

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ АЛИЦИКЛИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ C₅ С ПОМОЩЬЮ ТЕТРАЭДРИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

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

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

³Бакинский государственный университет

В статье рассмотрены вопросы тетраэдрической визуализации, наименования по международной номенклатуре, гибридизации и проблемы моделирования реальных и гипотетических изомеров некоторых алициклических углеводородов состава C₅.

Органические молекулы, как и любые материальные тела, являются трехмерными объектами. Несмотря на огромное многообразие молекул органических веществ, каждая из них имеет свою пространственную геометрию, которая в большей степени определяет физические и химические свойства, направление и скорость реакций, а также оказывает большое влияние на физиологические свойства веществ [1]. Поэтому для реального представления изучение пространственной структуры и способов визуализации молекул имеет большое значение.

Обычно сведения в периодической литературе ограничиваются отдельными примерами о синтезированных или известных веществах. Однако среди углеводородов возможны изомеры, которые не получены в настоящее время, хотя мы не можем отрицать вероятность их существования, так как при визуализации их с помощью тетраэдрических моделей не нарушается принцип четырехвалентности

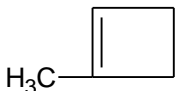
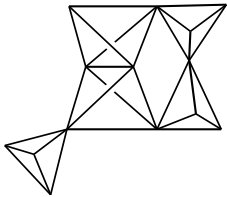

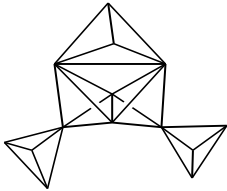

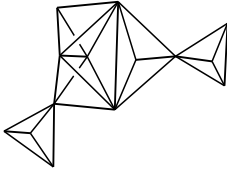
углеродного атома [2]. На сегодняшний день не существует исчерпывающей информации обо всех возможных изомерах углеводородов, поэтому их систематизация все еще остается актуальной проблемой. Отметим, что некоторыми из нас в предыдущих статьях были затронуты эти проблемы применительно к углеводородам ряда C₃ и C₄ [3, 4].

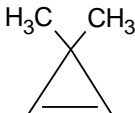
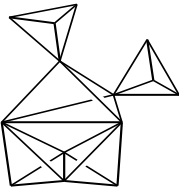

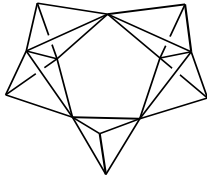


В развитии этих исследований нами были систематизированы все реальные и гипотетические изомеры углеводородов ряда C₅, даны их графические и тетраэдрические изображения, типы соединений тетраэдрических моделей, наименования по международной номенклатуре и виды гибридных орбиталей. Эти данные частично получили свое отражение в наших предыдущих публикациях [5,6]. Данная работа является продолжением этих исследований и касается визуализации известных и гипотетических алициклических углеводородов C₅ (таб. 1).

Таблица 1. Алициклические углеводороды состава C₅

№ Мол. формула	Графическая формула	Тетраэдрическая модель	Международная номенклатура	Типы соединений тетраэдрических моделей	Гибридные орбитали
1 C ₅ H ₁₀			циклопентан	C ₅ – 5 верш.	5sp ³ -sp ³

2 C_5H_{10}			метил- циклобутан	$C_5 - 5$ верш.	$5sp^3-sp^3$
3 C_5H_{10}	а) 		цис-1,2- диметил- циклопро- пан	$C_5 - 5$ верш.	$5sp^3-sp^3$
б) 		транс-1,2- диметил- циклопро- пан			
4 C_5H_{10}			1,1-диметил- циклопро- пан	$C_5 - 5$ верш.	$5sp^3-sp^3$
5 C_5H_8			циклопентен	$C_5 - 4$ верш. 1 ребро	$2sp^3-sp^3$ $2sp^3-sp^2$ $1sp^2-sp^2$
6 C_5H_8			3-метил- циклобутен	$C_5 - 4$ верш. 1 ребро	$2sp^3-sp^3$ $2sp^3-sp^2$ $1sp^2-sp^2$

7 C ₅ H ₈			1-метил- циклобутен	C ₅ – 4 верш. 1 ребро	1sp ³ -sp ³ 3sp ³ -sp ² 1sp ² -sp ²
8 C ₅ H ₈			1,2-диметил- циклопро- пен	C ₅ – 4 верш. 1 ребро	4sp ³ -sp ² 1sp ² -sp ²
9 C ₅ H ₈			1,3-диметил- циклопро- пен	C ₅ – 4 верш. 1 ребро	1sp ³ -sp ³ 3sp ³ -sp ² 1sp ² -sp ²

10 C ₅ H ₈			3,3-диметил- циклопропен	C ₅ – 4 верш. 1 ребро	2sp ³ -sp ³ 2sp ³ -sp ² 1sp ² -sp ²
11 C ₅ H ₆			цикло- пентадиен-1,3	C ₅ – 3 верш. 2 ребра	2sp ³ -sp ² 3sp ² -sp ²
12 C ₅ H ₄		невозможно отобразить визуально	циклопента- триен-1,2,4	C ₅ – 2 верш. 3 ребра	2sp ² -sp 3sp ² -sp ²
13 C ₅ H ₄		невозможно отобразить визуально	циклопента- триен-1,2,3	C ₅ – 2 верш. 3 ребра	2sp ³ -sp ² 2sp ² -sp 1sp-sp

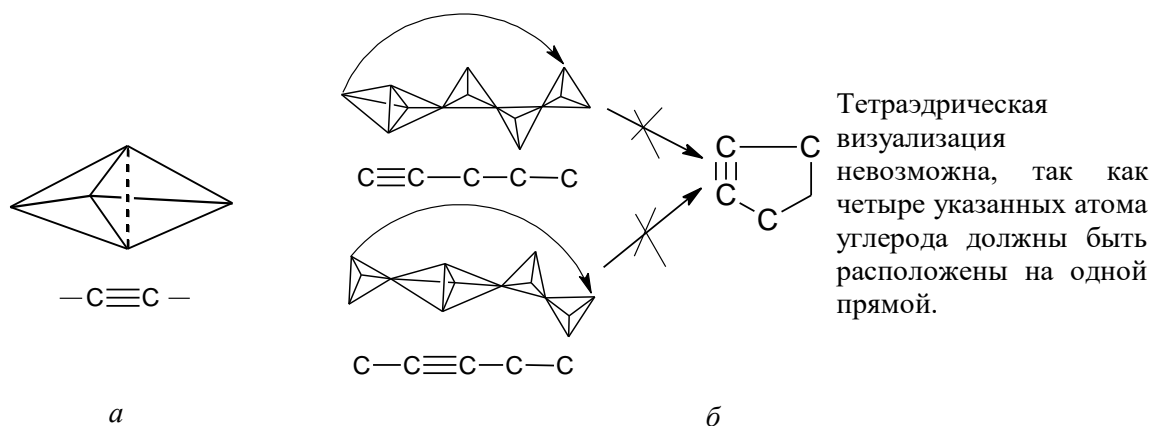
14 C ₅ H ₂		невозможно отобразить визуально	циклопента-тетраен	C ₅ – 1 верш. 4 ребра	2sp ² -sp 3sp-sp
15 C ₅		невозможно отобразить визуально	циклопента-пентаен	C ₅ – 5 ребер	5sp-sp
16 C ₅ H ₆		невозможно отобразить визуально	циклопентин	C ₅ – 4 верш. 1 грань	3sp ³ -sp ³ 2sp ³ -sp 1sp-sp

17 C ₅ H ₄		невозможно отобразить визуально	циклопентен-1-ин-3	C ₅ – 3 верш. 1 ребро 1 грань	1sp ³ -sp ² 1sp ³ -sp 1sp-sp 1sp ² -sp 1sp ² -sp ²
18 C ₅ H ₂		невозможно отобразить визуально	циклопентадиен-1,2-ин-4	C ₅ – 2 верш. 2 ребра 1 грань	4sp ² -sp 1sp-sp
19 C ₅ H ₂		невозможно отобразить визуально	циклопентадиин-1,3	C ₅ – 3 верш. 2 грани	2sp ³ -sp 3sp-sp
20 C ₅ H ₈			бицикло [2.1.0] пентан	C ₅ – 6 верш.	6sp ³ -sp ³

21 C ₅ H ₆		невозможно отобразить визуально	бицикло [2.1.0] пентен-1(4)	C ₅ – 5 верш. 1 ребро	1sp ³ -sp ³ 4sp ³ -sp ² 1sp ² -sp ²
22 C ₅ H ₆		невозможно отобразить визуально	бицикло [2.1.0] пентен-2	C ₅ – 5 верш. 1 ребро	2sp ³ -sp ² 3sp ³ -sp ³ 1sp ² -sp ²
23 C ₅ H ₄		невозможно отобразить визуально	бицикло [2.1.0] пентин-2	C ₅ – 5 верш. 1 грань	2sp ³ -sp 3sp ³ -sp ³ 1sp-sp
24 C ₅ H ₆		невозможно отобразить визуально	трицикло [2.1.0.0 ^{1,3}] пентан	C ₅ – 7 верш.	7sp ³ -sp ³
25 C ₅ H ₆		невозможно отобразить визуально	трицикло [2.1.0.0 ^{2,5}] пентан	C ₅ – 7 верш.	7sp ³ -sp ³
26 C ₅ H ₄		невозможно отобразить визуально	трицикло [2.1.0.0 ^{1,3}] пентен-3	C ₅ – 6 верш. 1 ребро	2sp ³ -sp ³ 4sp ³ -sp ² 1sp ² -sp ²
27 C ₅ H ₈			спиро[2.2] пентан	C ₅ – 6 верш.	6sp ³ -sp ³

Как видно из данных таблицы, такой метод визуализации может дать наглядное объяснение существенным стереохимическим фактам. Например, известно, что молекулы с тройной связью изображаются в тетраэдрических моделях, где тетраэдры

соприкасаются одновременно тремя вершинами, т.е. одной из граней (*a*). Это значит, что в молекуле C—C≡C—C—C или C≡C—C—C—C четыре атома должны располагаться на одной прямой.



Построение малых циклов невозможно из-за возникновения слишком большого напряжения (б). Однако, по мере роста числа звеньев напряженность циклов, содержащих тройную связь, падает и поэтому можно ожидать, что при достаточно большом числе атомов такие циклы могут существовать [7]. Все эти нюансы легко наблюдать с помощью тетраэдрических моделей.

Более того, помимо наглядного изображения пространственного строения

органических соединений, тетраэдрические модели иллюстрируют их динамику и вид гибридизации. Поэтому их целесообразно применять при изучении основ стереохимии соединений углерода. Благодаря использованию тетраэдрических моделей, в процессе обучения достигается системность знаний о строении вещества и доступность его усвоения, у учащихся развивается динамическое образное мышление [8].

ЛИТЕРАТУРА

1. Чеча О.А., Пахомов В.П. // Фармацевтическая промышленность. 2008. №6 С.64.
2. Моррисон Р., Бойд Р. Органическая химия. Пер. с англ. М.: Мир. 1974. С.74.
1. Salahov M.S., Вағманов В.Т., Мәмәдова Н.Ҷ. və б. // Тәһсил, мәдәниyyət, incəsənət jurn. 2005. № 3. S.88.
2. Salahov M.S., Вағманов В.Т., Мәмәдова Н.Ҷ. və б. // Тәһсил, мәдәниyyət, incəsənət jurn. 2005. № 4. S.88.
3. Salahov M.S., Вағманов В.Т., Әһмәдова Ф.Ә. // Kimya problemləri jurnalı. 2009. № 2. С.228.
4. Salahov M.S., Вағманов В.Т., Әһмәдова Ф.Ә. // C₅-karbohidrogenlərin tetraedrik modellərlə vizualaşması və onların qrafiki təsvirləri. Ümummillî lider Н.Әliyevin 85 illik yubileyinə həsr olunmuş respublika elmi konfransının materialları. BDU. 2008. S.83.
5. А.П.Терентьев, В.М.Потапов. Основы стереохимии. М.-Л.: Химия. 1964. С.134.
6. Salahov M.S., Вағманов В.Т. //Тәһсildə 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.

**ALİTSİKLİK C₅-KARBOHİDROGENLƏRİNİN TETRAEDRİK MODELƏRLƏ
VİZUALLAŞMASI**

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

Məqalədə C₅ tərkibli alitsiklik karbohidrogenlərin bəzi real və hipotetik izomerlərinin modelləşmə problemi, onların beynəlxalq nomenklaturaya əsasən adlandırılması, hibridizatsiya növləri və tetraedrik modellərlə vizuallaşma məsələsinə baxılmışdır.

**VISUALIZATION OF ALICYCLIC HYDROCARBONS C₅ BY MEANS OF
TETRAHEDRAL MODELS**

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

The questions of tetrahedral visualization, title under international nomenclature, hybridization and modeling of some real and hypothetical alicyclic hydrocarbons C₅ have been examined in the paper.