

Тема 1. НОМЕНКЛАТУРА И ИЗОМЕРИЯ АЛКАНОВ, ЦИКЛОАЛКАНОВ И АЛКЕНОВ

Номенклатура (от лат. *nomenclatura* – роспись имен) – правила наименования органических соединений, используется по всему курсу как язык химии, как способ обмена химической информацией. В теме 1 закладывается основа умения назвать впоследствии органическое соединение любого класса.

Вариантов номенклатур несколько. Здесь рассматриваются три способа наименования органических соединений.

- Международная (IUPAC) номенклатура – [М.н.]
- Рациональная номенклатура – (Р.н.)
- Тривиальные (исторически сложившиеся) названия давно и широко используемых органических соединений. Например: метан, этилен, ацетилен, бензол, толуол; кислоты – уксусная, масляная, капроновая, адипиновая и др. Некоторые из тривиальных названий используются как основа рациональных названий, например: метилацетилен, тринитротолуол, хлоруксусная кислота, ω -аминокапроновая кислота и т. д.

Общий принцип всех номенклатур: сложное соединение рассматривается как производное простого углеводорода, в молекуле которого один или несколько атомов водорода замещены на углеводородные радикалы (табл. 2) или на функциональные группы (табл. 3).

Различие [М.н.] и (Р.н.) в следующем:

- для [М.н.] разветвленное соединение представляется (рассматривается) как производное углеводорода с самой длинной С-цепью (или с С-циклом) в данной молекуле;
- для (Р.н.) – любое соединение – как производное первого члена гомологического ряда соответствующего класса органических соединений:
 - метана – для алканов;
 - этилена – для алкенов;
 - ацетилена – для алкинов;
 - бензола – для аренов;
 - карбинола – для спиртов и т. д.

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ВЫПОЛНЕНИЮ ЗАДАНИЙ ТЕМЫ 1

Базовыми для систематических номенклатур – [М.н.] и (Р.н.) – являются:

- греческие числительные;
- названия членов гомологического ряда метана;
- понятие о первичных (I), вторичных (II), третичных (III) и четвертичных (IV) атомах углерода (и соответственно атомах водорода), табл. 1;
- названия углеводородных радикалов, табл. 2;
- названия функциональных групп, табл. 3.

Приведена общая схема [М.н.] и последовательность действий при составлении международного названия любого органического соединения.

Даны пояснения и примеры по рациональной номенклатуре, а также последовательность действий при построении структурных формул по номенклатурным названиям и по брутто-формулам.

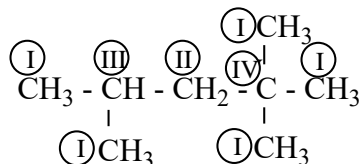
Таблица 1

Греческие числительные		
1 моно (<i>лат.</i>)	5 пента	9 нона (<i>лат.</i>)
2 ди	6 гекса	10 дека
3 три	7 гепта	11 ундека
4 тетра	8 окта	12 додека

Названия членов гомологического ряда метана (ГРМ) C_nH_{2n+2}	
Тривиальные	Названия остальных – по греческим числительным

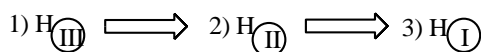
CH_4 метан C_2H_6 этан C_3H_8 пропан C_4H_{10} бутан	C_5H_{12} пентан C_8H_{18} октан (и т. д.)
Гомологи – соединения <i>одного</i> класса, отличающиеся по составу друг от друга на одну или несколько групп атомов (CH_2).	Изомеры – соединения <i>одинакового</i> состава, отличающиеся по структуре (могут быть и разных классов).

Понятие о первичных (I), вторичных (II), третичных (III) и четвертичных (IV) атомах углерода (и водорода):



- 1) В неразветвленных структурах есть только C (I) и C (II)
- 2) В разветвленных – есть хотя бы один C (III) или C (IV)
- 3) Изомеры углеводородов отличаются друг от друга количеством и местом положения C (III) и (или) C (IV) в углеродной цепи

Объяснение соблюдения правила А.М. Зайцева (последовательности отщепления и замещения атомов H)



Прочности связей (H-C)			
Виды атомов	I	II	III
кДж / моль	410	395	380





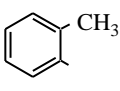
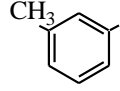
Таблица 2

Молекулы углеводородов и их радикалы (R)

n	Молекулы (алканы) $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$	Радикалы (алкилы) ($-\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$)
1	CH_4 метан	$-\text{CH}_3$ метил
2	$\text{CH}_3 - \text{CH}_3$ этан	$-\text{CH}_2 - \text{CH}_3$ этил
3	$ \begin{array}{ccc} \textcircled{\text{I}} & \textcircled{\text{II}} & \textcircled{\text{I}} \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \text{пропан} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \textcircled{\text{I}} \\ -\text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \text{пропил} \end{array} $
		$ \begin{array}{c} \textcircled{\text{II}} \\ -\text{CH} - \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \\ \text{изопропил} \end{array} $

Продолжение табл. 2

n	Молекулы (алканы) $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$	Радикалы (алкилы) ($-\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$)
4	$ \begin{array}{cccc} \textcircled{\text{I}} & \textcircled{\text{II}} & \textcircled{\text{II}} & \textcircled{\text{I}} \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \text{бутан} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \textcircled{\text{I}} \\ -\text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \text{бутил} \end{array} $
		$ \begin{array}{c} \textcircled{\text{II}} \\ -\text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \\ \text{вторбутил} \end{array} $
	$ \begin{array}{ccc} \textcircled{\text{I}} & \textcircled{\text{III}} & \textcircled{\text{I}} \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH}_3 \\ \\ \textcircled{\text{I}}\text{CH}_3 \end{array} $	$ \begin{array}{c} \textcircled{\text{I}} \\ -\text{CH}_2 - \text{CH} - \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \\ \text{изобутил} \end{array} $

	изобутан	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{III} \\ \text{C} - \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ третбутил	
	Молекулы	Радикалы непредельных углеводородов	
2	$\text{CH}_2 = \text{CH}_2$ Этилен	– $\text{CH} = \text{CH}_2$ винил	
3	$\text{CH}_3 - \text{CH} = \text{CH}_2$ пропилен [пропен]	– $\text{CH}_2 - \text{CH} = \text{CH}_2$ аллил	
		– $\text{CH} = \text{CH} - \text{CH}_3$ пропенил	– $\text{C} = \text{CH}_2$ CH_3 изопропенил
Ароматические радикалы (арилы)			
6	(C_6H_6)  бензол	(C_6H_5-)  фенил	
7	$(\text{C}_6\text{H}_5 - \text{CH}_3)$  толуол	$(\text{C}_6\text{H}_5 - \text{CH}_2-)$  бензил	
		$(\text{CH}_3 - \text{C}_6\text{H}_4-)$ толлилы:	
		 <i>орто-</i>	 <i>мета-</i>

Окончание табл. 2

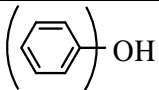
п	Молекулы (алканы) $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$	Радикалы (алкилы) $(-\text{C}_n\text{H}_{2n+1})$
Некоторые пентилы (всего их может быть 8)		
5	$\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 -$	I <i>n</i> -пентил
5	$\text{CH}_3 - \underset{\text{CH}_3}{\text{CH}} - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 -$	I изопентил
5	$\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \underset{\text{CH}_3}{\overset{\text{CH}_3}{\text{C}}} -$	I неопентил

Функциональная группа – структурный фрагмент молекулы, который определяет наиболее характерные свойства вещества и его принадлежность к определенному классу органических соединений.


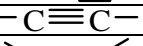
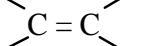
Таблица 3

Названия функциональных групп для [М.н.]

Класс органических соединений	Функциональная группа (*)	Название	
		Основное (в окончании)	Заместительное (в приставке) (**)
Карбоновые кислоты	$(\text{R}) - \text{C} \begin{array}{l} \text{=O} \\ \text{OH} \end{array}$	–овая кислота	карбоксо–
Сульфокислоты	$(\text{R}) - \text{SO}_3\text{H}$	-сульфокислота	сульфо–
Альдегиды	$(\text{R}) - \text{C} \begin{array}{l} \text{=O} \\ \text{H} \end{array}$	–аль	(а) оксо– (б) формил–
Кетоны	$(\text{R}) - \text{C} \begin{array}{l} \text{=O} \\ \text{O} \end{array} - (\text{R}_1)$	–он	оксо–
Меркаптаны (тиоспирты)	$(\text{R}) - \text{SH}$	-тиол	меркапто–
Простые эфиры	$(\text{R}) - \text{OR}'$	–	алкокси–

Фенолы	 OH	(–бензол)	окси–
Спирты	(R) - OH	–ол	окси–

Окончание табл. 3

Класс органических соединений	Функциональная группа (*)	Название	
		Основное (в окончании)	Заместительное (в приставке) (**)
Амины	(R) - NH ₂	-амин	амино–
Нитросоединения	(R) - NO ₂	–	нитро–
Галогениды	-F; -Cl; -Br; -I	–	фтор–; хлор–; бром–; иод–
Арены	(R) - 	–бензол	фенил–; бензил–; о-, м-, п-толил
Алкины		–ин–	(в суффиксе) вместо «-ан»-
Алкены		–ен–	

(*) Функциональные группы перечислены в порядке убывания старшинства.

(**) Для гетерофункционального соединения принадлежность к классу определяется видом его старшей функциональной группы. Заместительные названия функциональных групп используются для «младших» в данном гетерофункциональном соединении.

Международная (IUPAC) номенклатура органических соединений – [М.н.]

Любое разветвленное соединение для [М.н.] рассматривается как производное углеводорода с самой длинной непрерывной С-цепью в данной молекуле (или С-циклом), где атомы водорода замещены на УВ-радикалы (алкилы, табл. 2) или на гетероатомы, или на группы атомов с гетероатомами (табл.4).

Общая схема международного названия [М.н.]

«Адреса» и названия заместителей (R- и заместительные функциональные группы)	Название базового (пронумерованного) углеводорода (члена ГРМ)	Названия и «адреса» функциональных групп
--	---	--

Последовательность действий при получении [М.н.] любого органического соединения:

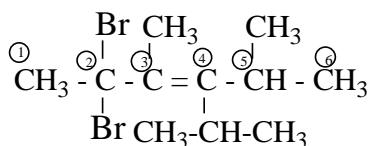
1. Выбирается самая длинная непрерывная С-цепь, содержащая функциональные группы (или цикл).
2. Нумеруются атомы С-цепи от С (I) до С (I) со стороны «старшей» функциональной группы или со стороны ответвлений (или от атома С-цикла с заместителем в сторону ближайшего другого заместителя в цикле).
3. Записывается международное название в следующем порядке:
 - а) цифра (№ С) – «адрес» заместителя;
 - б) через дефис – название заместителя;
 - в) название базового углеводорода (название члена ГРМ или С-цикла);
 - г) название функциональной группы (если она есть);
 - д) через дефис – цифра (№С) – «адрес» функциональной группы.
4. Если несколько **разных** заместителей (*) - последовательно перечисляются «адреса» и названия каждого;
5. Если несколько **одинаковых** заместителей – сначала *цифрами* все их «адреса», затем (через дефис) греческим *словом* их количество и название этого вида заместителя в единственном числе.

При записи международного названия:

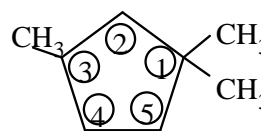
 - а) количество «адресов» (цифр) должно соответствовать количеству заместителей (повтор одного «адреса» – способ показать, что одинаковые заместители «привязаны» к одному и тому же атому углерода);

б) цифры и буквы разделяются дефисом; цифры друг от друга – запятыми.

Пример:



[2,2-дибром-3,5-диметил-4-
изопропилгексен-3]



[1,1,3-триметилциклопентан]

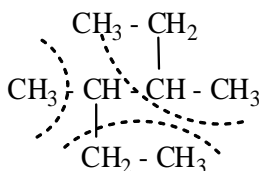
(*) Заместителями могут быть как углеводородные радикалы (табл. 2), так и заместительные группы (табл. 3).

Рациональная номенклатура (Р.н.)

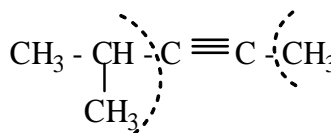
Для (Р.н.) любое органическое соединение (*) рассматривается как результат замены на радикалы атомов Н в молекуле 1-го члена гомологического ряда (**) данного класса органических соединений:

алкан – метана;
алкен – этилена;
алкин – ацетилен и т. д.

Рациональное название состоит из перечня замещающих радикалов и названия базового углеводорода; записывается (Р.н.) в единое слово:

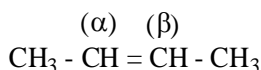


(метилэтилвторбутилметан)

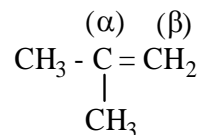


(метилизопропилацетилен)

Только у алкенов делается предварительная «адресация» С-атомов этиленового ядра (α , β) для показа вариантов замещения на различные радикалы:



(α , β -диметилэтилен)



(α , α -диметилэтилен)

(*) (Р.н.), несмотря на ограниченные возможности широко используется для наименования органических соединений различных классов – аминов, кетонов, производных карбоновых кислот и мн.др. Применительно к углеводородам используется в учебных целях.

(**) Исключение: базовыми для (Р.н.) карбоновых кислот и альдегидов служат названия уксусной кислоты и уксусного альдегида – вторых членов их (кислот и альдегидов) гомологических рядов.

Построение структурных формул по номенклатурным названиям

1. С-скелет базового соединения и его нумерация для [М.н.] или α , β для (Р.н.) алкена.
2. Расставить кратные связи и заместителей по «адресам».
3. Дополнить С-скелет атомами Н.

Построение структурных формул изомеров по брутто-формуле (Б.ф.)

1. Построить несколько С-скелетов с различным количеством и (или) местом положения C_{III} и C_{IV} .
2. Для непредельных алифатов – кратные связи в различных местах С-цепи.
3. Для циклических УВ – несколько различных циклов или одинаковых циклов с разными радикалами по разным «адресам».
4. Дополнить С-скелет атомами Н.

Задание 1

По приведенному названию для (а) и (б):

- построить структурную формулу в компактном варианте;
- получить брутто-формулу (Б.ф.) и назвать по другой номенклатуре [М.н.] ↔ (Р.н.).

По названию (в):

- построить структурную формулу в условном варианте и привести Б.ф.

1. а) (α,α -дивторбутил- β,β -диизобутилэтилен);
б) [2,2-диметил-3-вторбутил-4-этилгексен-3];
в) [гексаэтилциклопропан].
2. а) (α,β -диизопропил- α -этил- β -пропилэтилен);
б) [2,2,4,4-тетраметил-3,3-диизопропилпентан];
в) [1,1,3-триметилциклопентан].
3. а) (дибутилдиизопентилметан);
б) [2-метил-3-этил-4-третбутилгептен-3];
в) [1,2,4-триэтилциклогексан].
4. а) (этилизопропилвторбутилтретбутилметан);
б) [2,2,5,5-тетраметил-3,3-диэтилгексан];
в) [1,1,3,3-тетраэтилциклобутан].
5. а) (тетранеопентилметан);
б) [2,8-диметил-3-этил-3-изопропилнонан];
в) [1,2,3,4,5-пентаметилциклопентан].
6. а) (тетратретбутилэтилен);
б) [3,3,4,5,5-пентаметил-4-изопропилгептан];
в) [1,1,3,3-тетраметилциклогексан].
7. а) (тетранеопентилметан);
б) [2-метил-3-изопропилпентен-2];
в) [1,2,4-триэтилциклогексан].
8. а) (триизобутилэтилен);
б) [2,8-диметил-3-этил-3-изопропилнонан];
в) [изобутилциклобутан].
9. а) (дипентилдинеопентилметан);
б) [6-изопропил-6-вторбутилундекан];
в) [1,4-диизопропилциклогексан].
10. а) (α,β -дипропил- α,β -динеопентилэтилен);
б) [2,2,4,4-тетраметилпентан];
в) [1,3-дитретбутилциклобутан].
11. а) (метилизопропилдитретпентилметан);
б) [2,4-диметил-3,3-диэтилгексан];
в) [1,3,4-триэтилциклопентан].
12. а) (тетраизобутилметан);
б) [2,3,4,6-тетраметил-4,5-дитретбутилоктен -1];
в) [1,2-диизопропилциклопропан].
13. а) (этилизопентилтретпентилметан);
б) [2,3,4,5,5,6-гексаметил-4-пропилгептан];
в) [1,1,3,3-тетраэтилциклопентан].
14. а) (диизопропилдиизопентилметан);
б) [2-метил-3-изопропилпентен-2];
в) [октаметилциклобутан].
15. а) (бутилвторбутилдиизопентилметан);
б) [2,2,4-триметил-3-этилпентан];
в) [1,2,4,5-тетраметилциклогексан].

Задание 2

По нижеприведенной Б.ф. построить не менее трех изомеров с учетом условия задания; назвать каждый по [М.н.].

1. $C_{13}H_{26}$ (цепь – C_8 и цикл – C_5)
2. $C_{14}H_{30}$ (метил не использовать)
3. $C_{17}H_{34}$ (цепь – C_8)
4. C_6H_{12} (в том числе *цис-*, *транс-*)
5. $C_{16}H_{34}$ (цепь – C_7)
6. $C_{12}H_{24}$ (цикл – C_5)
7. $C_{13}H_{28}$ (метил не использовать)
8. C_7H_{14} (в том числе *цис-*, *транс-*)
9. $C_{18}H_{38}$ (цепь - C_8)
10. $C_{19}H_{40}$ (цепь – C_9)
11. C_7H_{14} (в том числе *цис-*, *транс-*)
12. $C_{18}H_{38}$ (цепь – C_9)
13. $C_{10}H_{20}$ (в том числе *цис-*, *транс-*)
14. $C_{19}H_{40}$ (цепь – C_8)
15. $C_{12}H_{24}$ (цепь – C_7 и цикл – C_6)