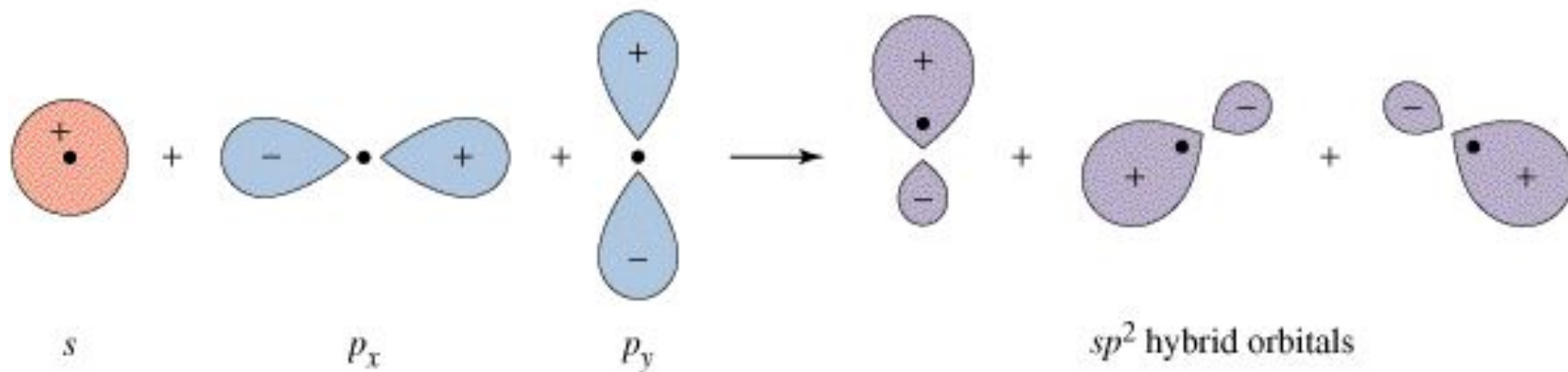


Кумулированные двойные связи

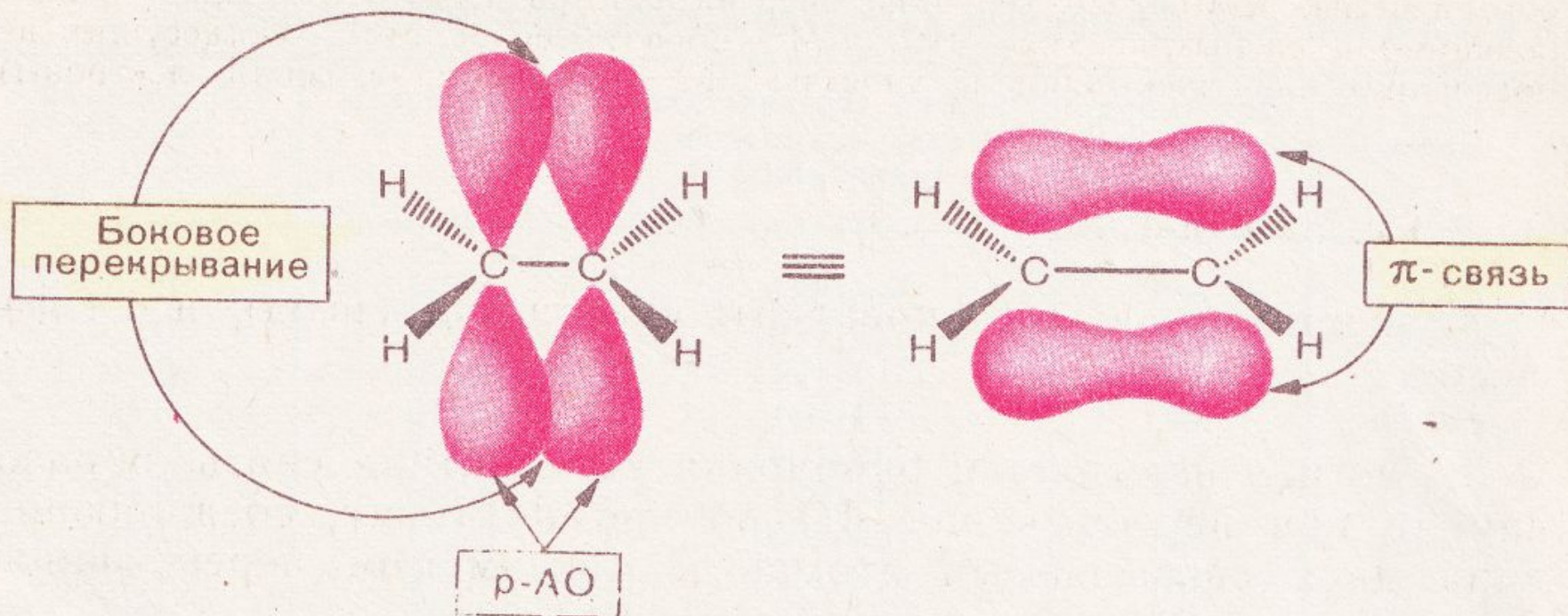


Сопряженные двойные связи

sp^2 гибридизация



Образование π -связи

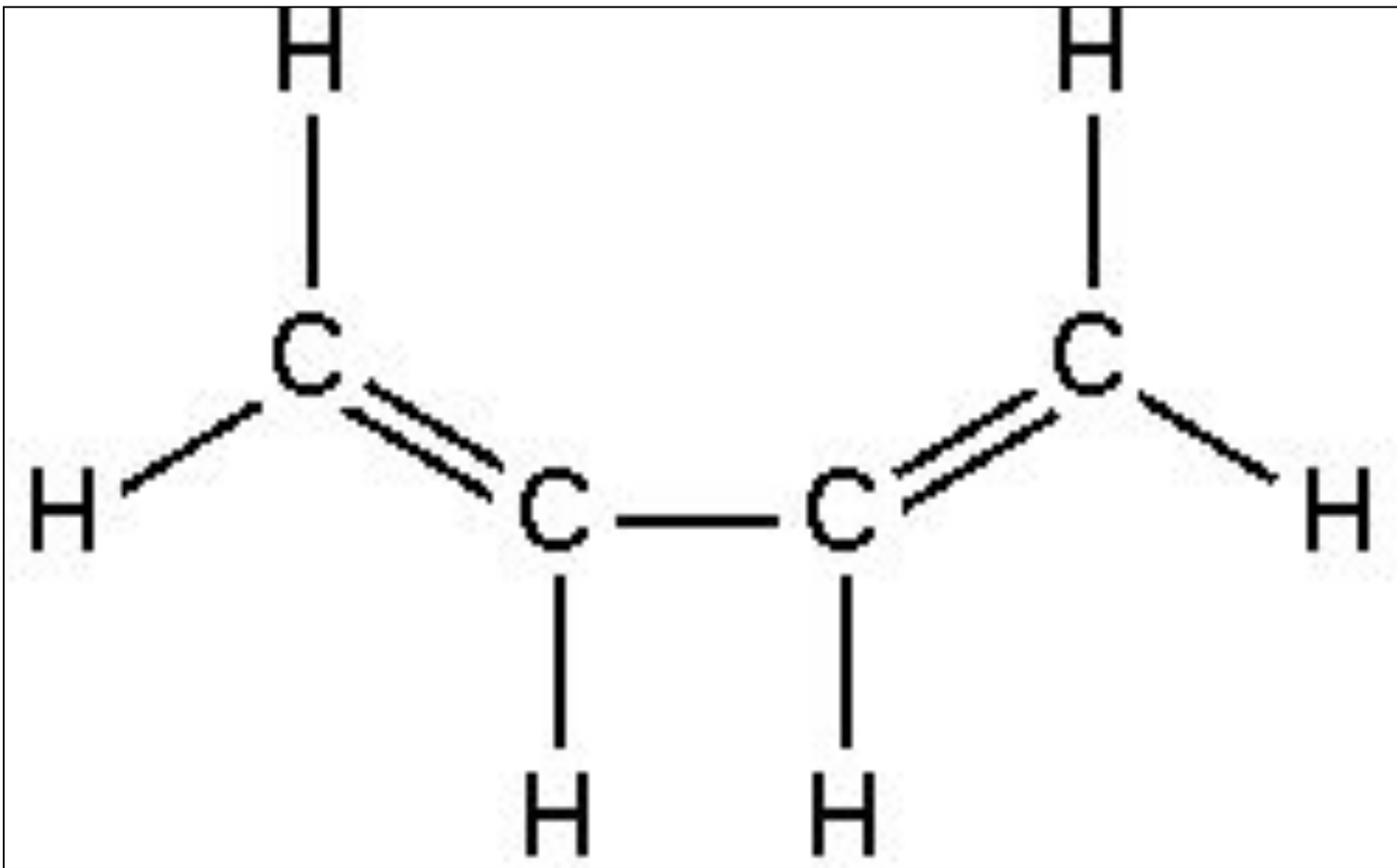


Сопряжение –
перераспределение электронной
плотности в молекуле,
приводящее к выравниванию
связей по длине и энергии

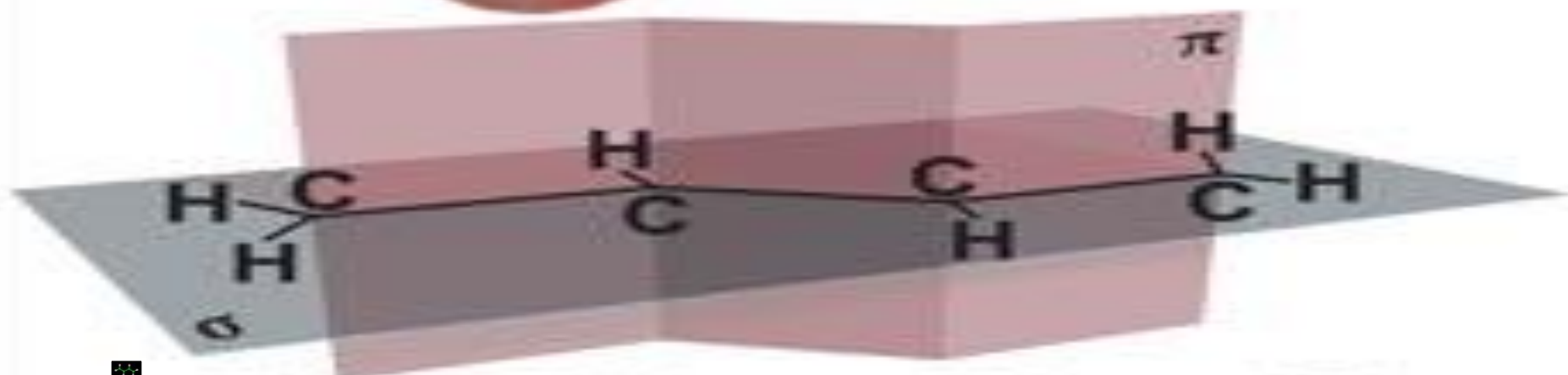
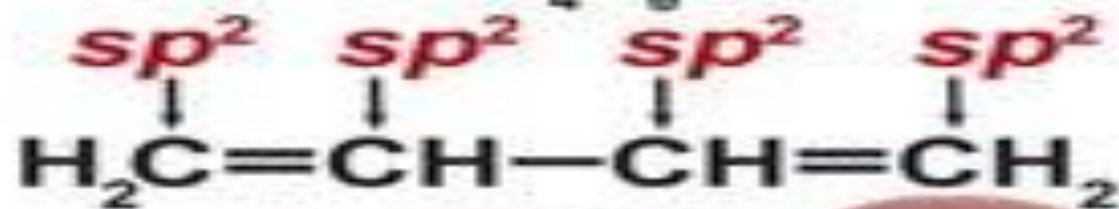
- **Энергия сопряжения** –
уменьшение энергии молекулы
вследствие сопряжения.

Системы с открытой цепью сопряжения

- Бутадиен-1,3



ХИМИЧЕСКИЕ СВЯЗИ В БУТАДИЕНЕ



Типы сопряжения

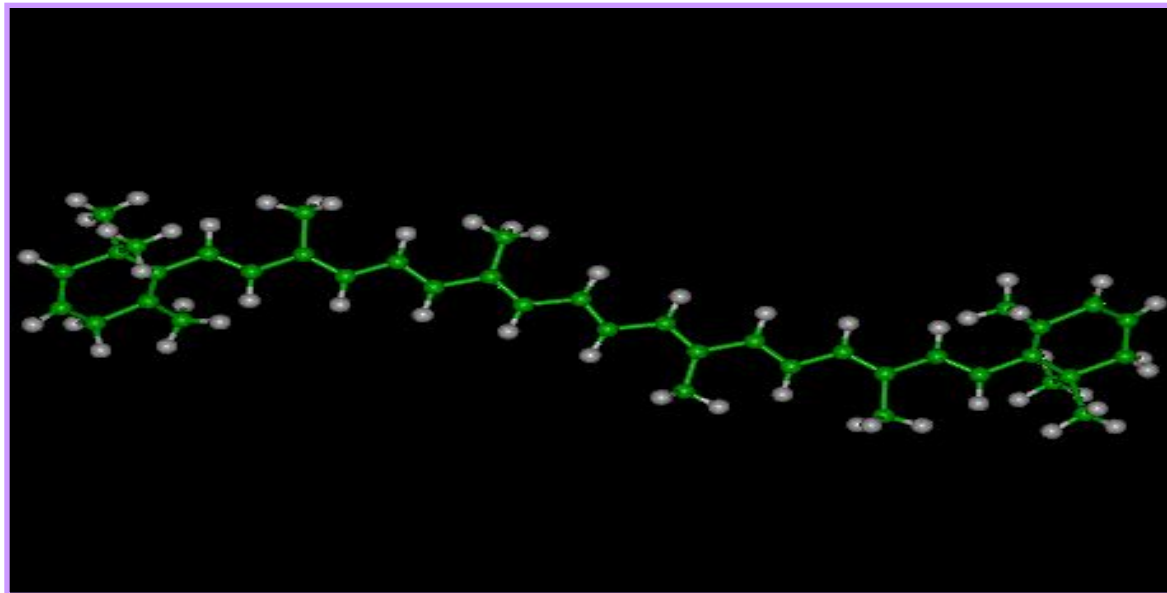
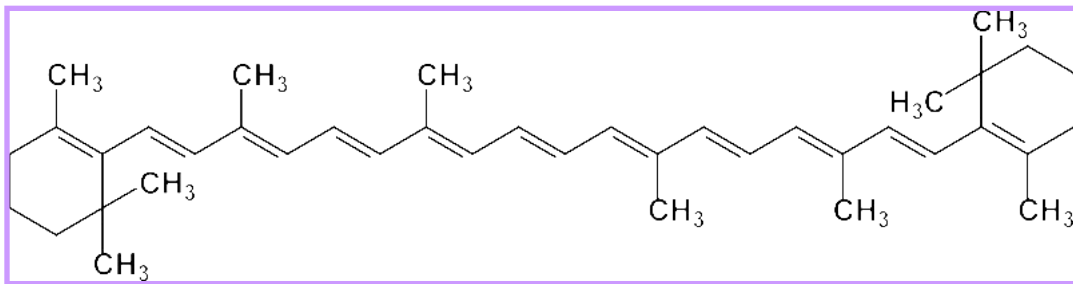
- π - π – сопряжение



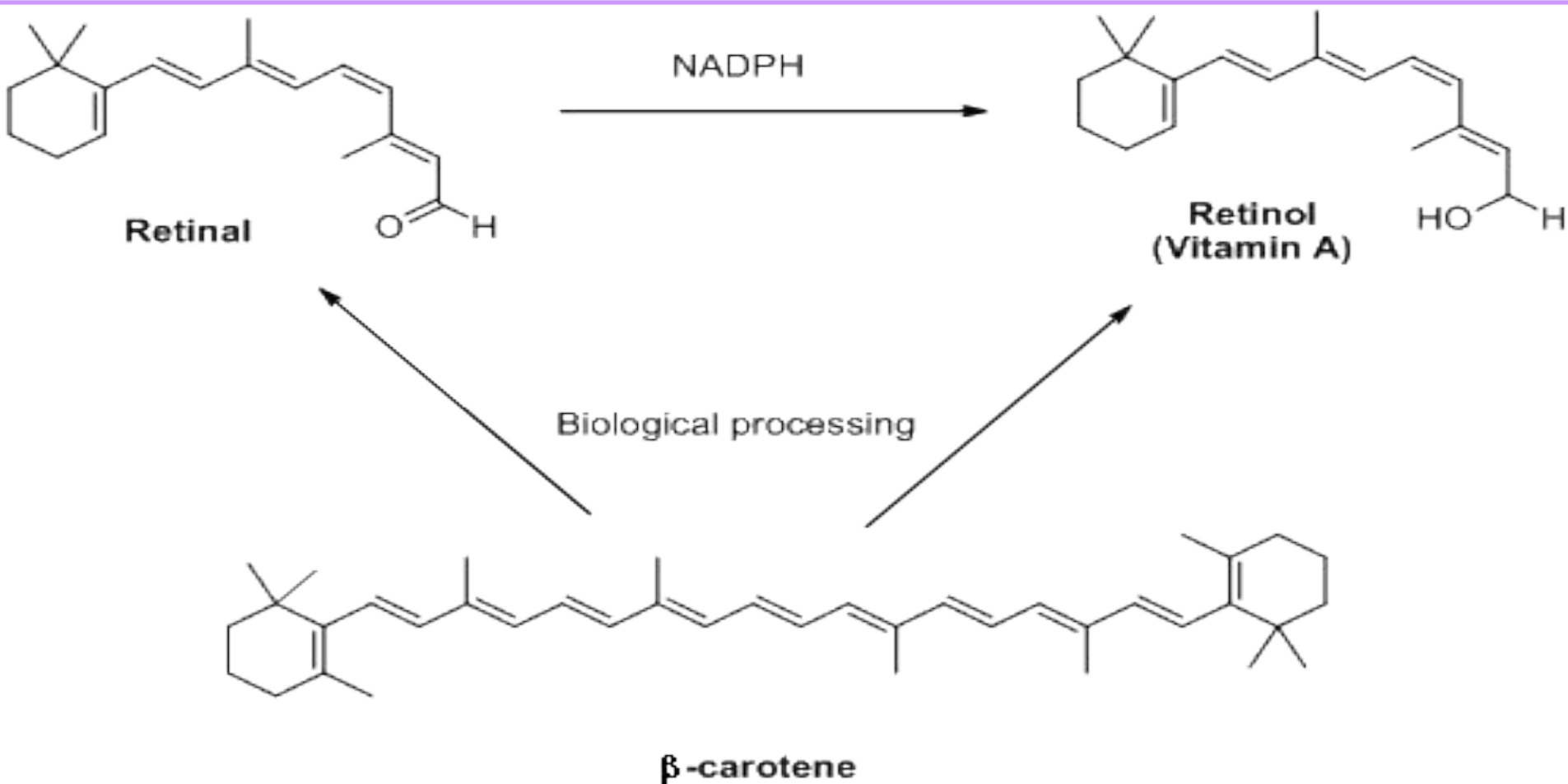
- p - π – сопряжение



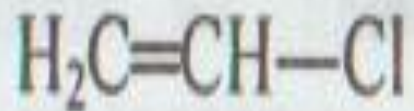
Каротиноиды



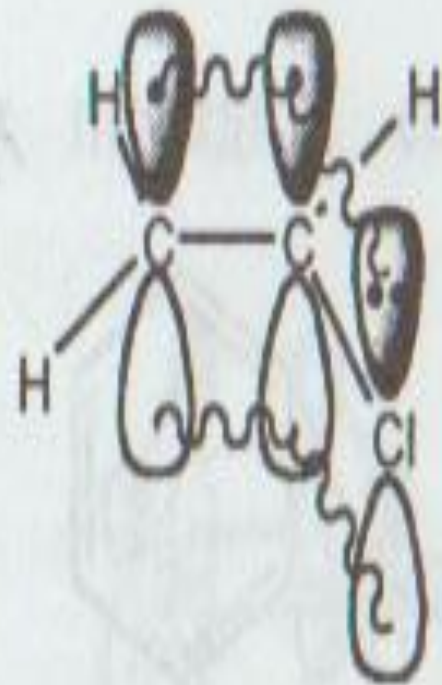
Химические основы процесса зрительного восприятия



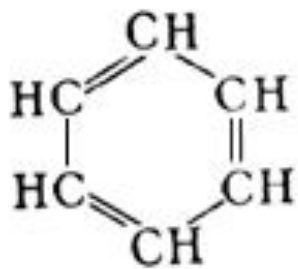
p-π – сопряжение



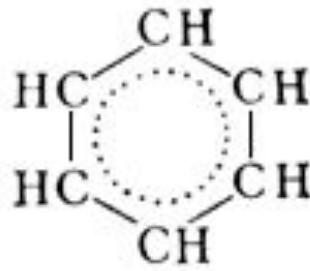
хлорэтен
(винилхлорид)



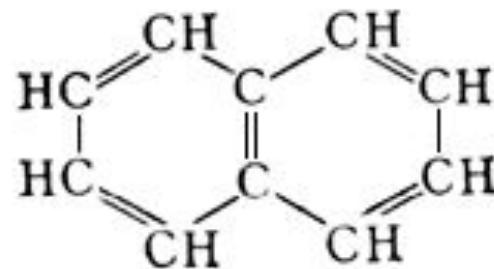
Системы с замкнутой цепью сопряжения



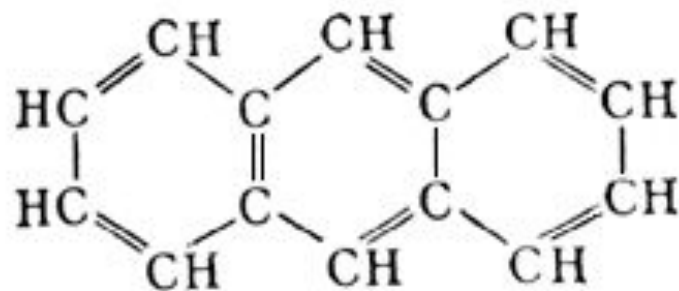
I



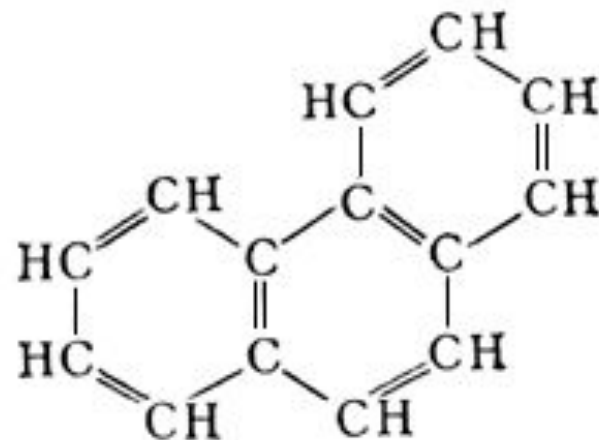
Ia



II



III



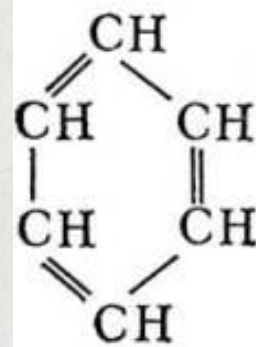
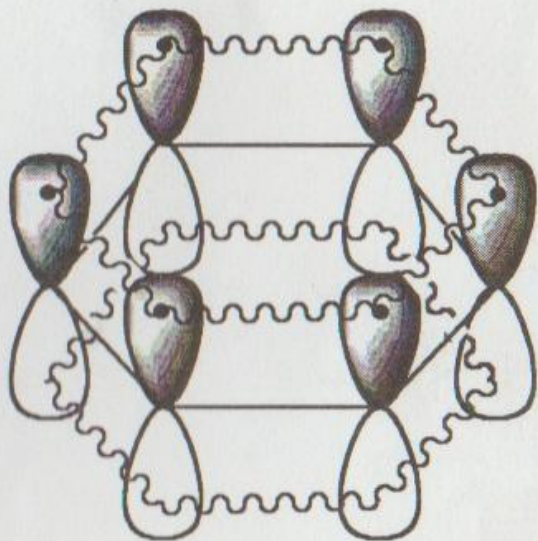
IV

$E_{\text{сопр. замкнутых}} > E_{\text{сопр. открытых}}$

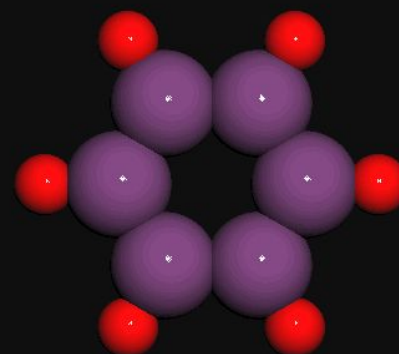
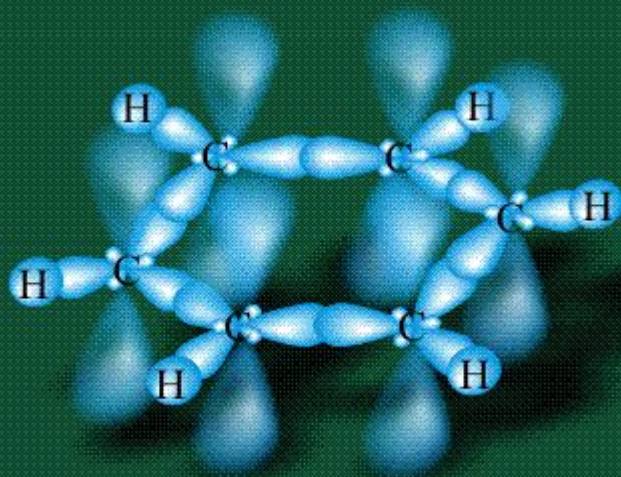
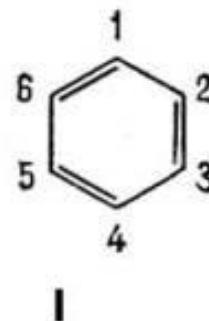
Критерии ароматичности

- Плоский замкнутый цикл
- Замкнутая сопряженная система
- **Число электронов** в сопряженной системе = **$4n + 2$** , где n – простое целое число (**правило Хюккеля**)

Бензол

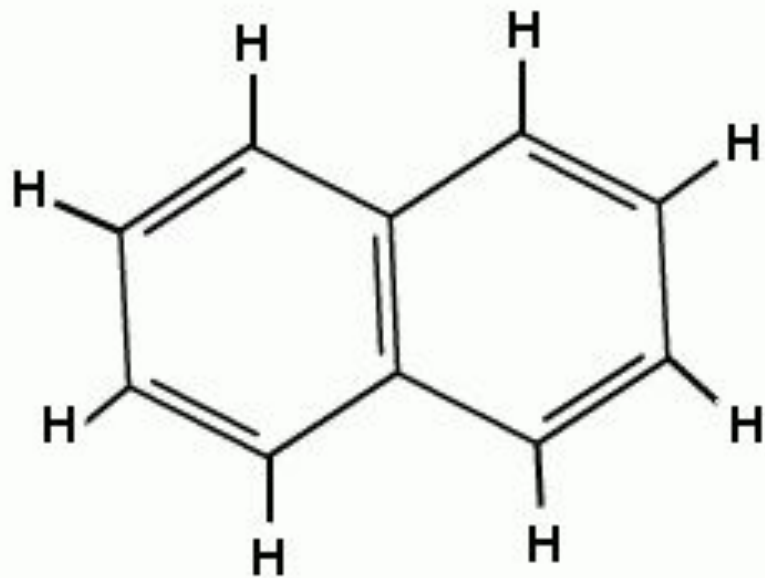


или

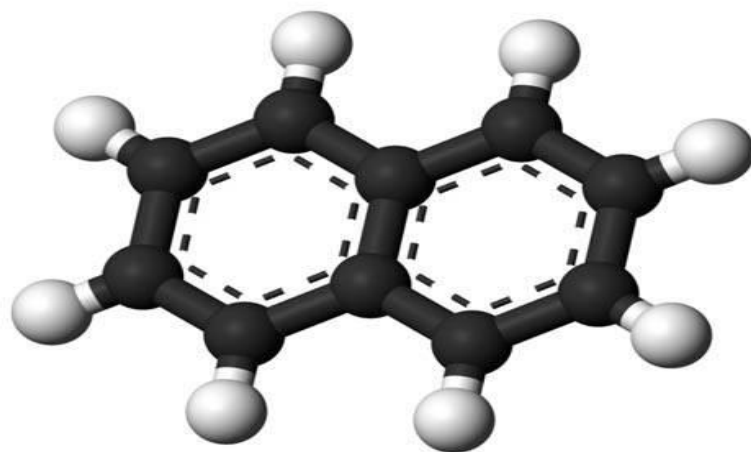
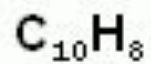


Benzol

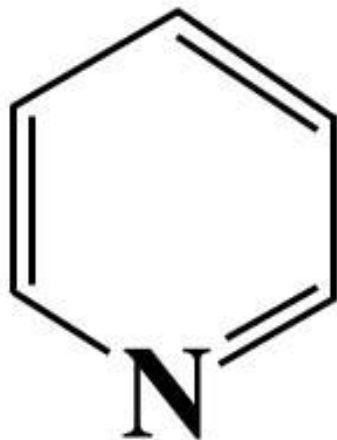
Нафталин



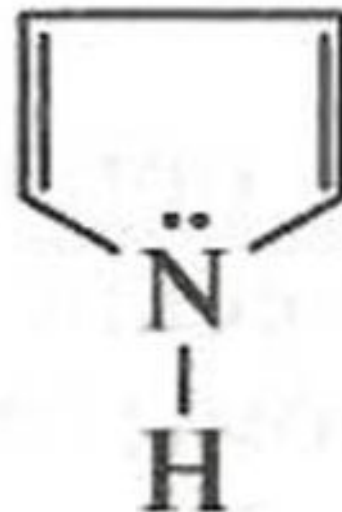
Нафталин



Гетероциклические ароматические соединения



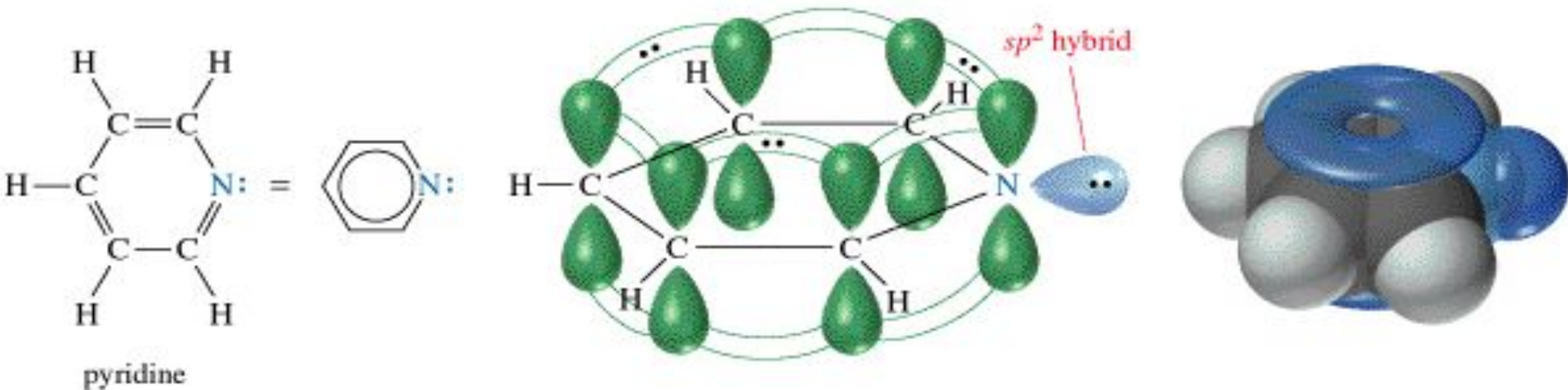
пириди
н



пирро
л

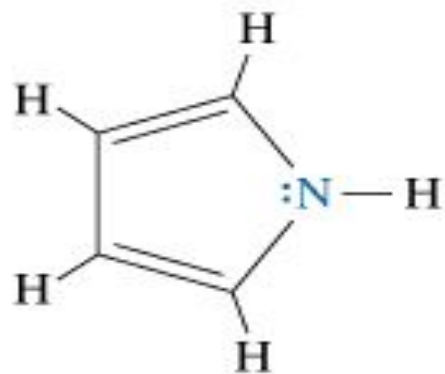
азота

π - недостаточная

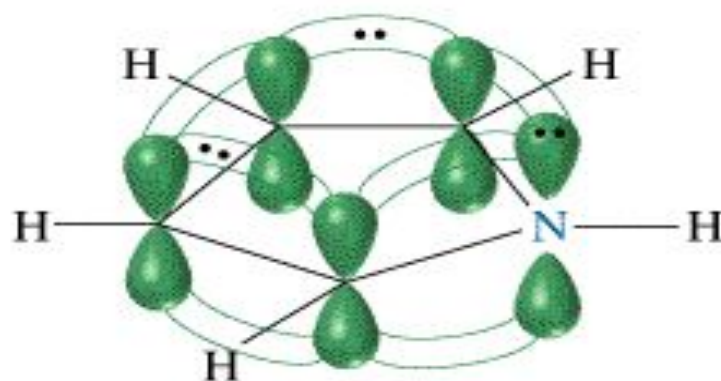


азота

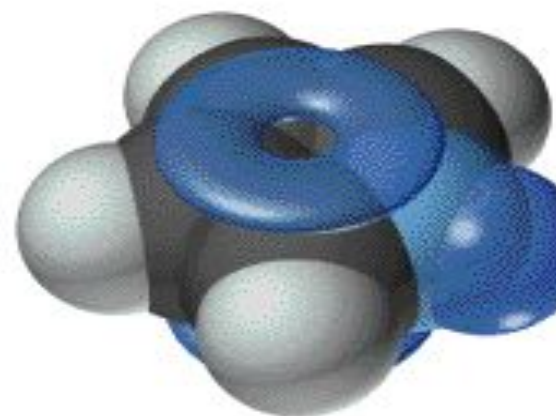
π – избыточная

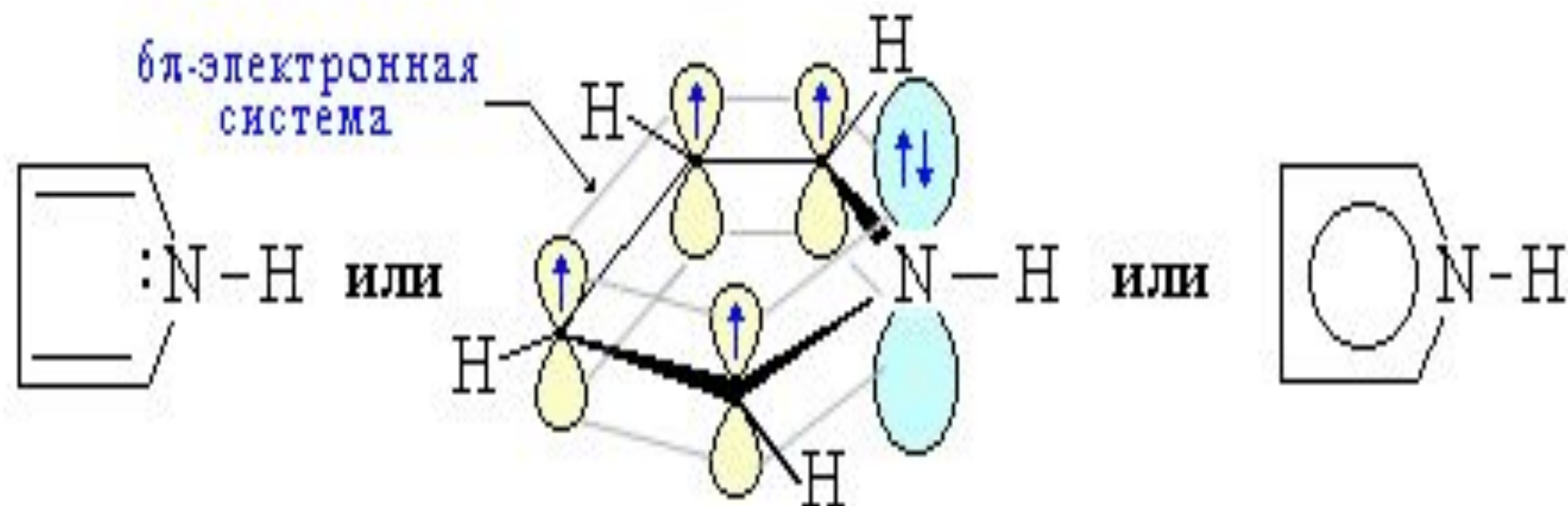


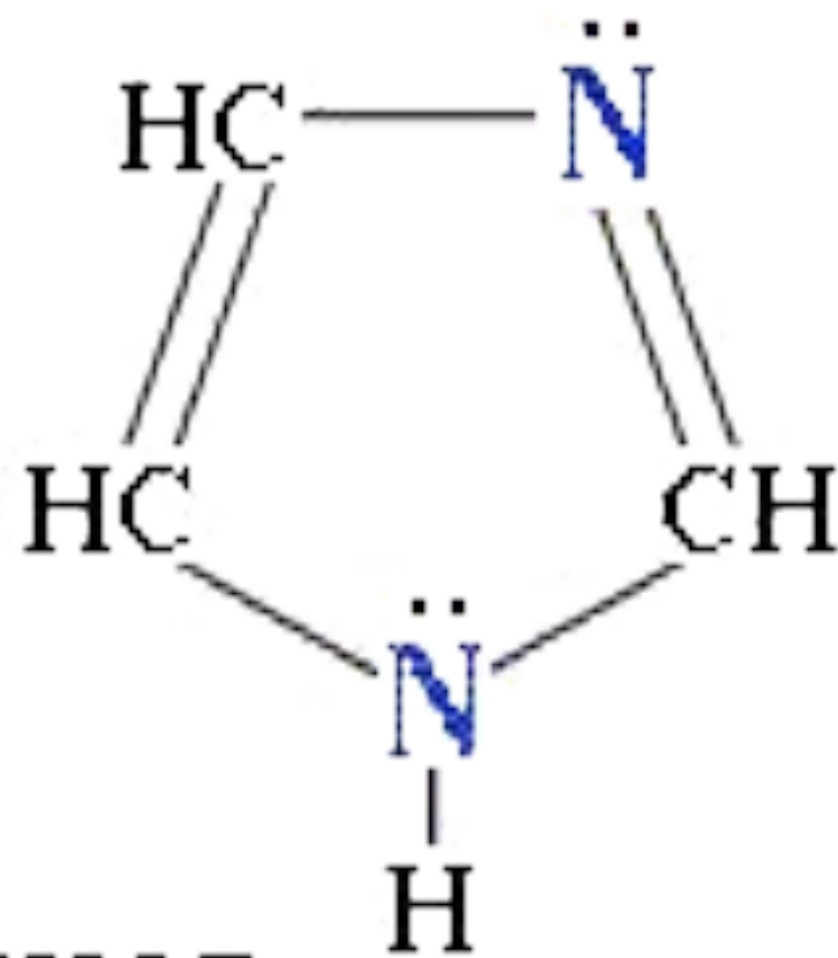
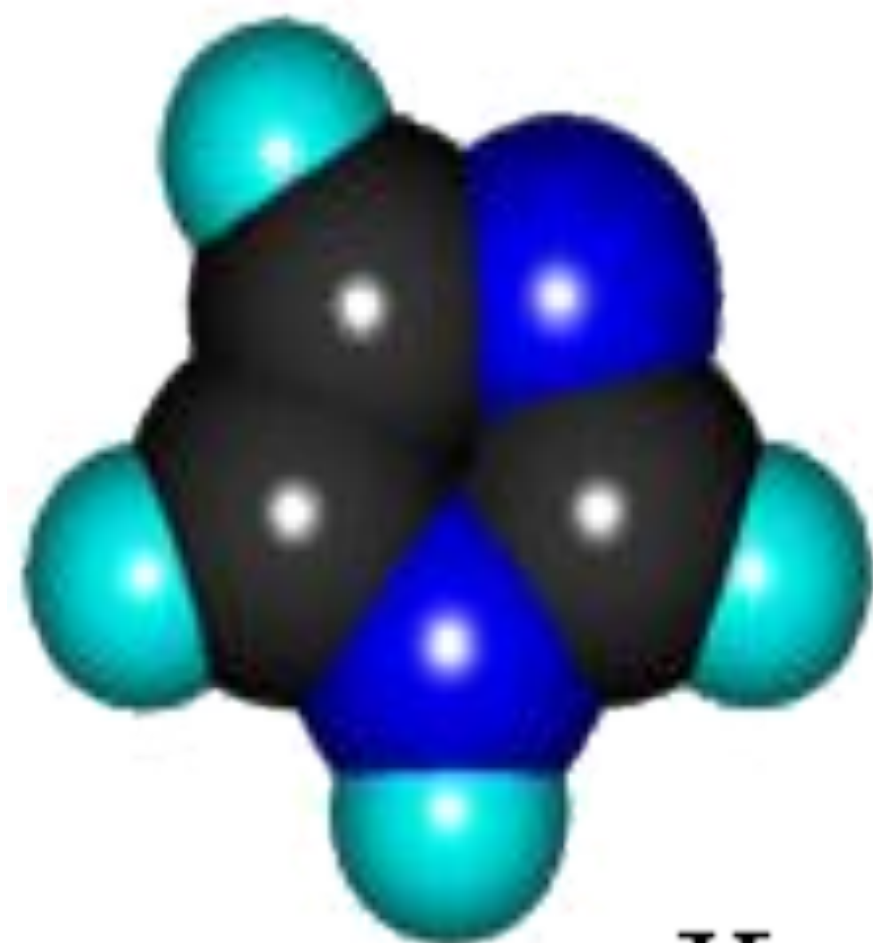
pyrrole



orbital structure of pyrrole
(six pi electrons, aromatic)

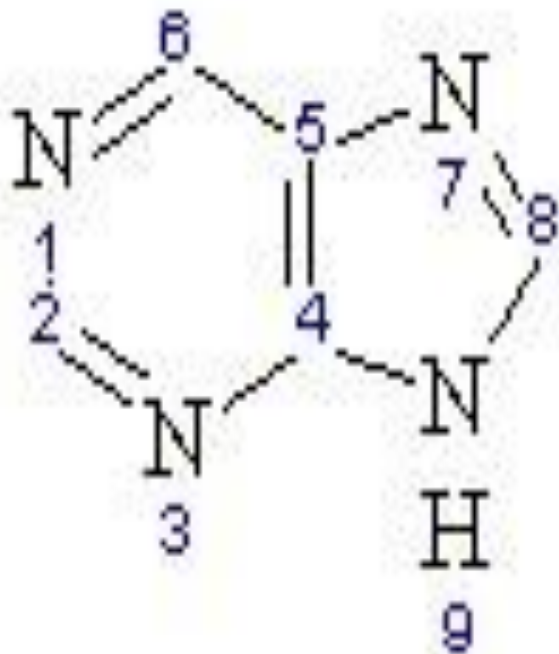




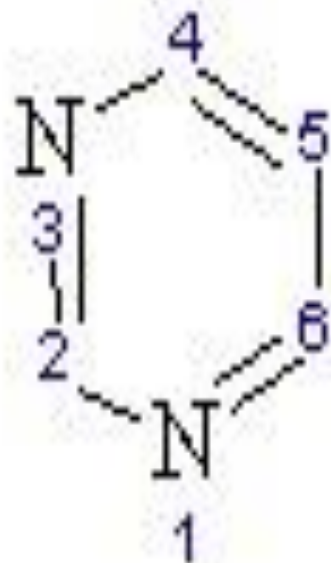


Имидазол

Ароматические гетероциклы



пури́н

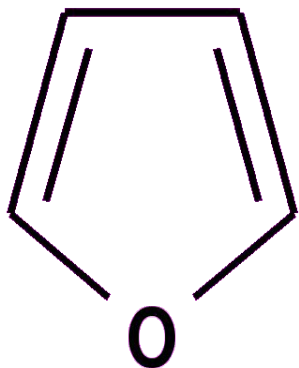


пи́римиди́н

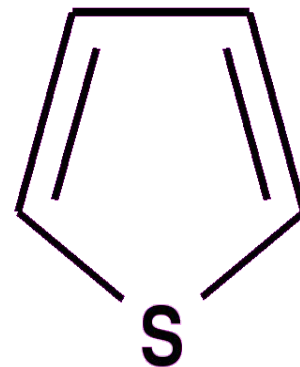
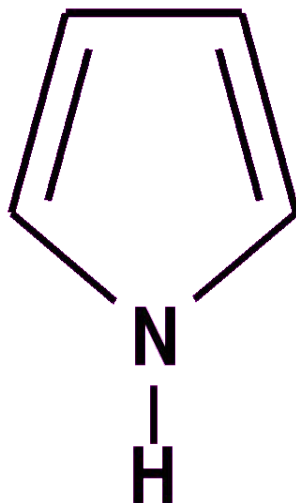
Ароматические гетероциклы

фуран

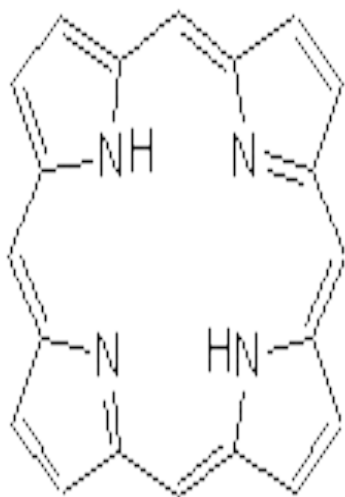
тиофен



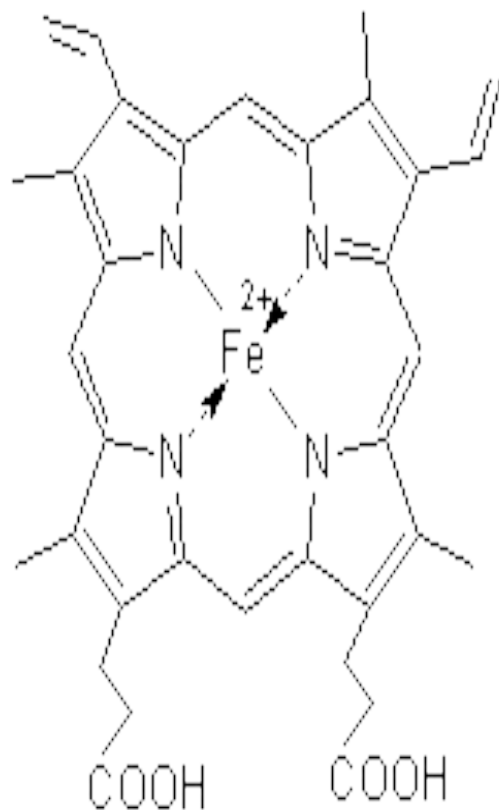
пиррол



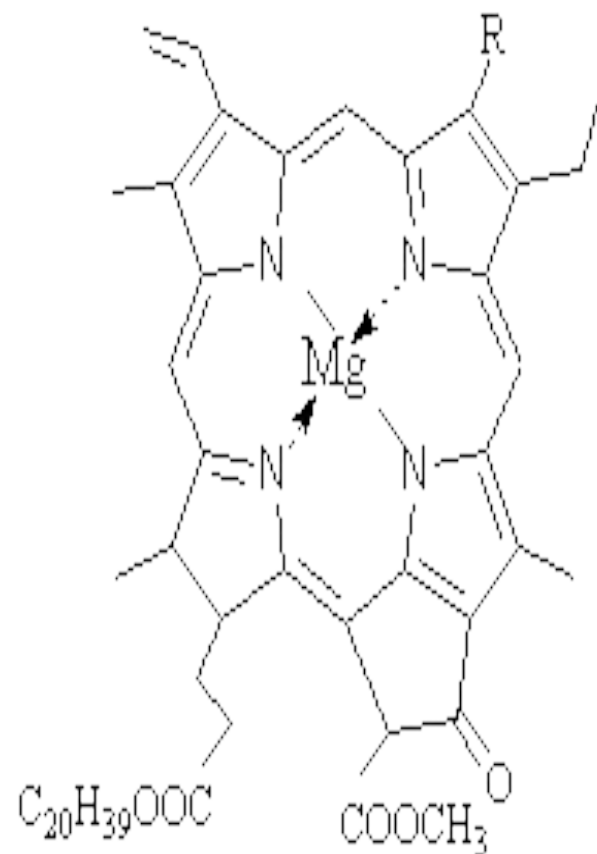
порфин



Порфин

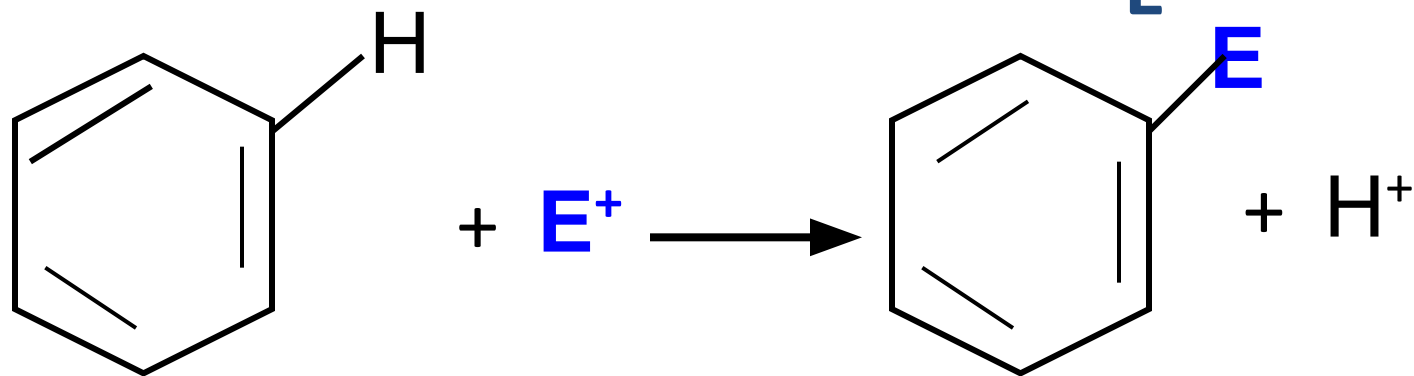


Гем



Хлорофиллы *a* (R=CH₃) и *b* (R=CHO)

Механизм электрофильного замещения S_E



Реакции электрофильного замещения

Субстрат	Реагент	Катализатор	Продукты	Тип реакции
 -H	+ Br ₂	$\xrightarrow{\text{FeBr}_3}$	C ₆ H ₅ Br + HBr	Галогенирование
 -H	+ HNO ₃	$\xrightarrow{\text{H}_2\text{SO}_4}$	C ₆ H ₅ NO ₂ + H ₂ O	Нитрование
 -H	+ H ₂ SO ₄	$\longrightarrow$	C ₆ H ₅ SO ₃ H + H ₂ O	Сульфирование
 -H	+ CH ₃ Cl	$\xrightarrow{\text{AlCl}_3}$	C ₆ H ₅ CH ₃ + HCl	Алкилирование
 -H	+ CH ₃ C(O)Cl	$\xrightarrow{\text{AlCl}_3}$	C ₆ H ₅ C(O)CH ₃ + HCl	Ацилирование

Реакционная способность ароматических гетероциклических соединений

- π -избыточные
недостаточные

(пиррол)

Реакции SE **легче**
труднее

E^+ в α -положение
положение

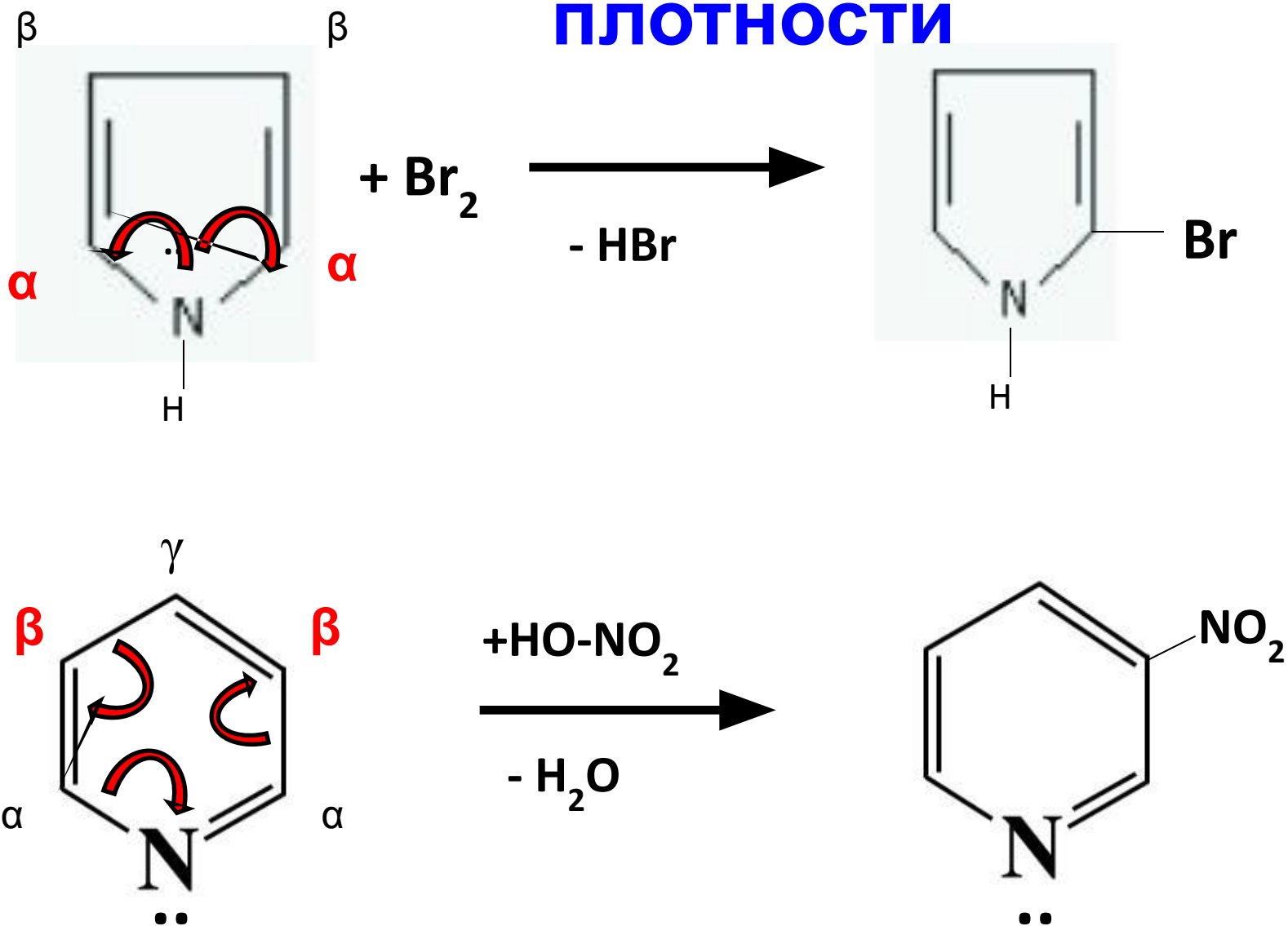
π -

(пиридин)

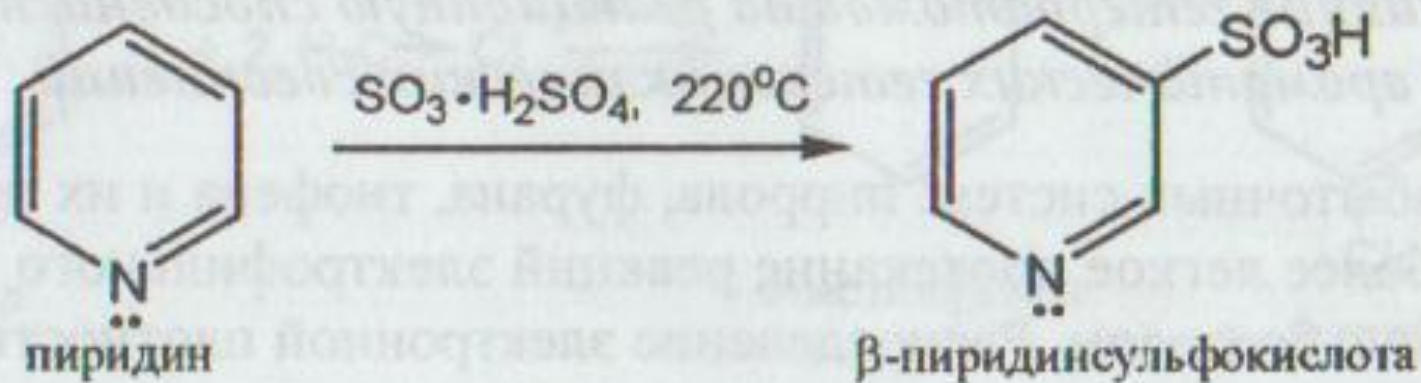
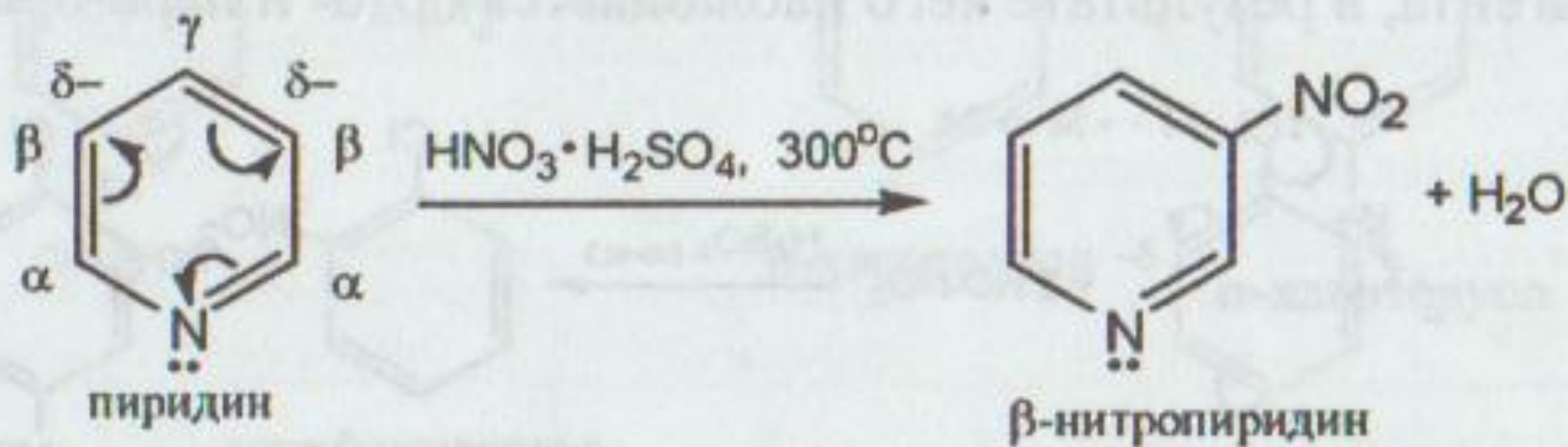
Реакции SE

E^+ в β –

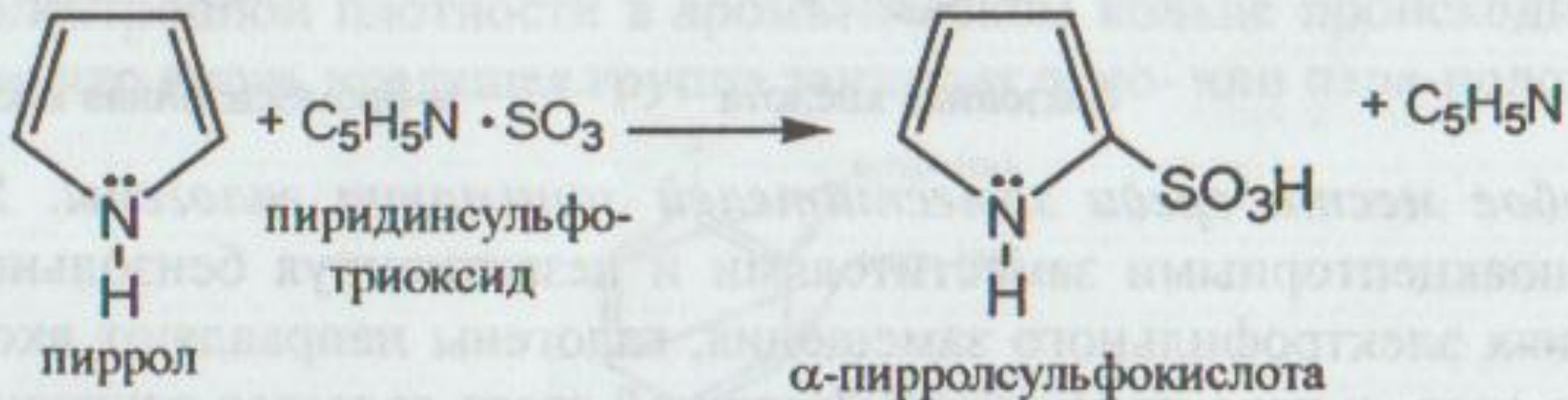
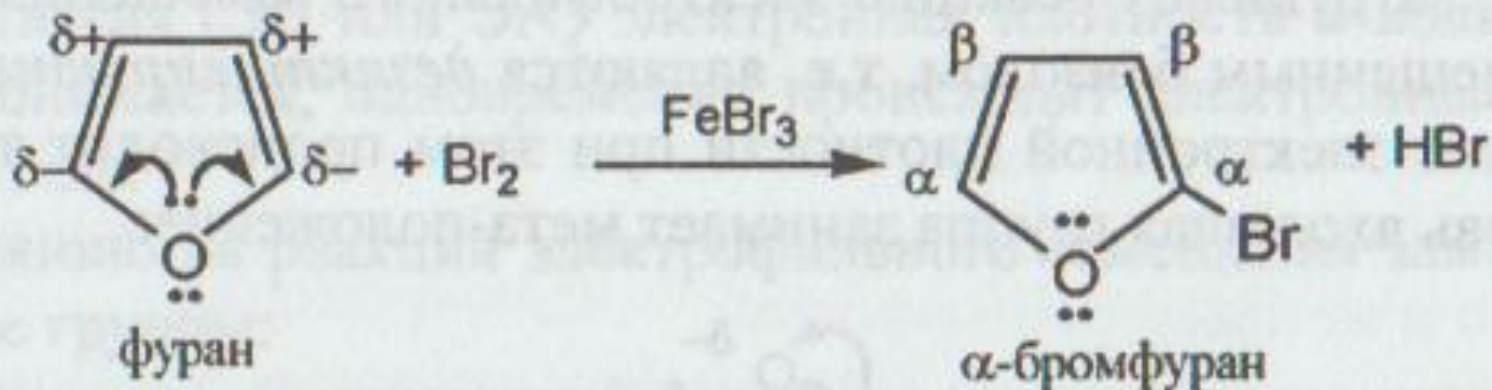
Влияние гетероатома на распределение электронной плотности



π-недостаточные



π-избыточные



Градубо за Вниманиа

