

Міністерство охорони здоров'я України
Харківський національний медичний університет

**Класифікація, номенклатура та ізомерія біоорганічних сполук.
Природа хімічного зв'язку. Просторова будова органічних молекул.
Взаємний вплив атомів в молекулах біоорганічних сполук.**

Методичні вказівки для самостійної роботи студентів 1 курсу з біологічної
та біоорганічної хімії.

Затверджено
Вченою радою ХНМУ
Протокол № 2 від 22.02.2018

Класифікація, номенклатура та ізомерія біоорганічних сполук. Природа хімічного зв'язку. Просторова будова органічних молекул. Взаємний вплив атомів в молекулах біоорганічних сполук: метод. вказ. для студентів 1 курсу виклад. Сирова Г.О., Петюніна В.М., Макаров В.О. та ін. – 2-е вид., переробл., випр., доп. – Харків: ХНМУ, 2018. – 24 с.

Укладачі:

Г. О. Сирова

В. М. Петюніна

В. О. Макаров

С. В. Андрєєва

Л. В. Лук'янова

С. М. Козуб

Т. С. Тішакова

О. Л. Левашова

О. В. Савельєва

Н. М. Чаленко

О. С. Каліненко

О. О. Завада

Н. В. Копотєва

М. О. Водолаженко

Г.О. Чистякова

ЗАНЯТТЯ № 1 КЛАСИФІКАЦІЯ, НОМЕНКЛАТУРИ ТА ІЗОМЕТРІЯ
БІООРГАНІЧНИХ СПОЛУК. ПРИРОДИ ХІМІЧНОГО ЗВ'ЯЗКУ. ПРОСТОРОВА
БУДОВА ОРГАНІЧНИХ МОЛЕКУЛ. ВЗАЄМНИЙ ВПЛИВ АТОМІВ В
МОЛЕКУЛАХ БІООРГАНІЧНИХ СПОЛУК.

Кількість годин – 4

Матеріальне забезпечення:

ТАБЛИЦІ: графологічна структура теми

- структури циклоалканів
- структури гетерациклів
- функціональні групи та відповідні їм класи органічних сполук, ряд старшинства груп, префікси, суфікси.
- будова молекули метану
- будова молекули етену
- будова молекули етину
- будова молекули бензену

МОДЕЛІ МОЛЕКУЛ

НАВЧАЛЬНА-МЕТОДИЧНА ЛІТЕРАТУРА:

1. Біологічна і біоорганічна хімія: базовий підручник: у 2 кн./кол. авт.; за ред. чл.-кор. НАМН України, проф. Б.С. Зіменкавського, проф. І.В. Ніженковської. – Кн. 1: Біоорганічна хімія / [Б. С. Зіменковський, В.А. Музиченко, І.В. Ніженковська, Г.О. Сирова]; за ред. Б.С. Зіменковського, І.В. Ніженковської. – К.: ВСВ «Медицина», 2014. – 272с.
2. Основи біоорганічної хімії (навчальний посібник) / Сирова Г.О., Петюніна В.М., Макаров В.О., Лук'янова Л.В.- «Полосата типографія» - 2018 - 238с.
3. Класифікація, номенклатура та ізомерія біоорганічних сполук. Природа хімічного зв'язку. Просторова будова органічних молекул. Взаємний вплив атомів в молекулах біоорганічних сполук: метод. вказ. для студентів 1 курсу виклад. Сирова Г.О., Петюніна В.М., Макаров В.О. та ін. – 2-е вид., переробл., випр., доп. – Харків: ХНМУ.2018. – 24 с.
4. Конспект лекцій.
5. Основи будови та реакційної здатності органічних сполук: Метод. вказ. для студентів 1-го курсу/уклад. Г.О. Сирова, Л.Г. Шаповал, В.М. Петюніна, Є.Р. Грабовецька, Н.М. Ткачук, В.О. Макаров, С.В. Андрєєва, С.А. Наконечна, Л.В. Лук'янова, Р.О. Бачинський, С.М. Козуб, Т.С. Тішакова, О.Л. Левашова, Н.В. Вакулєнко, Н.М. Чалєнко.–Харків: ХНМУ, 2013.– 49 с.

ОБҐРУНТУВАННЯ ТЕМИ:

При вивченні хімічних процесів, які протікають в організмі, Ви зустрінетесь з чисельними і різноманітними органічними сполуками. Для орієнтації у цьому різноманітті речовин, необхідно знати їх наукову класифікацію і номенклатуру.

Хімічна поведінка цих речовин, в тому числі і в біохімічних перетвореннях, визначається їх складом, електронною та просторовою будовою, взаємним впливом атомів у цих сполуках.

НАВЧАЛЬНА МЕТА

Вивчити будову та ізомерію найважливіших класів моно-, полі- та гетерофункціональних сполук. Виробити вміння використовувати хімічну номенклатуру для назви біологічно активних речовин.

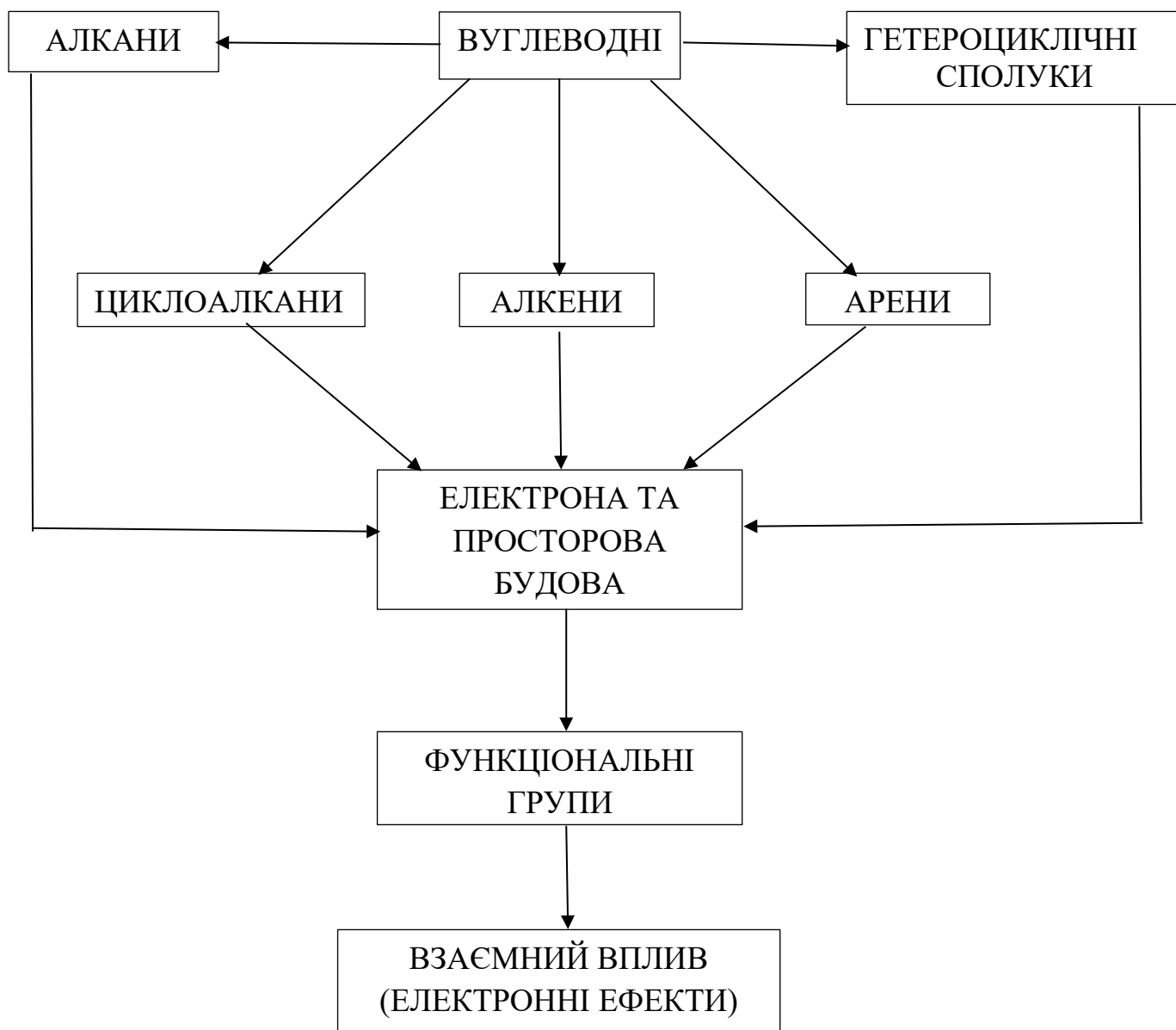
Вивчити електронну і просторову будову аліфатичних, карбоциклічних і гетероциклічних сполук, як основу для розуміння зв'язку будови з біологічною активністю.

ПРАКТИЧНІ НАВИЧКИ:

Вміти:

1. Класифікувати органічні та біоорганічні сполуки.
2. Називати біоорганічні сполуки за номенклатурою ІУРАК та радикало-функціональною номенклатурою.
3. Складати формули біоорганічних сполук за їх назвою.
4. Характеризувати просторову будову біоорганічних сполук.
5. Визначати вид і знак електронних ефектів замісників в молекулах біоорганічних сполук.

ГРАФОЛОГІЧНА СТРУКТУРА ТЕМИ:



ОРІЄНТОВНА КАРТА РОБОТИ СТУДЕНТІВ

№ п/п	Етапи	Час у хв.	Навчальні й наочні засоби	Місце проведення
1.	Мотиваційна характеристика та план теми. Відповіді на запитання студентів	25 хв.		Навчальна кімната
2.	Вхідний контроль	20 хв.	Тести вхідного контролю	Навчальна кімната
3.	Корекція знань і умінь студентів шляхом роз'язування ситуаційних навчальних завдань (самостійна аудиторна робота)	95 хв.	Навчальний посібник, методичні вказівки для самостійної роботи студентів	Навчальна кімната
4.	Вихідний контроль знань	25 хв.	Тести вихідного контролю	Навчальна кімната
5.	Аналіз контролю, підведення підсумків заняття, домашнє завдання	15 хв.		Навчальна кімната

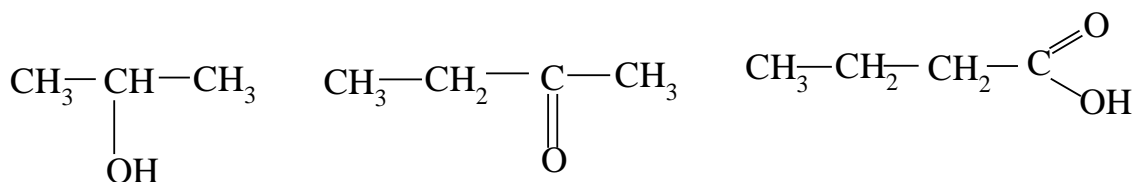
ЗАВДАННЯ ДЛЯ САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ:

Перелік питань, що підлягають вивченню:

1. Класифікація органічних сполук за характером вуглецевого ланцюга та функціональних груп.
2. Номенклатура біоорганічних сполук: тривіальна, радикало-функціональна (раціональна), міжнародна (замісникова, номенклатура IUPAC).
3. Ізомерія в органічних сполуках. Вклад О.М. Бутлерова в розробку основних положень ізомерії.
4. Електронна будова атома карбону. Природа хімічного зв'язку в органічних сполуках.
5. Просторова будова органічних і біоорганічних сполук:
 - а) конформації сполук з sp^3 -гібридними атомами карбону;
 - б) структура циклоалканів. Бананові зв'язки;
 - в) відкриті і закриті спряженні системи. Ароматичність. Правило Хюккеля.
6. Взаємний вплив атомів в молекулах органічних і біоорганічних сполук. Індукційний і мезомерний ефекти.

НАВЧАЛЬНІ ЗАВДАННЯ І ЕТАЛОНИ ЇХ РІШЕННЯ:

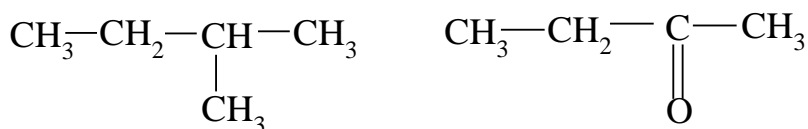
Завдання № 1. Які функціональні групи входять до складу наступних молекул:



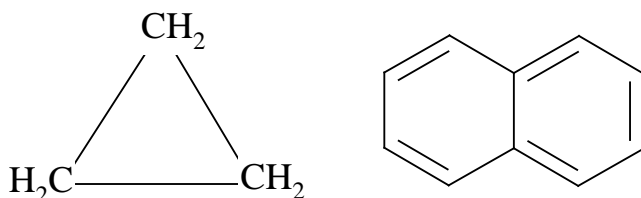
До якого класу належить кожна з цих сполук?

Еталон рішення. В даний час налічується більше шести мільйонів органічних сполук. Причиною такого різноманіття є здатність атомів вуглецю з'єднуватися між собою з утворенням відкритих і замкнутих ланцюгів. При цьому атоми вуглецю можуть з'єднуватися в різних комбінаціях, обумовлюючи ізомерію вуглецевого скелета. Щоб орієнтуватися в такій величезній кількості речовин, необхідна їх чітка класифікація. Всі органічні сполуки зазвичай поділяються на три великі групи:

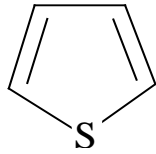
1. Ациклічні сполуки, що мають незамкнуті ланцюги вуглецевих атомів, наприклад:



2. Карбоциклічні сполуки, що містять цикли, які складаються з атомів вуглецю, наприклад:

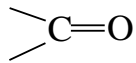


3. Гетероциклічні сполуки, що містять цикли, до складу яких входять, крім атомів вуглецю, атоми інших елементів, наприклад:

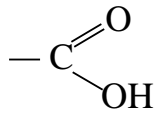


У кожній групі існують класи сполук, властивості яких обумовлені наявністю певних груп атомів, що називаються функціональними групами:

-ОН гідроксильна,



карбонільна,

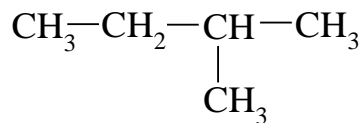


карбоксильна,

-NH₂ аміногрупа.

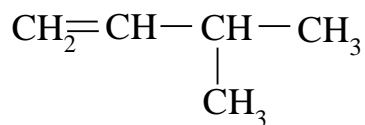
Розглянемо склад і будову найважливіших класів органічних речовин.

Вуглеводні - найпростіші за елементарною будовою органічні сполуки, що складаються тільки з вуглецю і водню. Розрізняють вуглеводні: насичені (алкани), склад яких відповідає формулі C_nH_{2n+2}, наприклад:



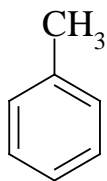
2-метилбутан

ненасичені, містять менше атомів водню, ніж насичені, і мають у молекулі кратні (подвійні або потрійні) зв'язки, наприклад



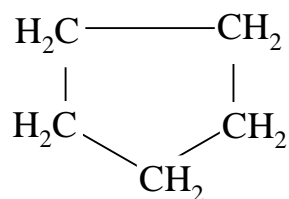
3-метилбутен-2

ароматичні, містять ароматичне ядро, наприклад



метилбензол (толуол);

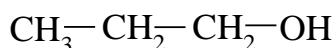
аліциклічні, містять цикли, які не володіють ароматичним характером, наприклад



циклопентан

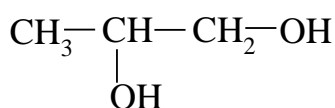
Спирти - похідні вуглеводнів, що утворюються у результаті заміщення одного або декількох атомів водню гідроксильними групами. Залежно від числа гідроксилів розрізняють:

одноатомні спирти, що містять один гідроксил:



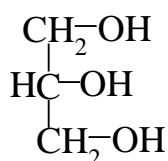
пропанол

двоатомні спирти (гліколі), що містять два гідроксилу:



пропіленгліколь

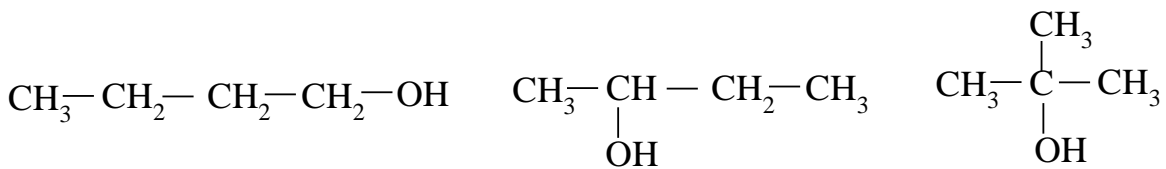
трьохатомні спирти (гліцерин) з трьома гідроксильними групами:



гліцерин

Існують також чотири-, п'яти- і шестиатомні спирти.

Одноатомні спирти згідно положення гідроксильної групи ділять на первинні, вторинні і третинні. У первинних спиртах замісник з'єднаний з первинним атомом вуглецю, тобто з таким, який пов'язаний з одним сусіднім вуглецевим атомом; у вторинних – із вторинним атомом вуглецю; в третинних – з третинним:

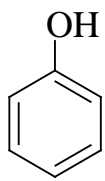


бутанол-1

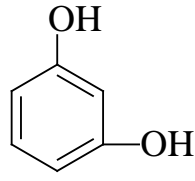
бутанол-2

2-метилпропанол-2

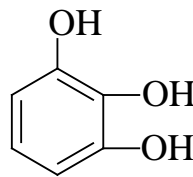
Сполуки, в яких гідроксильна група безпосередньо зв'язана з атомом вуглецю бензольного кільця, називаються фенолами. Феноли, як і спирти, можуть бути одно-, дво- і трьохатомні:



фенол

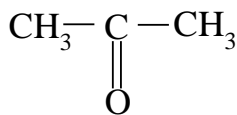


резорцин

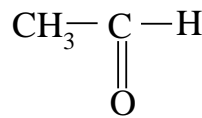


пірогалол

Сполуки, що містять карбонільну групу $\begin{array}{l} \diagup \\ \text{C}=\text{O} \\ \diagdown \end{array}$ відносяться до оксосполук. Якщо атом вуглецю карбонільної групи з'єднаний з двома вуглеводневими радикалами, формуються кетони, а з одним радикалом і з атомом водню - альдегіди:

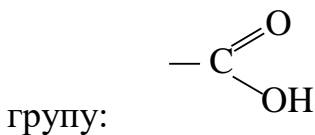


ацетон (диметилкетон)

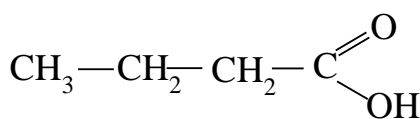


оцтовий альдегід

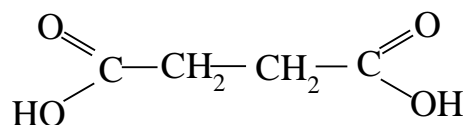
До класу карбонових кислот належать сполуки, що містять карбоксильну



За їх числом розрізняють одно- і двоосновні кислоти:

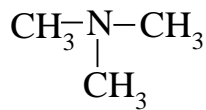
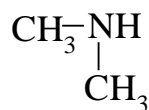
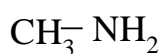


масляна (одноосновна)



бурштинова (двоосновна)

Аміни зазвичай визначають як похідні аміаку, в яких атоми водню заміщені вуглеводневими радикалами. У залежності від кількості радикалів розрізняють первинні, вторинні і третинні аміни:



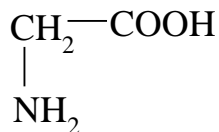
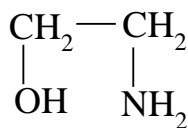
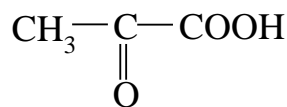
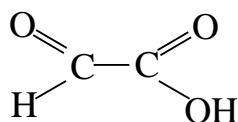
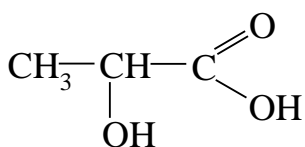
метиламін

диметиламін

триметиламін

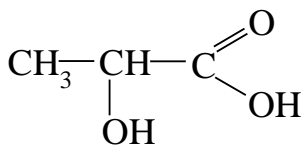
З наведених в умові задачі сполука перша є первинним спиртом, друга – кетоном, третя – карбонової кислотою і четверта – вторинним аміном.

Завдання № 2. До яких класів гетерофункціональних сполук належать такі речовини:



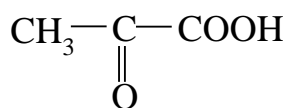
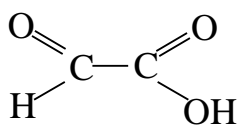
Еталон рішення. Органічні сполуки, в молекулах яких містяться різні функціональні групи, називаються гетерофункціональними сполуками. Поєднанням найважливіших функціональних груп утворюються наступні класи сполук:

гідроксикислоти, які містять гідроксильні і карбоксильні групи:



молочна кислота

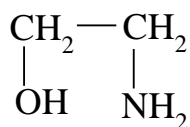
альдегідо- і кетонокислоти, що містять карбонільні і карбоксильні групи:



гліоксилова кислота

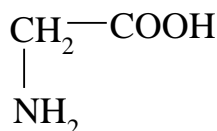
піровиноградна кислота

аміноспирти містять гідроксильні і аміногрупи:



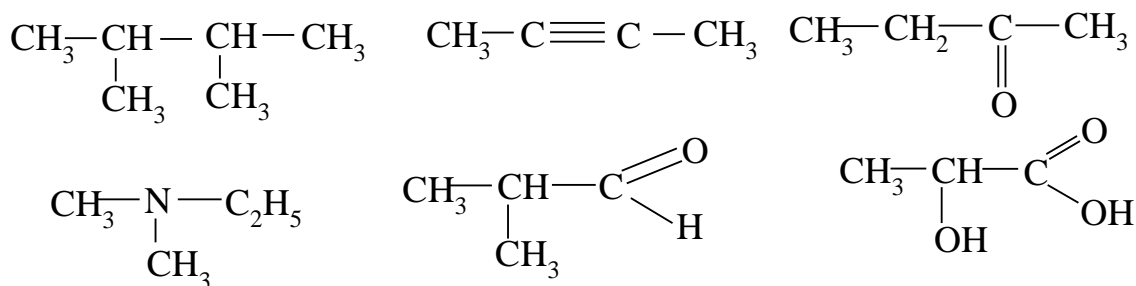
етаноламін

амінокислоти містять карбоксильні і аміногрупи:



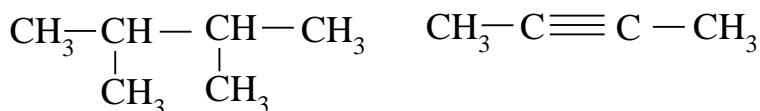
амінооцтова кислота

Завдання №3. Назвіть по радикало-функціональній номенклатурі:



Еталон рішення. Органічна хімія, яка описує мільйони сполук, вимагає точної і чіткої номенклатури, щоб кожній речовині відповідала одна назва. На ранньому етапі розвитку хімії сполукам давалися назви, пов'язані в основному з джерелом отримання. Такі назви і досі є загальноприйнятими: оцтова кислота, молочна кислота, ацетон та ін. По мірі зростання числа нових сполук їм стали давати назви, що пов'язані з будовою. Так з'явилася радикало-функціональна номенклатура.

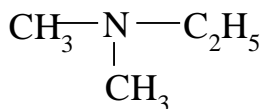
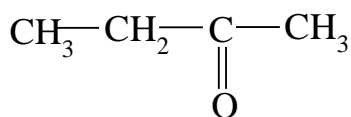
Назви вуглеводнів походять від назви першого члена відповідного гомологічного ряду із зазначенням замісників:



диметилізопропілметан

диметилацетилен

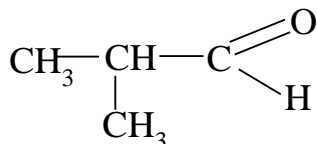
Кетони та аміни називають згідно вуглеводневих радикалів, що входять до складу:



метилетилкетон

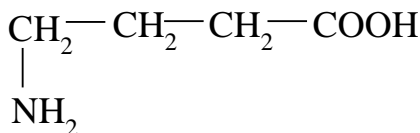
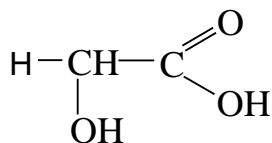
диметилетиламін

Назви альдегідів походять від назви відповідних кислот:



ізомасляний альдегід

Назви гетерофункціональних сполук, що містять карбоксильну групу, утворюються від назв відповідних кислот із зазначенням інших функціональних груп, причому взаємне розташування функцій позначається літерами грецького алфавіту:

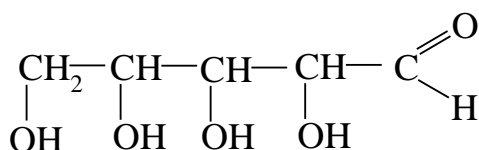
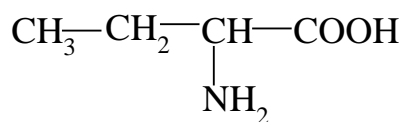
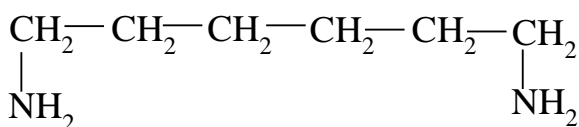
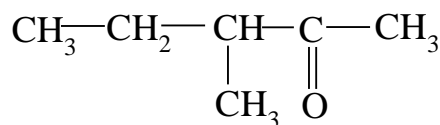
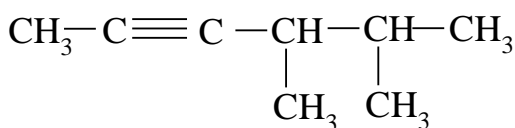


α -гідроксипропіонова кислота

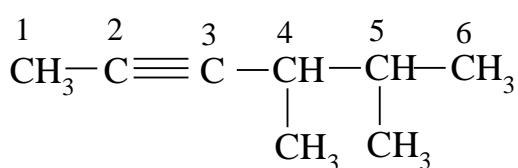
γ -аміномасляна кислота

Радикально-функціональну номенклатуру доцільно застосовувати для сполук, що мають відносно просту будову. Для сполук з великим числом вуглецевих атомів не всі ізомери можуть бути названі з її допомогою.

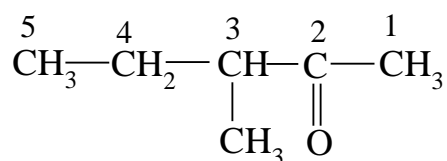
Завдання № 4. Назвіть по замісній номенклатурі ІЮПАК:



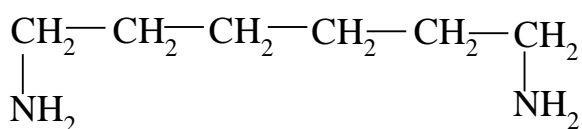
Еталон рішення. На міжнародних хімічних з'їздах була розроблена і запропонована в якості офіційної наукової номенклатури замісна номенклатура ІЮПАК. В основу назви сполуки по цій номенклатурі покладена найбільш довгий вуглецевий ланцюг молекули. Назви насичених вуглеводнів закінчуються на -ан, вуглеводнів з подвійним зв'язком на -ен, з потрійною – на -ін. Сполуки інших класів розрізняються закінченнями, доданими до назви відповідного вуглеводню. Зокрема, спирти мають закінчення -ол, альдегіди -аль, кетони -он, кислоти - овая кислота, аміни - приставку аміно-. Сполуки, що наведені в умові задачі, мають такі назви:



4,5-диметил-2-гексін

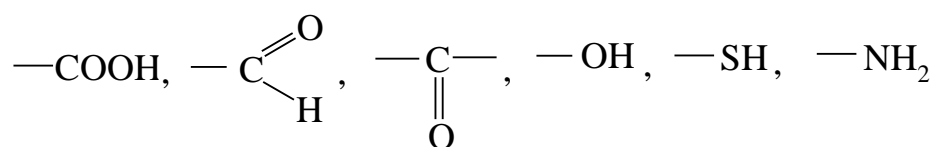


3-метилпентанон-2

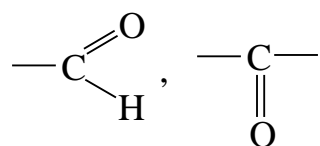


1,6-діаміногексан

У гетерофункціональних сполук існує порядок старшинства, по мірі убування якого функціональні групи розташовуються в такій послідовності:



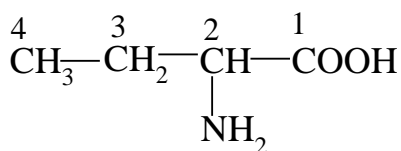
Назву старшої функціональної групи позначають закінченням відповідного класу, а молодшої – приставками:



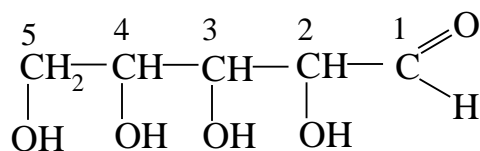
– оксо;

-OH – гідрокси, -SH – меркапто, -NH₂ – аміно.

Нижче наведено назви гетерофункціональних сполук по замісній номенклатурі ІЮПАК:



2-амінобутанова кислота



2,3,4,5-тетрагідроксипентаналь

Завдання № 5. Визначте вид гібридизації всіх атомів вуглецю в молекулах масляної (бутанової) кислоти та піридину.

Еталон рішення. Органічна хімія - це хімія сполук вуглецю. Природно, що властивості органічних сполук багато у чому визначаються електронною будовою атому вуглецю і природою його хімічних зв'язків.

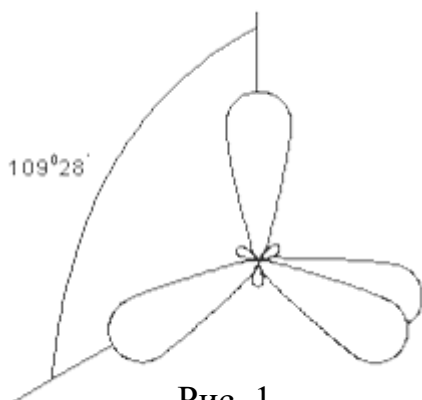


Рис. 1

У збудженому стані ($1s^2 2s^1 2p^3$) атом вуглецю має чотири неспарених електронів і, отже, може утворити чотири ковалентні зв'язки. При цьому всі зв'язки в структурах типу CX_4 рівноцінні. Для пояснення цього явища Полінг ввів поняття "гібридизація" - своєрідне взаємодія близьких по енергії орбіталей з утворенням так званих гібридних орбіталей з більш низькою енергією. Для атома вуглецю можливі три різних типи

гібридизації.

1. sp^3 -гібридизація, при якій взаємодіють одна s- і три p-орбіталі і утворюються чотири енергетично рівноцінні гібридні орбіталі, що мають форму об'ємних вісімок з неоднаковими лопатями (рис. 1).

Найбільше віддалення електронів відповідає направленню гібридних орбіталей до вершин правильного тетраедра під кутом $109^\circ 28'$. Атоми вуглецю, не пов'язані з іншими атомами кратними зв'язками, знаходяться в sp^3 -гібридному стані і орбіталі мають просторову конфігурацію. Хімічні зв'язки в цьому випадку утворюються за рахунок осового перекривання гібридних орбіталей атому вуглецю з орбіталями сусідніх атомів.

В результаті утворюються σ -зв'язки, в яких максимальна електронна густина знаходиться між ядрами атомів на прямій, що сполучає їх. Типовими сполуками, в яких атом вуглецю знаходиться в sp^3 -гібридному стані, є насичені вуглеводні.

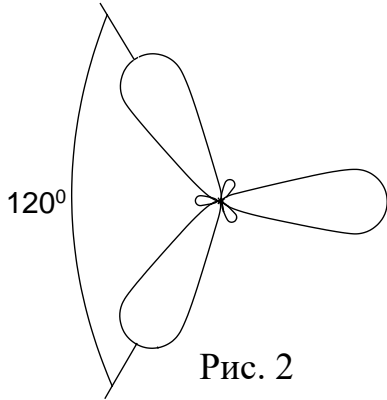


Рис. 2

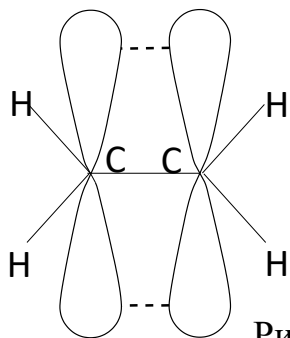


Рис. 3

2. sp^2 -Гібридизація, при якій взаємодіють одна s і дві p -орбіталі з утворенням трьох гібридних орбіталей, осі котрих розташовані в одній площині і направлені з центру трикутника до його вершин під кутом 120° (рис.2). Напрямок негібридної p -орбіталі є перпендикулярний площині, в якій розташовані гібридні орбіталі. При формуванні ковалентних зв'язків між атомами вуглецю в стані sp^2 -гібридизації мають місце осьове перекривання гібридних орбіталей і бічне перекривання негібридної p -орбіталі (рис. 3). У послідньому випадку утворюється π - зв'язок, електронна хмара якого розташована вище і нижче площині σ -зв'язків. Типовими сполуками, у котрих атоми вуглецю знаходяться у стані sp^2 -гібридизації є

етилен і його гомологи (алкени).

3. sp -Гібридизація, при якій взаємодіють одна s - і одна p -орбіталь і утворюються дві гібридні орбіталі. Вони розташовані лінійно під кутом 180° . Дві негібридні p -орбіталі, що залишилися, розташовані у взаємно перпендикулярних площинах. При з'єднанні двох атомів вуглецю в стані sp -гібридизації між ними утворюється один σ - і два π -зв'язка (рис. 4).

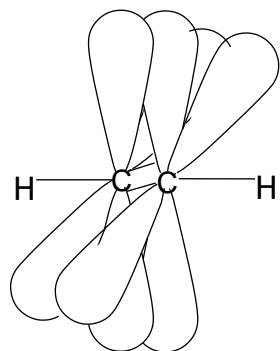
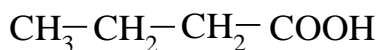


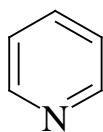
Рис. 4

sp -Гібридизація вуглецевих атомів реалізується в ацетилені і його гомологах (алкінах). У молекулі масляної кислоти атоми вуглецю в радикалі пов'язані з іншими атомами чотирма σ -зв'язками, отже, знаходяться в стані sp^3 -гібридизації.



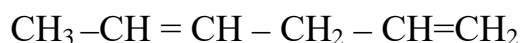
Атом вуглецю карбоксильної групи утворює три σ -зв'язка і один π -зв'язок, тобто знаходиться в стані sp^2 -гібридизації.

У молекулі піридину всі атоми вуглецю знаходяться в стані sp^2 -гібридизації.



Завдання № 6. Дайте визначення поняття "супряження". Які атоми беруть участь в утворенні сполучених систем у молекулах 1,3-бутадієну, бензолу і хлористого вінілу?

Еталон рішення. Електронна будова молекул, що містять кілька кратних зв'язків, визначається їх взаємним розташуванням. Якщо між кратними зв'язками знаходиться хоча б один sp^3 -гібридний атом вуглецю, то такі зв'язки називаються ізольованими:



1,4-гексадієн

За властивостями такі сполуки подібні до етилену. Якщо ж атоми вуглецю, що пов'язані кратними зв'язками з іншими атомами, з'єднані між собою одним простим зв'язком, то такі системи називаються супряженими, а кратні зв'язки – супряженими зв'язками. Типовим прикладом супряженої системи є 1,3-бутадієн. $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{CH} = \text{CH}_2$. У цієї сполуки всі чотири атоми вуглецю знаходяться в стані sp^2 -гібридизації і, отже, кожен з них утворює три σ -зв'язки, що лежать в одній площині під кутом 120° , і має по одній p -орбіталі, які розташовані перпендикулярно до площині σ -скелету (рис. 5).

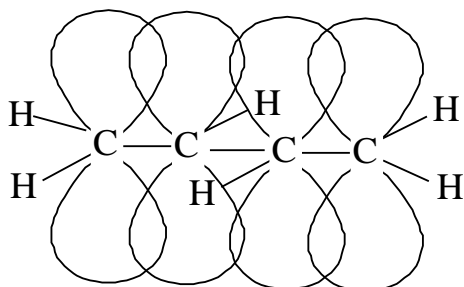


Рис. 5

Бічне перекривання цих чотирьох p -орбіталей призводить до утворення π -електронної хмари, що є загальною для всієї молекули. Сказане вище підтверджується електронно-графічними дослідженнями, котрі показують, що довжина зв'язку між першим і другим, а також між третім і четвертим атомами вуглецю дорівнює 0,136 нм, тобто вона дещо більше, ніж довжина подвійного зв'язку. Відстань між другим і третім атомами – 0,148 нм, що менше довжини одинарного зв'язку.

У сполученої системі π -електрони не закріплені попарно в певних зв'язках, а делокалізовані, тобто розташовані по всій системі. Делокалізація π -електронів супроводжується зменшенням енергії системи. Так, супряжена система зв'язків 1,3-бутадієну має меншій запас енергії, ніж система з двома ізольованими

подвійними зв'язками. **Виграш енергії, що є результатом делокалізації електронів в супряженій системі і призводить до стабілізації молекули, називається енергією супряження.** Багато біологічно активних речовин містять супряжені системи: гем – небілкова частина гемоглобіну крові, вітамін А, нуклеїнові основи (аденін, гуанін, цистеїн, тимін, урацил) та ін.

Прикладом замкнутих супряжених систем є ароматичні і багато гетероциклічних сполук. У молекулі бензолу все атоми вуглецю знаходяться в стані sp^2 -гібридизації, утворюючи по три σ -зв'язку, що лежать в одній площині під кутом 120° , шість p -електронів негібридних орбіталей утворюють загальну електронну хмару, здійснюючи кругове супряження (рис. 6). У молекулі бензолу довжина всіх вуглець-вуглецевих зв'язків однакова і дорівнює 0,139 нм. Енергія супряження бензолу достатньо велика - 227,8 кДж / моль. Цим пояснюється велика стійкість молекули бензолу. У розглянутих випадках супряжена система утворена перекриванням орбіталей π -зв'язків. Такий вид супряження називається π, π -супряженням. В органічних сполуках можуть утворюватися також p, π -супряжені системи, коли в супряження вступає π -орбіталь кратною зв'язку і p -орбіталь замісника. Наприклад, у молекулі хлористого вінілу $H_2C=CH-Cl$ у супряження вступає p -орбіталь хлору, що має неподілену пару електронів.

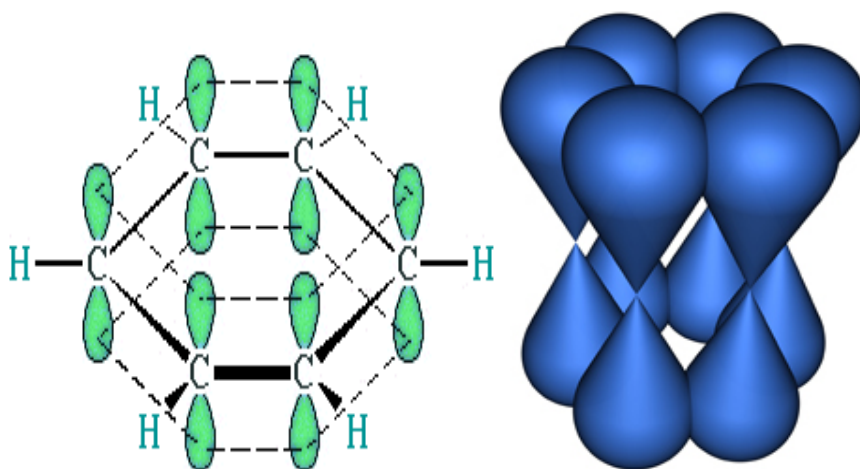


Рис. 6

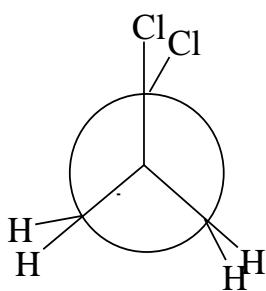
Завдання № 7 Зобразіть затулену та загальмовану конформації 1,2-дихлоретану. Яка з них володіє меншою енергією?

Еталон рішення. Взаємне розташування атомів, з'єднаних тільки σ -зв'язком, не є жорстким, тому що атоми можуть повертатися навколо осі, що з'єднує їх. Утворені при цьому форми молекул називаються *конформації*. Це різні форми молекул однієї і тієї ж речовини. Будь-яка конкретна конформація є лише тимчасовим станом молекул, які безперервно переходять з однієї конформації в іншу. При цьому більшість молекул знаходяться у вигляді енергетично більш

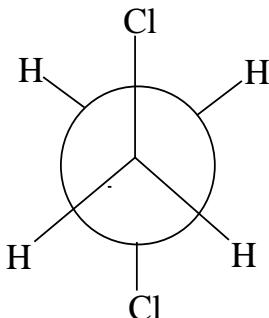
вигідних конформацій, тобто в яких незв'язані атоми найбільш віддалені один від одного.

Конформації 1,2-дихлоретану можуть бути зображені за допомогою проекційних формул Ньюмена, що виходять при перенесенні на площину проекції молекули уподовж С-С зв'язку.

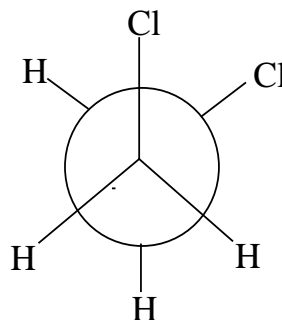
Конформація, в якій замісники (атоми хлору) знаходяться на мінімальній відстані і затуляють один одного, називається заслоненою. Максимальному видаленню замісників відповідає загальмована конформація. Решта конформації називаються скошеними.



затулена



загальмована



скошена

Завдання № 8. Зобразіть найбільш вигідну конформацію метилциклогексану.

Еталон рішення. Цикли, що утворені атомами вуглецю в sp^3 -гібридному стані, не можуть бути плоскими (крім циклопропану), так як не буде збережена тетраедрична конфігурація. У зв'язку з тим, що у перших двох представників насичених циклічних вуглеводнів – циклопропану і циклобутану, кут, утворений прямими, що з'єднують ядра атомів, менше тетраедричних і дорівнює відповідно 60° і 90° , область максимального перекривання атомних орбіталей атомів вуглецю розташовується не на цих прямих, а з зовнішнього боку від них (рис. 7). Такі σ -зв'язки (так звані "бананові" зв'язки) за характером розташування максимальної електронної площині подібні до π -зв'язків.

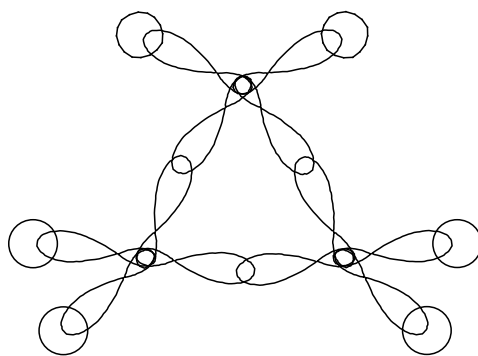


Рис. 7

Найменше відхилення валентного кута від тетраедричних спостерігається в циклопентані – $0,44^\circ$.

Молекула циклогексану не може мати форму правильного шестикутника, так як у цьому випадку кут між зв'язками був би рівний 120° . Основними конформаціями циклогексану, що позбавлені кутових напружень, є форма "крісла" (рис. 8) і форма "човна".

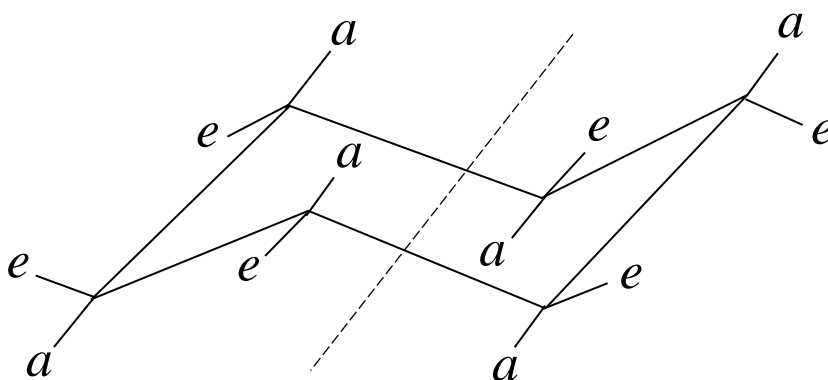


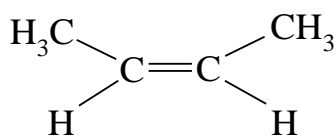
Рис. 8

При цьому велика кількість молекул знаходиться у формі більш енергетично вигідної конформації крісла. Дванадцять зв'язків С-Н в молекулі циклогексану можуть бути поділені на дві групи. Шість аксіальних зв'язків (символ "а" рис. 8) спрямовані перпендикулярно циклу поперемінно вгору і вниз. Інші шість зв'язків направлені по периферії циклу, утворюючи з віссю симетрії кут $109^\circ 28'$, їх називають екваторіальними (символ "е"). При наявності в молекулі циклогексану якогось замісника він може займати аксіальне або екваторіальне положення. Ці форми є конформери. Екваторіальне положення замісника енергетично вигідніше і тому його існування більш імовірно. Найбільш вигідною

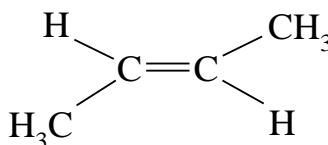
конформацією метилциклогексану буде конформація "крісла" з екваторіальним розташуванням метильної групи.

Завдання № 9. У чому відмінність цис- і транс-ізомерів 2-бутена?

Еталон рішення. На відміну від одинарного, подвійний зв'язок виключає можливість вільного обертання пов'язаних атомів. Заміщення атомів водню у sp^2 -гібридизованого атому вуглеця може відбуватися двояко: по одну або по різні сторони від подвійного зв'язку:



цис-2-бутен



транс-2-бутен

Цей вид ізомерії отримав назву геометричної або цис-транс-ізомерії. Ізомери, в яких замісники розташовані по одну сторону від подвійного зв'язку, називаються цис-ізомерами, по різну – транс-ізомерами. Цис- і транс-ізомери відрізняються не тільки просторовою будовою, але і деякими фізичними, хімічними і фізіологічними властивостями.

Цис-транс-ізомерія досить часто зустрічається в біологічно-активних сполуках. Так, ненасичені вищі жирні кислоти (структурні компоненти ліпідів) мають цис-конформацію, що визначає їх більш компактне розташування в клітинних мембранах.

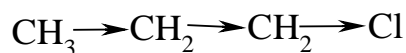
Завдання № 10. Визначте вид та знак електронних ефектів в молекулах хлороцтової кислоти і бензойного альдегіду.

Еталон рішення. При вивченні властивостей органічних сполук важливо не тільки знати їх електронну будову, але і враховувати взаємний вплив атомів у молекулі. Вперше ідеї про взаємний вплив атомів були висловлені А.М. Бутлеровим і розвинені його учнем В.В. Марковниковим. В теперішній час визначені якісні залежності між будовою і реакційною здатністю сполук, що названі ефектами. Найбільш важливими є електронні і просторові (стеричні) ефекти.

Наявність у молекулі атомів, що істотно відрізняються за електронегативністю від атома вуглецю, веде до поляризації зв'язку між ними, що в свою чергу викликає поляризацію сусідніх С-С і С-Н зв'язків, яка поступово «згасає» по мірі віддалення від атома, що викликає поляризацію.

Зміщення електронної густини σ -зв'язку до одного з атомів, що поєднані, передається по ланцюгу σ -зв'язків в молекулі і називається індуктивним ефектом (I-ефектом).

Напрямок зміщення електронної густини позначається стрілкою, що збігається з валентної рисою і спрямована в бік більш електронегативного атома:

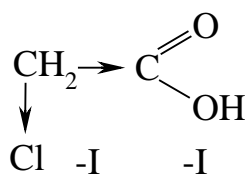


Якщо електронна густина зміщена від атома вуглецю до замісника, то індуктивний ефект вважається негативним (-I-ефект), якщо ж навпаки, то позитивним (+ I-ефект).

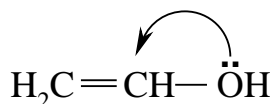
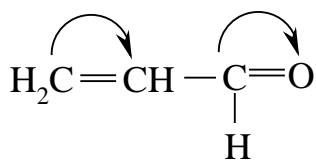
Позитивним індуктивним ефектом володіють електронодонорні замісники – атоми металів і алкільні групи $-\text{CH}_3$, $-\text{C}_2\text{H}_5$ та ін. В останньому випадку +I-ефект обумовлений незначною полярністю C-H зв'язків (електронегативність атомів вуглецю 2,5, а водню 2,1 за шкалою Полінга). Із зростанням числа вуглецевих атомів у алкільному радикалі + I-ефект зростає:



Негативний індуктивний ефект проявляють електроноакцепторні замісники: $-\text{OH}$, $>\text{C}=\text{O}$, $-\text{COOH}$, $-\text{NH}_2$, $-\text{OR}$, галогени. Індуктивний ефект впливає на властивості органічних сполук. Так, заміщення атома водню в радикалі оцтової кислоти хлором, що володіє -I-ефектом, приводить до збільшення кислотності внаслідок зміщення електронної густини до атома галогену:

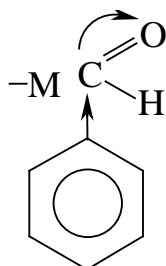


Якщо в молекулі є система супряжених зв'язків або кратних зв'язків і при ній стоїть замісник з неподіленою електронною парою, то передача впливу відбувається по системі π -зв'язків і тоді ефект замісника називається мезомерним ефектом або ефектом супряження (M-ефект). Мезомерний ефект проявляється в тих випадках, коли замісник має або π -зв'язки ($>\text{C}=\text{O}$, $-\text{COOH}$, $-\text{NO}_2$) або неподілені пари електронів ($-\text{OH}$, $-\text{NH}_2$). Якщо такі замісники з'єднані з атомами вуглецю в стані sp^2 - або sp -гібридизації, то електрони π -зв'язків або спарені електрони замісників виявляються супряженими з електронами π -зв'язку вуглецевого скелета. Мезомерний ефект позначається вигнутими стрілками:



Початок стрілки вказує, які π - або p -електрони зміщуються, а кінець – зв'язок або атоми, до яких вони зміщуються. Електрони π -зв'язків володіють великою рухливістю, тому М-ефект передається з одного кінця супряженої системи на інший практично без згасання.

Якщо замісник відтягує електронну густину з супряженої системи, то мезомерний ефект вважається негативним (-М-ефектом). Якщо замісник віддає свою електронну пару для участі у загальному супряженні, мезомерний ефект вважається позитивним (+М-ефект). Негативним мезомерним ефектом володіють замісники, які мають π -зв'язки ($>\text{C}=\text{O}$, $-\text{COOH}$, $-\text{NO}_2$), а позитивним – замісники з неподіленою електронною парою ($-\text{OH}$, $-\text{NH}_2$, галогени). У молекулі бензойного альдегіду карбонільна група знаходиться в π,π -супряженні з ароматичною системою і завдяки наявності атомів кисню проявляє негативний індуктивний і негативний мезомерний ефекти.



Питання та вправи

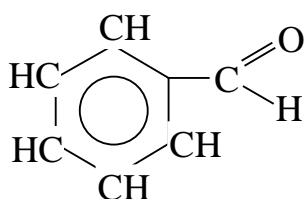
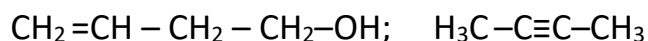
№1

1. Наведіть формули ізомерів карбонової кислоти, що має склад: $C_4H_8O_2$. Назвіть їх за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть по радикало-функціональній номенклатурі і номенклатурі ІЮПАК аміналон - речовину, яка бере участь в обмінних процесах головного мозку, що має будову $H_2N-CH_2-CH_2-CH_2-COOH$.

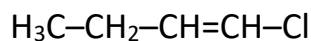
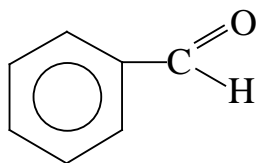
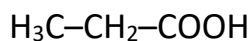
3. Напишіть структурну формулу сполуки 1,1,2-трихлоретан, що застосовується для короткочасного наркозу. До якого класу вона належить?

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у сполуках:



2. Зобразіть циклогександіол-1,3 у конформації "крісла" з найбільш вигідним розташуванням замісників.

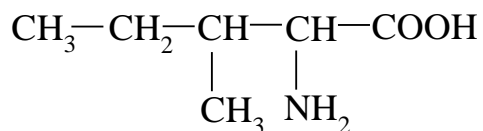
3. Визначте вид і знак електронних ефектів замісників у сполуках:



№ 2

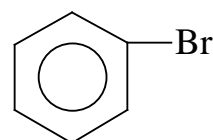
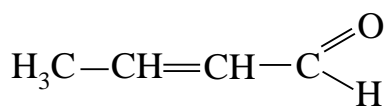
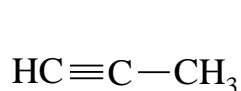
1. Наведіть формули ізомерів бутилового спирту (C₄H₉OH). Назвіть їх за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК одну з амінокислот, що входить до складу білків та має будову:

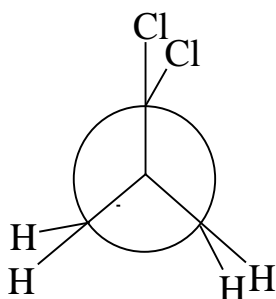


3. Напишіть структурну формулу 2-оксобутандіової кислоти, яка є проміжним продуктом вуглеводного обміну (щавелевоцтова кислота).

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у сполуках:



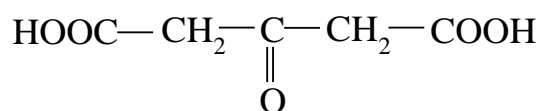
2. Назвіть конформацію, що зображено у проекції Ньюмена. Якій сполуці вона відповідає?



3. Наведіть будову піролу та пояснить, чому пірол є ароматичною сполукою.

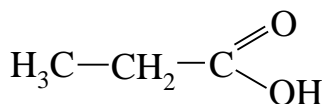
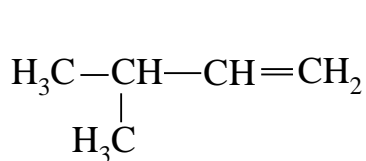
1. Наведіть три формули ізомерів альдегіду, що має склад $C_5H_{10}O$. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК ацетондикарбонову кислоту, яка належить до кетонних тіл та знаходиться в сечі хворих на цукровий діабет.



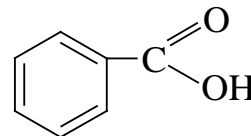
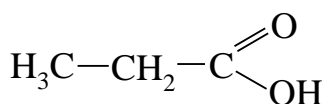
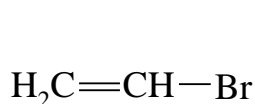
3. Напишіть структурну формулу ксиліту, що має ІЮПАК назву пентанпентаол-1,2,3,4,5 та використовується як замісник цукру для хворих на цукровий діабет.

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у сполуках:



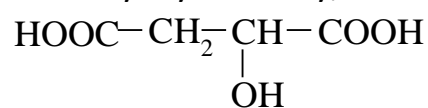
2. Зобразіть 1,2-диметилциклогексан у конформації "крісла" з найбільш вигідним розташуванням замісників.

3. Визначте вид і знак електронних ефектів замісників у сполуках:



1. Наведіть три формули ізомерів спирту, що має склад: $C_5H_{11}OH$. Назвіть їх за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за замісною номенклатурою ІЮПАК яблучну кислоту, яка бере

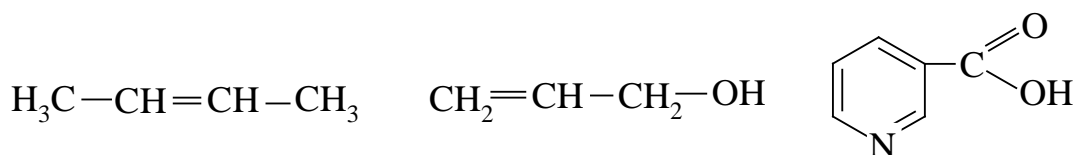


участь у циклі трикарбонових кислот (цикл Кребса).

Вкажіть функціональні групи в молекулі яблучної кислоти.

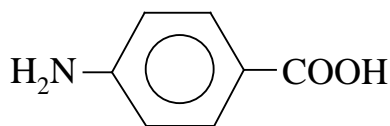
3. Напишіть структурну формулу о-гідроксибензойної (саліцилової) кислоти, яка є родоначальником групи лікарських речовин, що володіють аналгетичною, жарознижувальною і протизапальною діями.

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у сполуках:



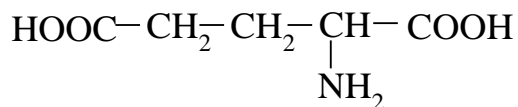
2. Зобразіть у проекції Ньюмена загальмовану конформацію етанолу. Якому енергетичному стану (максимуму чи мінімуму енергії) вона відповідає?

3. Визначте вид і знак електронних ефектів у п-амінобензойної кислоти:



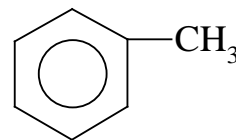
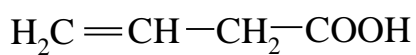
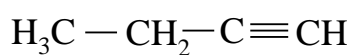
1. Наведіть приклади первинного, вторинного та третинного амінів. Назвіть по радикало-функціональній номенклатурі.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК глутамінову кислоту, що застосовується при лікуванні захворювань центральної нервової системи та має будову:



3. Напишіть структурну формулу гліцерину – спирту, що входить до складу жирів, та має назву – пропантриол-1,2,3.

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у сполуках:



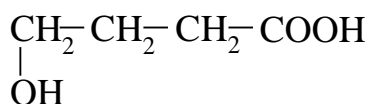
2. Зобразіть найбільш вигідну конформацію циклогексанолу.

3. Наведіть будову піридину та пояснить, чому піридин є ароматичною сполукою.

№ 6

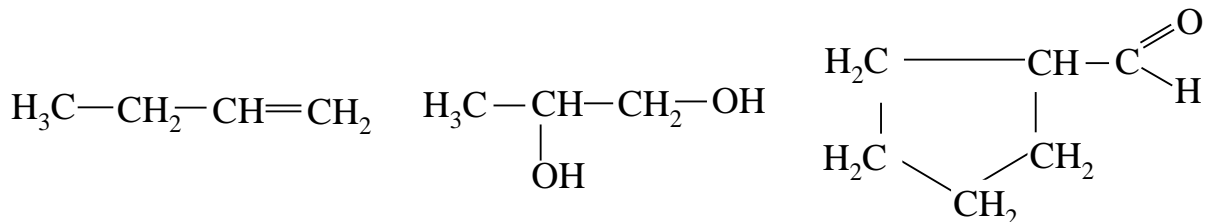
1. Наведіть три формули ізомерів кетону, що має склад $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК γ -гідроксимасляну кислоту, що застосовується в анестезіології та має будову:

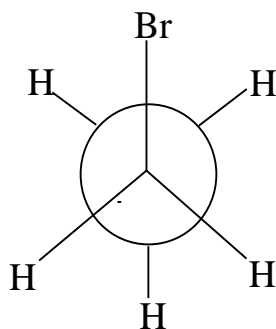


3. Напишіть структурну формулу пеніциламіну, що застосовується при отруєнні важкими металами та є 2-аміно-3-меркапто-3-метилбутановою кислотою.

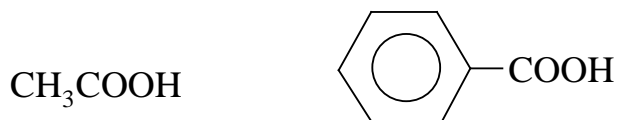
1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у сполуках:



2. Назвіть конформацію, що зображено у проекції Ньюмена. Якій сполуці вона відповідає?



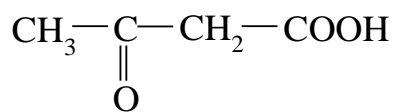
3. Визначте вид і знак електронних ефектів у молекулах оцтової та бензойної кислот:



№ 7

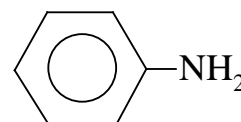
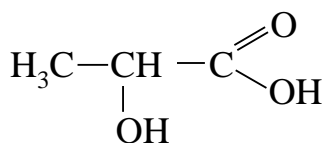
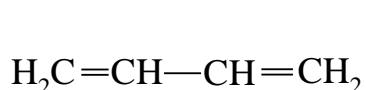
1. Наведіть три формули ізомерів гексанолу $\text{C}_6\text{H}_{13}\text{OH}$. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК ацетооцтову кислоту, яка утворюється в процесі метаболізму вищих жирних кислот і має будову



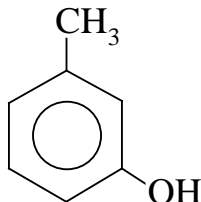
3. Напишіть структурну формулу нікотинової кислоти (вітаміну РР), що є β-піридинкарбоною кислотою.

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у сполуках:



2. Зобразіть найбільш вигідну конформацію бромциклогексану.

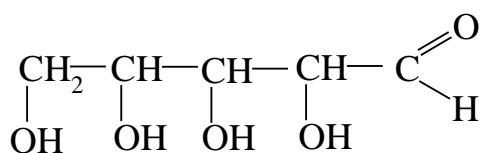
3. Визначте вид і знак електронних ефектів у м-крезолі:



№ 8

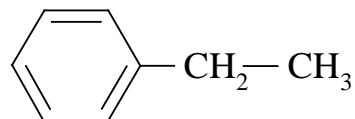
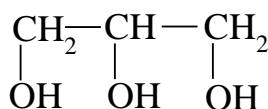
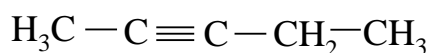
1. Наведіть три формули ізомерів альдегіду, що має склад $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}$. Назвіть їх за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК моносахарид рибозу - один з компонентів рибонуклеїнових кислот, що має будову:

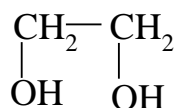


3. Напишіть структурну формулу 2-аміно-3-гідроксипропанової кислоти (амінокислоти серін, що входить до складу білка).

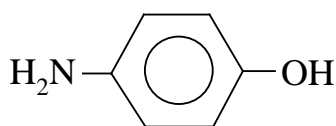
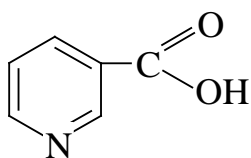
1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у сполуках:



2. Зобразіть у проекції Ньюмена найбільш вигідну конформацію етиленгліколю:



3. Які атоми беруть участь у створенні супряжених систем у таких молекулах:



?

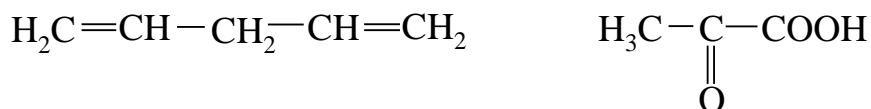
№ 9

1. Наведіть три формули ізомерів кетону, що має склад $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}$. Назвіть їх за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК бурштинову кислоту, яка утворюється в процесі вуглецевого обміну і має будову $\text{HOOC}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{COOH}$

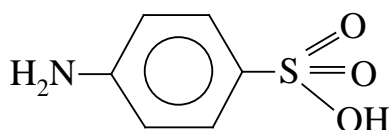
3. Напишіть структурну формулу п-амінобензойної кислоти, яка є родоначальником лікарських речовин анестезуючої дії.

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у молекулах:



2. Зобразіть будову та переважну конформацію метилциклогексану.

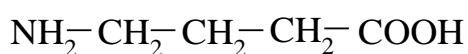
3. Визначте електронні ефекти і види супряження замісників із бензольним кільцем у молекулі сульфанілової кислоти (основи великої групи сульфаніламідних препаратів):



№ 10

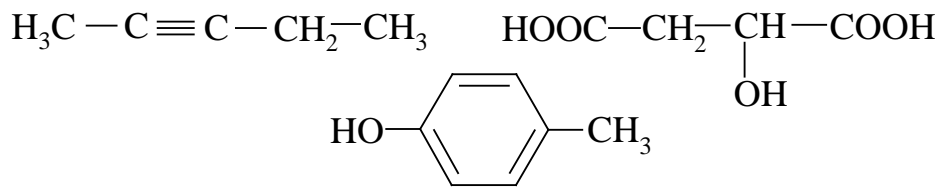
1. Наведіть три формули ізомерів карбонової кислоти, що має склад: $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК γ -аміномасляну кислоту, яка бере участь в обмінних процесах головного мозку:



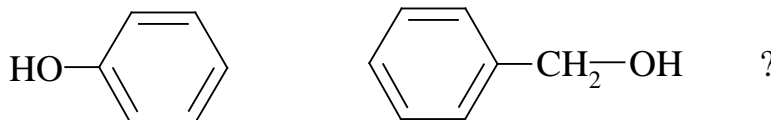
3. Напишіть структурну формулу кадаверину (1,5-діамінопентан), що утворюється при гнитті білкових тіл.

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у молекулах:



2. Зобразіть будову та кріслоподібну конформацію молекули міоінозиту (п'ять OH-груп займають екваторіальне положення), що знаходиться в м'язах та є циклогексангексаолом-1,2,3,4,5,6.

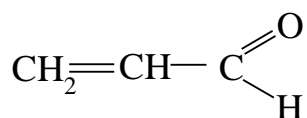
3. Як впливає гідроксильна група на електронну густину бензольного кільця у таких сполуках:



№ 11

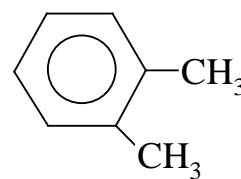
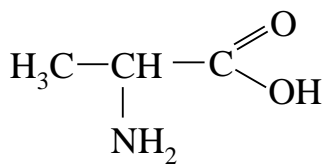
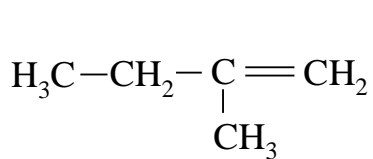
1. Наведіть три формули ізомерів октанолу $\text{C}_8\text{H}_{17}\text{OH}$. Назвіть їх за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК проміжний продукт в синтезі ряду сполук - акролеїн:



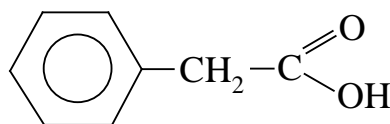
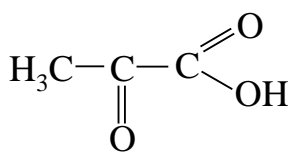
3. Напишіть структурну формулу сполуки п-амінофенолу (4-аміно-1-гідроксибензол), що лежить в основі однієї з груп жарознижувальних і болезаспокійливих засобів. Назвіть функціональні групи.

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у молекулах:



2. Зобразіть у проекції Ньюмена загальмовану конформацію 2-аміноетанолу-1 (коламіну). Якому енергетичному стану вона відповідає?

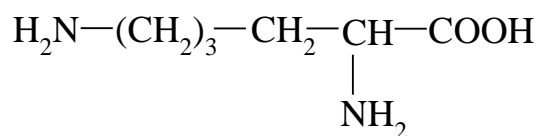
3. Визначте вид і знак електронних ефектів замісників у сполуках:



№ 12

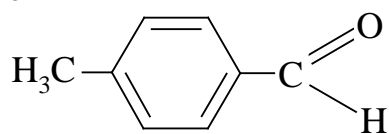
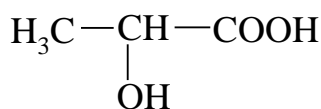
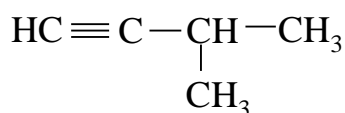
1. Наведіть три формули ізомерів альдегіду, що має склад $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}$. Назвіть їх за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК амінокислоту лізин, що входить до складу пептидів і білків і має будову:



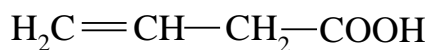
3. Напишіть структурну формулу 5-гідроксипентаналю.

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у молекулах:



2. Зобразіть будову та переважну конформацію молекули аміноциклогексану.

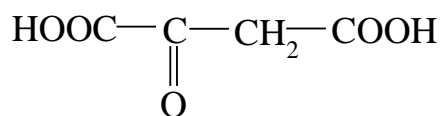
3. Визначте вид і знак електронних ефектів замісників у сполуках:



№ 13

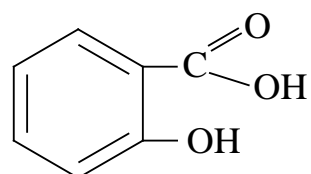
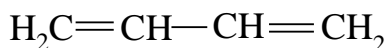
1. Наведіть три формули ізомерів кетону, що має склад: $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}$. Назвіть їх за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК одну з кислот, що утворюється в циклі Кребса, яка має будову



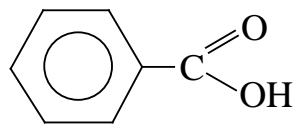
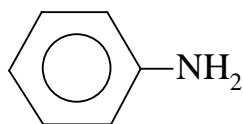
3. Напишіть структурну формулу цистеїну (2-аміно-3-меркапто-пропанової кислоти), який є однією з амінокислот і входить до складу білків.

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у молекулах:



2. Зобразіть переважну конформацію 1,2-дибромциклогексану.

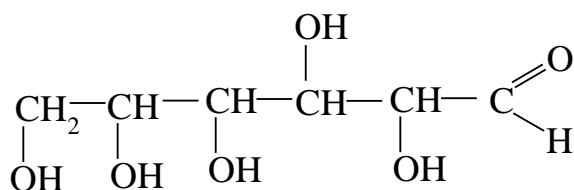
3. Як впливають замісники на електронну густину бензольного кільця у таких сполуках:



№ 14

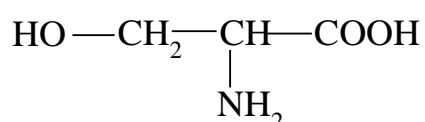
1. Наведіть три формули ізомерів карбонової кислоти, що має склад: $C_8H_{16}O_2$. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК моносахарид глюкозу, що має будову:



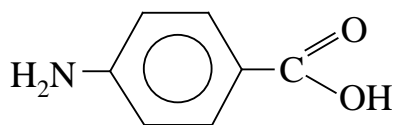
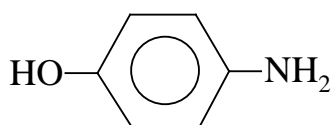
3. Напишіть структурну формулу 3-оксопентандіової кислоти, що входить до складу кетонів тіл, які визначаються в сечі хворих на цукровий діабет.

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у молекулах:



2. Зобразіть у проекції Ньюмена затулену та загальмовану конформації 1,2-дихлоретану. Котра має меншу енергію?

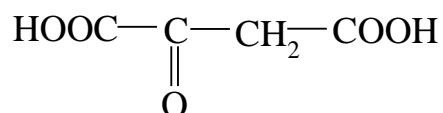
3. Визначте вид і знак електронних ефектів замісників у сполуках:



№ 15

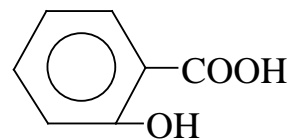
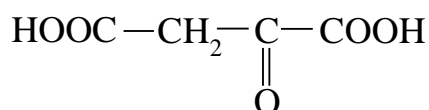
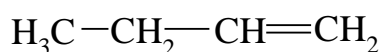
1. Наведіть формули ізомерів бутаналу. Назвіть їх за номенклатурою ІЮПАК.

2. Назвіть за номенклатурою ІЮПАК проміжний продукт вуглеводного обміну - щавлевооцтову кислоту, що має будову:



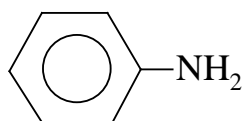
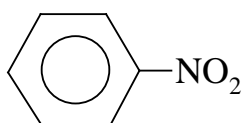
3. Напишіть структурну формулу спирту сорбіту (гексангексаол-1, 2,3,4,5,6), що є замісником цукру для діабетиків.

1. Визначте тип гібридизації всіх атомів вуглецю у молекулах:



2. Зобразіть будову та переважну конформацію гексахлорциклогексану (гексахлорану).

3. Як впливають замісники на електронну густину бензольного кільця у таких сполуках:



?

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Біологічна і біоорганічна хімія: базовий підручник: у 2 кн./кол. авт.; за ред. чл.-кор. НАМН України, проф. Б.С. Зіменкавського, проф. І.В. Ніженковської. – Кн. 1: Біоорганічна хімія / [Б. С. Зіменковський, В.А. Музиченко, І.В. Ніженковська, Г.О. Сирова]; за ред. Б.С. Зіменковського, І.В. Ніженковської. – К.: ВСВ «Медицина», 2014. – 272с.
2. Основи біоорганічної хімії (навчальний посібник) / Сирова Г.О., Петюніна В.М., Макаров В.О., Лук'янова Л.В.- «Полосата типографія» - 2018 - 238с.
3. Класифікація, номенклатура та ізомерія біоорганічних сполук. Природа хімічного зв'язку. Просторова будова органічних молекул. Взаємний вплив атомів в молекулах біоорганічних сполук: метод. вказ. для студентів 1 курсу виклад. Сирова Г.О., Петюніна В.М., Макаров В.О. та ін. – 2-е вид., переробл., випр., доп. – Харків: ХНМУ.2018. – 24 с.
4. Конспект лекцій.
5. Основи будови та реакційної здатності органічних сполук: Метод. вказ. для студентів 1-го курсу/уклад. Г.О. Сирова, Л.Г. Шаповал, В.М. Петюніна, Є.Р. Грабовецька, Н.М. Ткачук, В.О. Макаров, С.В. Андреева, С.А. Наконечна, Л.В. Лук'янова, Р.О. Бачинський, С.М. Козуб, Т.С. Тішакова, О.Л. Левашова, Н.В. Вакуленко, Н.М. Чаленко.–Харків: ХНМУ, 2013.– 49 с.

СПИСОК ДОДАТКОВОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Тюкавкина Н.А. Бауков Ю.И. Биоорганическая химия. М.: – Медицина, 1985.
2. Руководство к лабораторным занятиям по биоорганической химии. Под ред. Тюкавкиной Н.А. М.: – Медицина, 1985.
3. Губський Ю.І. Біоорганічна хімія. Вінниця: – Нова книга, 2004.
4. Шаповал Л.Г., Чеховський В.Д., Петюніна В.М. Навчальний посібник з органічної хімії. Харків: – ХДМУ, 1994.
5. Теоретический курс по биологической и биоорганической химии (учебное пособие). Модуль 1. Биологически важные классы биоорганических соединений. Биополимеры и их структурные компоненты / Сырoвая А.О., Шаповал Л.Г., Петюнина В.Н., Ткачук Н.М., Шапарева Л.П., Макаров В.А., Чеховской В.Д., Грабовецкая Е.Р., Бачинский Р.О., Наконечная С.А. – Харьков, ХНМУ. – 2013.

Навчальне видання

Класифікація, номенклатура та ізомерія біоорганічних сполук. Природа хімічного зв'язку. Просторова будова органічних молекул. Взаємний вплив атомів в молекулах біоорганічних сполук.

Методичні вказівки для самостійної роботи студентів 1-го курсу з біологічної та біоорганічної хімії.

Укладачі:

Сирова Ганна Олегівна

Петюніна Валентина Миколаївна

Макаров Володимир Олександрович

Андрєєва Світлана Вікторівна

Лук'янова Лариса Володимирівна

Козуб Світлана Миколаївна

Тішакова Тетяна Станіславівна

Левашова Ольга Леонідівна

Савельєва Олена Валеріївна

Чаленко Наталія Миколаївна

Каліненко Ольга Сергіївна

Завада Оксана Олександрівна

Копотєва Наталія Василівна

Водолаженко Марія Олександрівна

Чистякова Галина Олексіївна

Відповідальний за випуск: Петюніна В.М.