

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ АЦИКЛИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ C₅ С ПОМОЩЬЮ ТЕТРАЭДРИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ И ИХ ГРАФИЧЕСКОЕ ИЗОБРАЖЕНИЕ

М.С.Салахов¹, Б.Т.Багманов², Ф.А.Ахмедова³

^{1,2}Институт полимерных материалов Национальной АН Азербайджана

³Бакинский государственный университет

В статье систематизированы реальные и гипотетические изомеры ациклических углеводородов C₅, даны их графические и тетраэдрические изображения, типы соединений тетраэдрических моделей, наименования по международной номенклатуре и виды гибридных орбиталей.

Известно, что органическая химия тесно связана с молекулярным моделированием, визуализацией молекул и их превращений, а в последнее время с развитием компьютерных технологий формируется целое направление, известное как компьютерная химия. Визуализация с помощью моделей помогает представить молекулы в трехмерном виде, что соответствует их реальным структурам.

Продолжая наши исследования по визуализации углеводородов ряда C₃ и C₄, где показаны графические изображения тетраэдрических моделей и виды их гибридизации, в данной статье эти вопросы рассмотрены применительно к углеводородам C₅ [1-2].

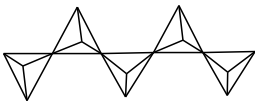
Как правило, в периодической литературе речь идет о веществах, синтезированных и известных в настоящее время. Но среди углеводородов состава C₅ существуют изомеры, которые не были

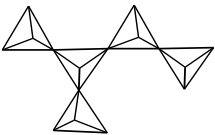
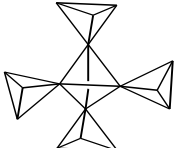
выделены или обнаружены из-за недостаточного высокого уровня эксперимента, хотя теоретически мы не можем отрицать возможность их существования, так как при визуализации таких структур с помощью тетраэдрических моделей не нарушается принцип четырехвалентности углеродного атома [3].

Учитывая этот принцип, рассмотрены все возможные структуры углеводородов ряда C₅, указаны их эмпирические формулы, даны графические и тетраэдрические изображения реальных и гипотетических структур, указаны типы соединения тетраэдрических моделей (вершина, ребро, грань) и типы гибридизации [4-6].

Ниже в таблицах 1,2 в качестве примера приводятся насыщенные и ненасыщенные алифатические углеводороды состава C₅.

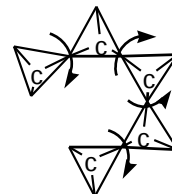
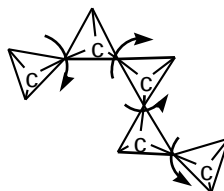
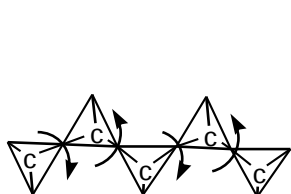
Таблица 1. Насыщенные алифатические углеводороды состава C₅

№ Молек. формула	Графическая формула	Тетраэдрическая модель	Международная номенклатура	Типы соединения тетраэдрических моделей	Гибридные орбитали
1 C ₅ H ₁₂	C—C—C—C—C		н-пентан	C ₅ – 4 верш.	4sp ³ -sp ³

2 C ₅ H ₁₂	$\begin{array}{c} \text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C} \\ \\ \text{C} \end{array}$		изопентан (2-метил- бутан)	C ₅ – 4 верш.	4sp ³ -sp ³
3 C ₅ H ₁₂	$\begin{array}{c} \text{C} \\ \\ \text{C}-\text{C}-\text{C} \\ \\ \text{C} \end{array}$		неопентан (2,2-димер- тилпропан)	C ₅ – 4 верш.	4sp ³ -sp ³

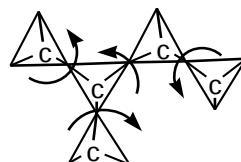
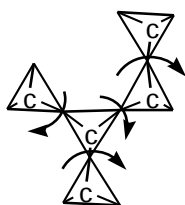
Необходимо отметить, что тетраэдры, соединенные вершинами, могут свободно вращаться по отношению друг к другу, вследствие чего возникают различные конформации молекул. Например, для

н-пентана в отличие от н-бутана имеются две внутренние связи С—С, вокруг каждой из которых можно рассматривать свободное вращение с образованием трех конформаций:

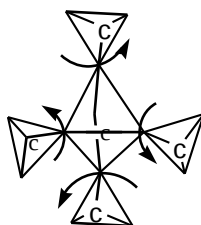


В пентанах с разветвленными цепями проявляются свои конформационные особенности и количество конформеров уменьшается; для 2-метилбутана их два, а в

неопентане вращение тетраэдров вокруг связанных вершин не приводит к принципиальной разнице. Для изопентана:



В случае неопентана:



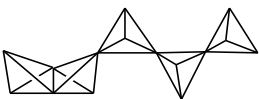
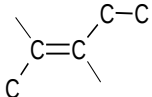
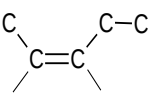
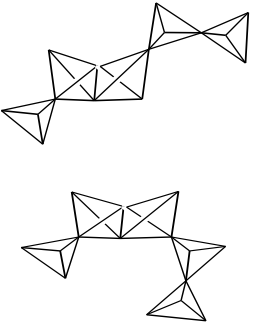
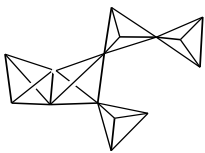
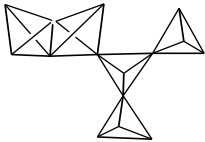
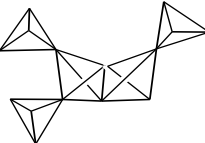
Т.е. тетраэдрические модели построены таким образом, что допускают повороты вокруг произвольно выбранных осей. Они позволяют наблюдателям реально представить строение углеродного скелета,

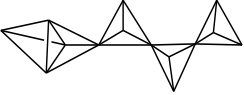
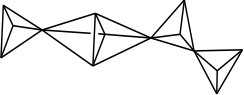
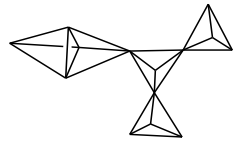
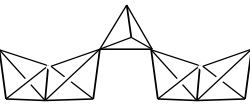
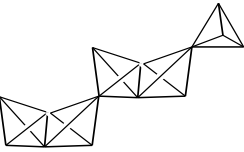
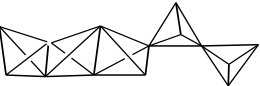
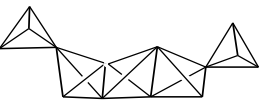
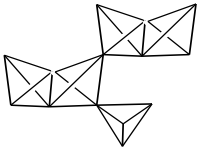
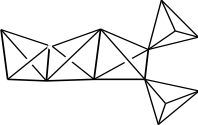
направленность связей при различной гибридизации атома углерода, заторможенные и затененные конформации предельных углеводородов.

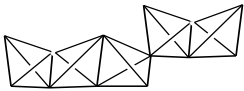
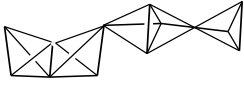
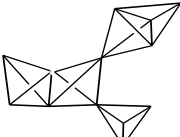
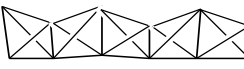
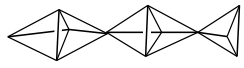
Находящийся в состоянии sp^2 -гибридизации атом углерода является тригональным. В создании конформеров таких соединений участвуют тетраэдрический и тригональный атомы углерода.

Геометрия такой группировки заставляет один из заместителей тетраэдрического углеродного атома обязательно находиться в заслонении с заместителем тригонального углеродного атома.

Таблица 2. Ненасыщенные алифатические углеводороды состава C_5

№ Молек. формула	Графическая формула	Тетраэдрическая модель	Международная номенклатура	Типы соединения тетраэдрических моделей	Гибридные орбитали
1 C_5H_{10}	$C=C-C-C-C$		пентен-1	C_5 – 1 ребро 3 верш.	$1sp^2-sp^2$ $1sp^2-sp^3$ $2sp^3-sp^3$
2 C_5H_{10}	а)  б) 		транс- пентен-2 цис- пентен-2	C_5 – 1 ребро 3 верш.	$1sp^2-sp^2$ $2sp^2-sp^3$ $1sp^3-sp^3$
3 C_5H_{10}	$C=C-C-C$ C		2-метилбу- тен-1	C_5 – 1 ребро 3 верш.	$1sp^2-sp^2$ $2sp^2-sp^3$ $1sp^3-sp^3$
4 C_5H_{10}	$C=C-C-C$ C		3-метил- бутен-1	C_5 – 1 ребро 3 верш.	$1sp^2-sp^2$ $1sp^2-sp^3$ $2sp^3-sp^3$
5 C_5H_{10}	$C-C=C-C$ C		2-метил- бутен-2	C_5 – 1 ребро 3 верш.	$1sp^2-sp^2$ $3sp^3-sp^3$

6 C ₅ H ₈	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}$		пентин-1	C ₅ – 1 грань 3 верш.	1sp-sp 1sp-sp ³ 2sp ³ -sp ³
7 C ₅ H ₈	$\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}-\text{C}$		пентин-2	C ₅ – 1 грань 3 верш.	1sp-sp 2sp-sp ³ 1sp ³ -sp ³
8 C ₅ H ₈	$\begin{array}{c} \text{C}\equiv\text{C}-\text{C}-\text{C} \\ \\ \text{C} \end{array}$		3-метил- бутин-1	C ₅ – 1 грань 3 верш.	1sp-sp 1sp-sp ³ 2sp ³ -sp ³
9 C ₅ H ₈	$\text{C}=\text{C}-\text{C}-\text{C}=\text{C}$		пентадиен-1,4	C ₅ – 2 ребра 2 верш.	2sp ² -sp ² 2sp ³ -sp ²
10 C ₅ H ₈	$\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C}-\text{C}$		пентадиен-1,3	C ₅ – 2 ребра 2 верш.	3sp ² -sp ² 1sp ³ -sp ²
11 C ₅ H ₈	$\text{C}=\text{C}=\text{C}-\text{C}-\text{C}$		пентадиен-1,2	C ₅ – 2 ребра 2 верш.	2sp ² -sp 1sp ³ -sp ² 1sp ³ -sp ³
12 C ₅ H ₈	$\text{C}-\text{C}=\text{C}=\text{C}-\text{C}$		пентадиен-2,3	C ₅ – 2 ребра 2 верш.	2sp ² -sp 2sp ³ -sp ²
13 C ₅ H ₈	$\begin{array}{c} \text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C} \\ \\ \text{C} \end{array}$		2-метил- бутадиен-1,3	C ₅ – 2 ребра 2 верш.	3sp ² -sp ² 1sp ³ -sp ²
14 C ₅ H ₈	$\begin{array}{c} \text{C}=\text{C}=\text{C}-\text{C} \\ \\ \text{C} \end{array}$		3-метил- бутадиен-1,2	C ₅ – 2 ребра 2 верш.	2sp ² -sp 2sp ³ -sp ²

15 C_5H_6	$C=C=C=C=C$		пентатриен-1,2,4	C_5 – 3 ребра 1 верш.	$2sp^2-sp$ $2sp^2-sp^2$
16 C_5H_6	$C=C=C=C-C$		пентатриен-1,2,3	C_5 – 3 ребра 1 верш.	$2sp^2-sp$ $1sp-sp$ $1sp^3-sp^2$
17 C_5H_6	$C=C-C\equiv C-C$		пентен-1-ин-3	C_5 – 1 грань 1 ребро 2 верш.	$1sp^2-sp^2$ $1sp^2-sp$ $1sp-sp$ $1sp^3-sp$
18 C_5H_6	$C=C-C-C\equiv C$		пентен-1-ин-4	C_5 – 1 грань 1 ребро 2 верш.	$1sp^2-sp^2$ $1sp^2-sp^3$ $1sp-sp$
19 C_5H_6	$C=C(C)-C\equiv C$		2-метил- бутен-1-ин-3	C_5 – 1 грань 1 ребро 2 верш.	$1sp^2-sp^2$ $1sp^2-sp$ $1sp-sp$ $1sp^3-sp^2$
20 C_5H_4	$C=C=C=C=C$		пентатетраен	C_5 – 1 ребро	$2sp^2-sp$ $2sp-sp$
21 C_5H_4	$C\equiv C-C-C\equiv C$		пентадиин-1,4	C_5 – 2 грани 2 ребра	$2sp-sp$ $2sp^3-sp$
22 C_5H_4	$C\equiv C-C\equiv C-C$		пентадиин-1,3	C_5 – 2 грани 2 ребра	$3sp-sp$ $1sp^3-sp$
23 C_5H_4	$C=C=C-C\equiv C$		пентдиен-1,2- ин-4	C_5 – 1 грань 1 ребро 2 верш.	$3sp^2-sp$ $1sp-sp$

Таким образом, тетраэдрические модели помогают сформировать основные понятия структурной химии и поэтому их роль в процессе визуализации незаменима. Тетраэдрические модели можно использовать как средство дистанционного

обучения. На основе изложенного в таблицах 1,2 материала можно составить тестовые задания, одновременно способствующие закреплению теории строения и развитию динамического пространственного мышления [7].

ЛИТЕРАТУРА

1. Salahov M.S., Bağmanov B.T., Məmmədova H.Ş. və b. // Kimya məktəbdə məcmuəsi. 2005. № 2. S.59.
2. Salahov M.S., Bağmanov B.T., Əhmədova F.Ə. // C₅-karbohidrogenlərin tetraedrik modellər lə vizualaşması və onların qrafiki təsvirləri. Ümummilli lider H.Əliyevin 85 illik yubileyinə həsr olunmuş respublika elmi konfransının materialları. BDU. 2008. S.83.
3. Salahov M.S., Bağmanov B.T., Məmmədova H.Ş., Muradova Ş.Ə. // Təhsil, mədəniyyət, incəsənət jurn. 2005. № 3-4. S.88.
4. Моррисон Р., Бойд Р. Органическая химия. Пер. с англ. М.: Мир. 1974. С.150.
5. Кан Р., Дермер О. Введение в химическую номенклатуру. Москва: Изд-во Химия. 1983. С.97.
6. Газизов М.Б., Гбутдинов М.С. и др. Научные и тривиальные названия органических соединений. Казань: Изд-во КГТУ. 1998. С.47.
7. Salahov M.S., Bağmanov B.T. //Təhsildə dinamik fəzavi təfəkkür konsepsiyası reallıqların dərk olunmasında mühüm bir mərhələ kimi. BDU-nun 85 illiyinə həsr olunmuş konfransın materialları. Bakı. 26-27 noyabr 2004. S. 123.

**ATSİKLİK C₅-KARBOHİDROGENLƏRİNİN TETRAEDRİK MODELRLƏ
VİZUALLAŞMASI VƏ ONLARIN QRAFİKİ İFADƏLƏRİ**

M.S.Salahov, B.T.Bağmanov, F.Ə.Əhmədova

Məqalədə atsiklik C₅-karbohidrogenlərinin mövcud və hipotetik izomerləri sistemləşdirilmiş, onların qrafik və tetraedrik ifadələri, tetraedrik modellərlə birləşmə tipləri, beynəlxalq nomenklaturaya əsasən adları və hibrid orbitalların növləri göstərilmişdir

**VISUALIZATION OF ACYCLIC HYDROCARBONS C₅ BY MEANS OF
TETRAHEDRAL MODELS AND THEIR GRAPHICAL IMAGE**

M.S.Salahov, B.T.Bagmanov, F.A.Ahmedova

The paper systematized the real and hypothetic isomers of acyclic hydrocarbons C₅, their graphical and tetrahedral images, types of compounds of tetrahedral models, titles according to international nomenclature and types of hybrid orbitals.