



药品



第二章 饱和烃

作者姓名：叶斌

作者单位：广东食品药品职业学院



人民卫生出版社

PEOPLE'S MEDICAL PUBLISHING HOUSE



目录



第一节 烷烃



第二节 环烷烃



第三节 构象



学习目标

- ☑ **掌握** 烷烃和环烷烃的结构、命名及性质。
- ☑ **熟悉** 乙烷、丁烷、环己烷的构象。
- ☑ **了解** 重要的烷烃在医药领域中的应用。



第一节

烷烃





一、烷烃的通式、同系列和同系物

通式： C_nH_{2n+2} ($n \geq 1$)。从甲烷开始每增加1个碳原子，就相应增加2个氢原子。

如果将碳原子数定为 n ，则氢原子数就是 $2n+2$ 。

同系列：具有同一通式，且在组成上相差1个或多个 CH_2 基团的一系列化合物称为同系列。

同系物：同系列中的各化合物之间互称同系物。

系列差： CH_2 。

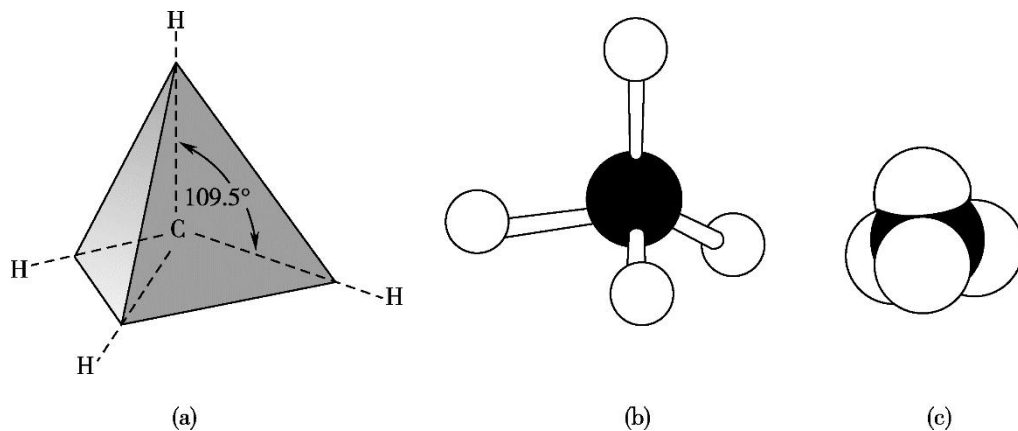




二、烷烃的结构

(一) 甲烷的分子结构

甲烷的分子式为 CH_4 ，空间形状是正四面体。碳原子处于正四面体的中心，4个氢原子占据正四面体的4个顶点，4个碳氢键的键长及键能完全相等。所有的键角均为 109.5° 。



甲烷分子的模型

(a) 甲烷的正四面体模型； (b) 球棍模型
(凯库勒模型)； (c) 比例模型 (斯陶特模型)





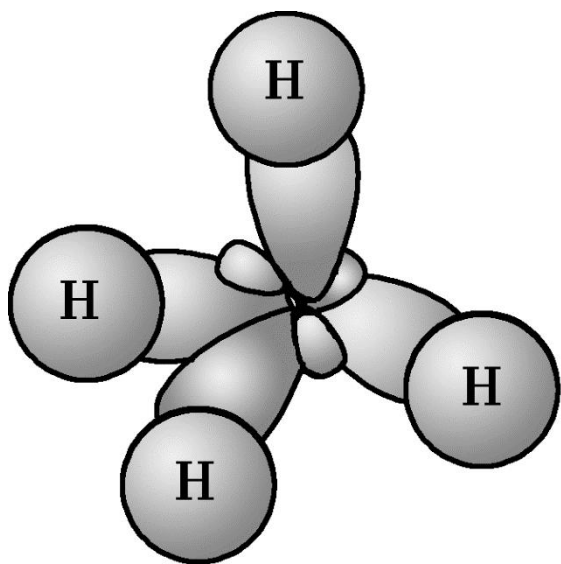
二、烷烃的结构

(二) 烷烃中碳原子的成键方式

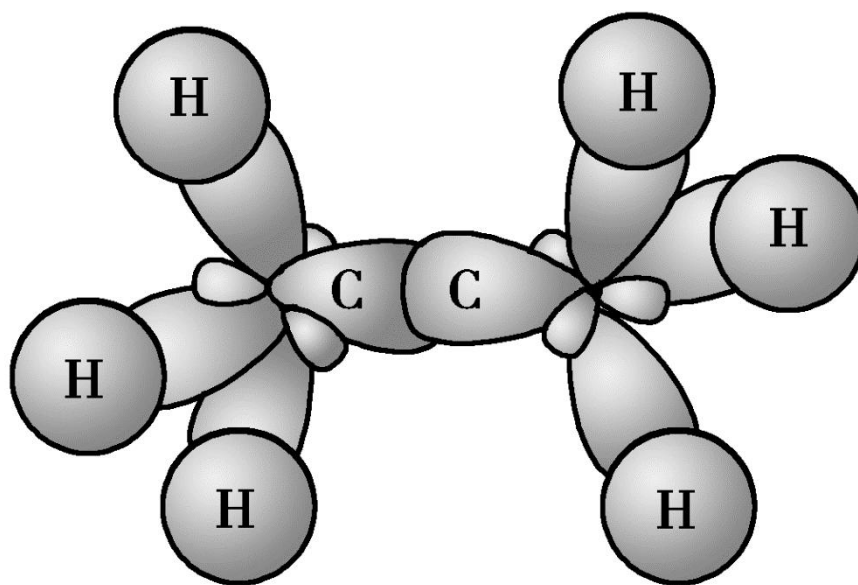
烷烃分子中，每个碳原子均为 sp^3 杂化轨道。

碳原子之间的 sp^3 杂化轨道沿对称轴方向重叠形成C—C σ 键。

碳原子 sp^3 杂化轨道与氢原子 $1s$ 轨道沿对称轴方向重叠形成C—H σ 键。



● 甲烷分子的形成



● 乙烷分子的形成



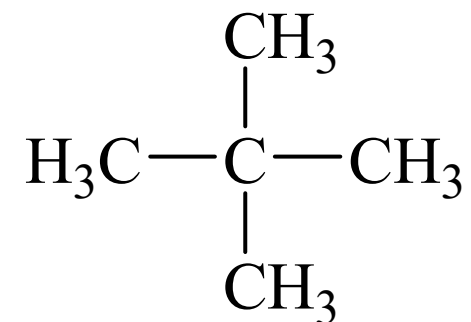
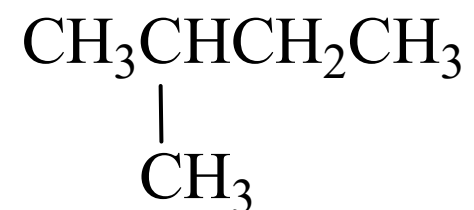


二、烷烃的结构

(三) 烷烃的同分异构现象

碳链异构：具有相同的分子组成，只是由于碳链结构不同而产生的同分异构现象。

例如：戊烷有3种碳链异构体。



随着烷烃分子中碳原子数的增多，碳链异构体的数目也随之增加。





二、烷烃的结构

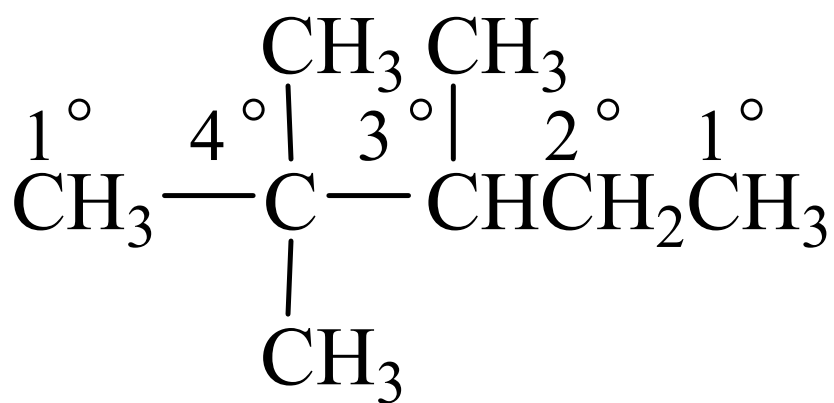
(四) 烷烃分子中碳原子的类型

伯碳原子（一级或 1° ）：只与1个碳原子直接相连的碳原子；

仲碳原子（二级或 2° ）：与2个碳原子直接相连的碳原子；

叔碳原子（三级或 3° ）：与3个碳原子直接相连的碳原子；

季碳原子（四级或 4° ）：与4个碳原子直接相连的碳原子。



与此相对应，连接在伯、仲、叔碳原子上的氢原子分别称为伯氢原子(1°H)、仲氢原子(2°H)和叔氢原子(3°H)。





三、烷烃的命名

(一) 普通命名法

1. 根据分子中碳原子的数目称“某烷”。

碳原子数在10以下（包括10）的分别用甲、乙、丙、丁、戊、己、庚、辛、壬、癸表示；

碳原子数在10以上的用中文数字十一、十二……表示。



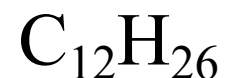
甲烷



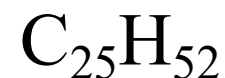
戊烷



壬烷



十二烷



二十五烷





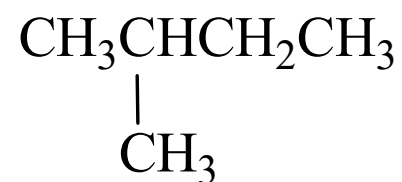
三、烷烃的命名

(一) 普通命名法

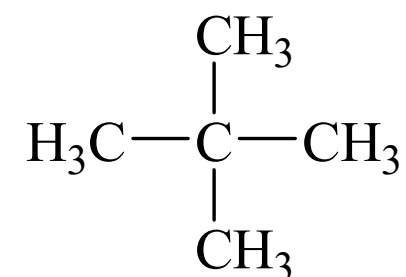
2. 为了区别异构体，常将直链烷烃称为“正”某烷，带支链的称为“异”或“新”某烷。它们分别表示碳链的第2位碳原子上具有1个甲基和链端第2位碳原子上连有2个甲基，此外再无其他取代基的烷烃。



正戊烷



异戊烷



新戊烷





三、烷烃的命名

(二) 系统命名法

1. **烷基的命名** 烷基是指烷烃分子中去掉1个氢原子后所剩余的原子团。通式为 $C_nH_{2n+1}-$ ，用R—表示。

常见的烷基

烷基	烷基名称	烷基	烷基名称
CH_3-	甲基	$CH_3CH_2CH_2CH_2-$	正丁基
CH_3CH_2-	乙基	$\begin{array}{c} CH_3CHCH_2- \\ \\ CH_3 \end{array}$	异丁基
$CH_3CH_2CH_2-$	正丙基	$\begin{array}{c} CH_3CH_2CH- \\ \\ CH_3 \end{array}$	仲丁基
$\begin{array}{c} CH_3CH- \\ \\ CH_3 \end{array}$	异丙基	$\begin{array}{c} CH_3 \\ \\ CH_3-C- \\ \\ CH_3 \end{array}$	叔丁基



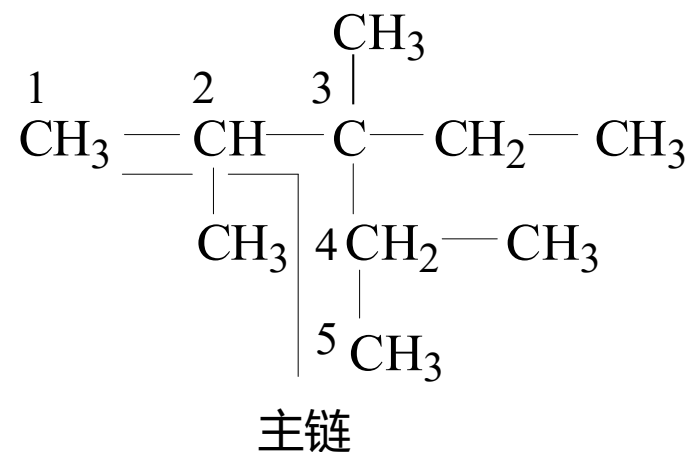
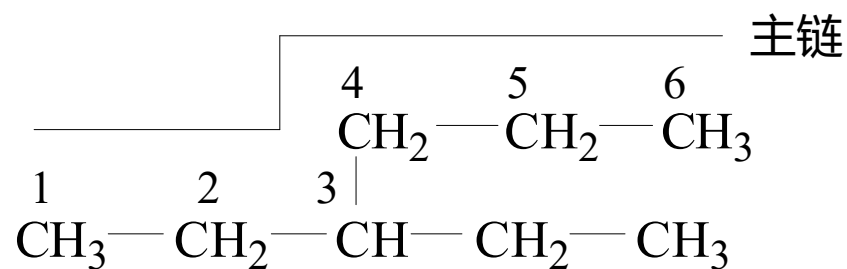


三、烷烃的命名

(二) 系统命名法

1. 烷烃的命名

(1) **选主链**：选取最长的连续碳链为主链，根据其所含的碳原子数目称为某烷，并以它作为母体，其他支链看作取代基。如有等长碳链时，应选择含取代基最多的碳链为主链。例如：



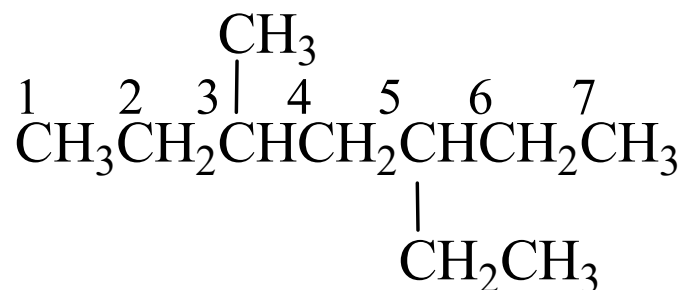
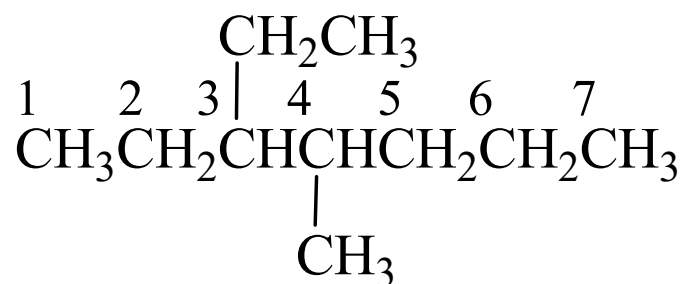


三、烷烃的命名

(二) 系统命名法

1. 烷烃的命名

(2) **编号**：从距离支链最近的一端开始，将主链碳原子用阿拉伯数字依次编号，使支链（取代基）编号的位次最小。如果碳链两端等距离处有2个不同的取代基时，则应使较小的取代基有尽可能小的编号。常见烷基的顺序为异丙基>正丙基>乙基>甲基。例如：



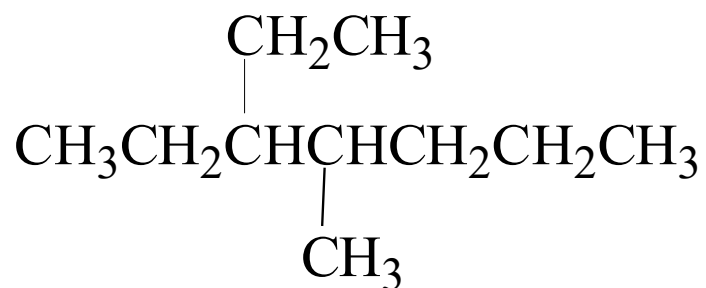


三、烷烃的命名

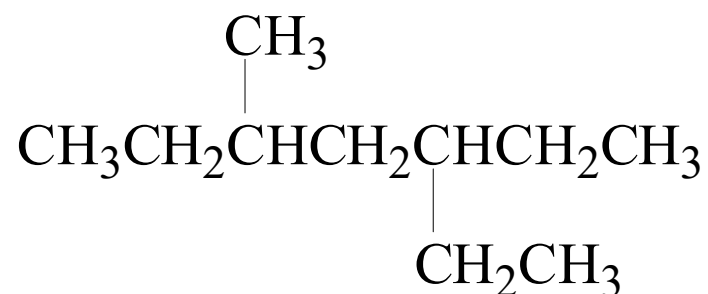
(二) 系统命名法

1. 烷烃的命名

(3) **命名**：将取代基的名称写在母体名称的前面，并逐一标明取代基的位次，表示各位次的数字间用逗号隔开。如果有几个相同的取代基，则在取代基前加上二、三等字样，取代基的位次与名称之间加半字线；如果有几个不同的取代基，则依次按照较小的在前、较大的在后的次序。例如：



4-甲基-3-乙基庚烷



3-甲基-5-乙基庚烷





四、烷烃的性质

在烷烃系列中，物理常数常随相对分子质量的增减而有规律地变化。在室温下，直链烷烃中的前四个化合物是气体，从戊烷开始是液体，十八烷以上是固体。直链烷烃的沸点随着分子量的增大而升高；相对密度也随着碳原子数的增加而增大，但增加值很小，所有烷烃的密度都小于1，比水轻。

烷烃是非极性或弱极性分子，因此不溶于水和其他极性溶剂，而溶解于非极性或弱极性的有机溶剂，如四氯化碳和苯等。





四、烷烃的性质

烷烃分子中，原子之间是以比较牢固的C—C σ 键和C—H σ 键结合的，相对于其他有机物来说，在常温下比较稳定的化学性质，不与强酸、强碱、强氧化剂反应。

烷烃的稳定性是相对的，在一定条件下，如光照、加热、催化剂的作用下，烷烃也能与一些试剂发生化学反应。

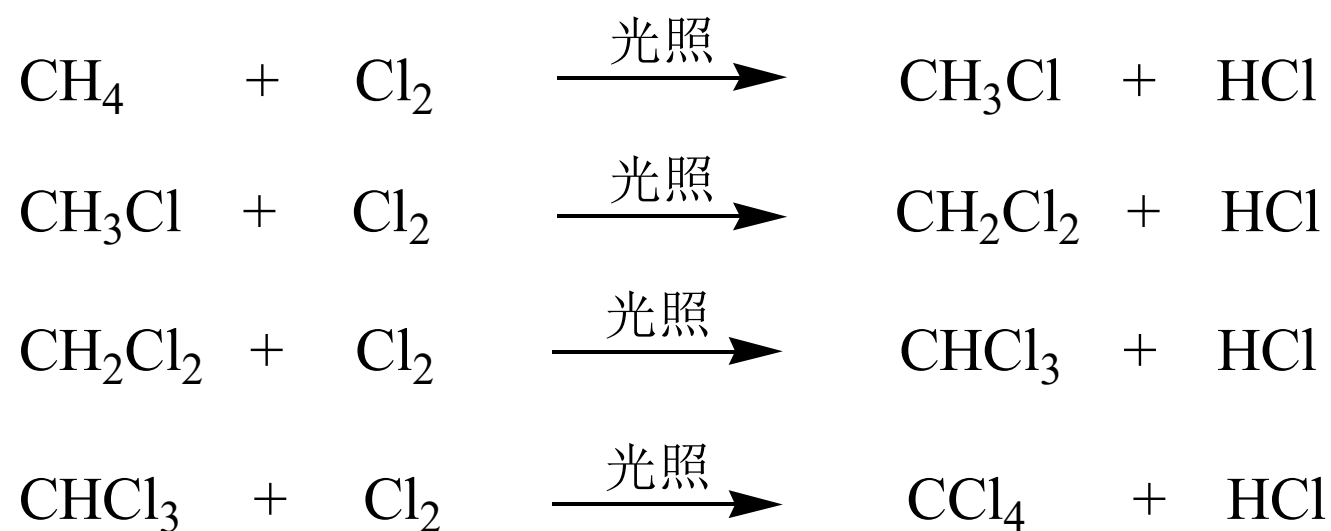




四、烷烃的性质

(一) 取代反应

1. 卤代反应 甲烷与氯气在紫外线作用下或加热到250℃以上时可发生反应，甲烷中的4个氢原子可逐步被氯原子取代。



反应最终得到的是含有上述4种卤代烃的混合物。由于分离这些产物较困难，通常不经分离就将混合物直接作溶剂使用。





四、烷烃的性质

(一) 取代反应

2. 卤代反应的活性 除甲烷氯代反应外，其他卤素也能与烷烃进行类似反应，各种卤素与烷烃的相对反应活性是 $F_2 > Cl_2 > Br_2 > I_2$ 。

在同一烷烃分子中，存在着伯、仲、叔三种不同类型的氢原子，它们被卤原子取代的难易程度也不同。大量的实验结果表明，不同的氢原子被卤原子取代时，由易到难的次序是 $3^\circ H > 2^\circ H > 1^\circ H$ 。

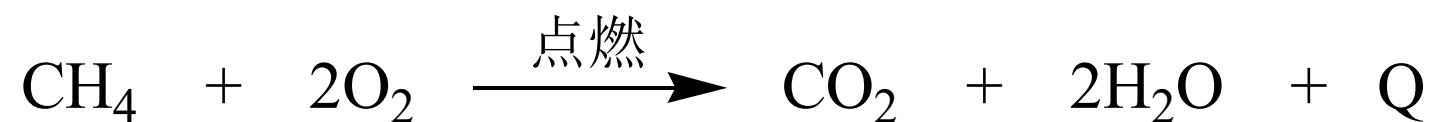




四、烷烃的性质

(二) 氧化反应

烷烃在室温下不与氧化剂反应，但可以在空气中燃烧，如果氧气充足，可完全氧化生成二氧化碳和水，同时放出大量的热量。



烷烃的不完全燃烧会放出一氧化碳，使空气受到严重污染。





第二节

环烷烃

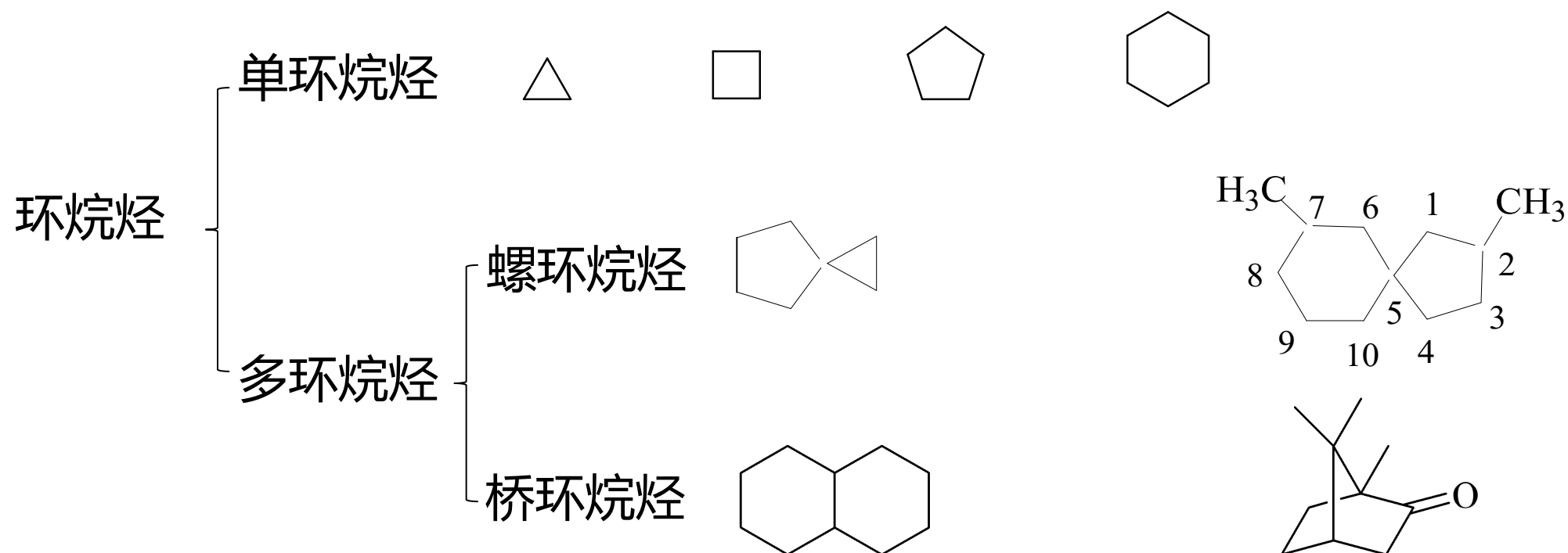




一、环烷烃的分类、命名与结构

(一) 环烷烃的分类

环烷烃可根据分子中碳环的数目，分为单环和多环烷烃。单环烷烃比相应的开链烷烃少 2 个氢原子，通式为 C_nH_{2n} ($n \geq 3$)。在多环烷烃中，根据环间的连接方式不同主要分为螺环烷烃和桥环烷烃两类。





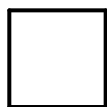
一、环烷烃的分类、命名与结构

(二) 单环烷烃的命名

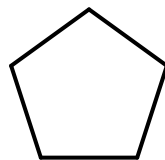
单环烷烃的命名与烷烃是相似的，只需在相同数目碳原子的烷烃名称之前加一冠词“环”，称为环某烷。例如：



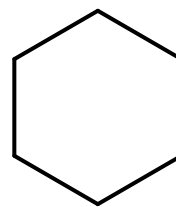
环丙烷



环丁烷



环戊烷



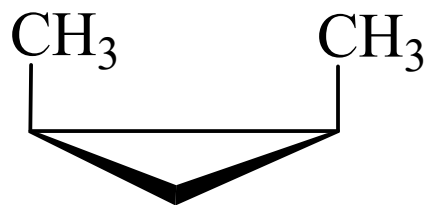
环己烷

带有简单取代基的环烷烃命名时以环为母体，并将环上的碳原子编号，其编号的原则与烷烃相同。

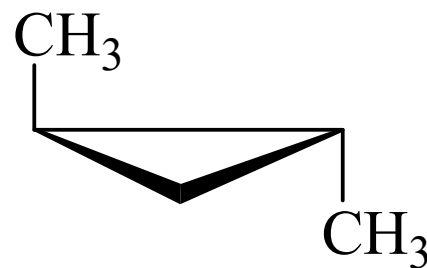


一、环烷烃的分类、命名与结构

在环烷烃分子中，由于C—C σ 键受环的限制不能自由旋转，所以在二取代或多取代的环烷烃分子中，环上的取代基可以形成不同的空间排列形式，从而产生异构体。如1,2-二甲基环丙烷分子中，环上的2个甲基分布在环平面的同侧时称为顺式异构体，分布在环平面的异侧为反式异构体。



顺-1,2-二甲基环丙烷



反-1,2-二甲基环丙烷

这种由于C—C σ 键不能自由旋转，导致分子中的原子或原子团在空间的排列形式不同而引起的异构现象称为顺反异构。

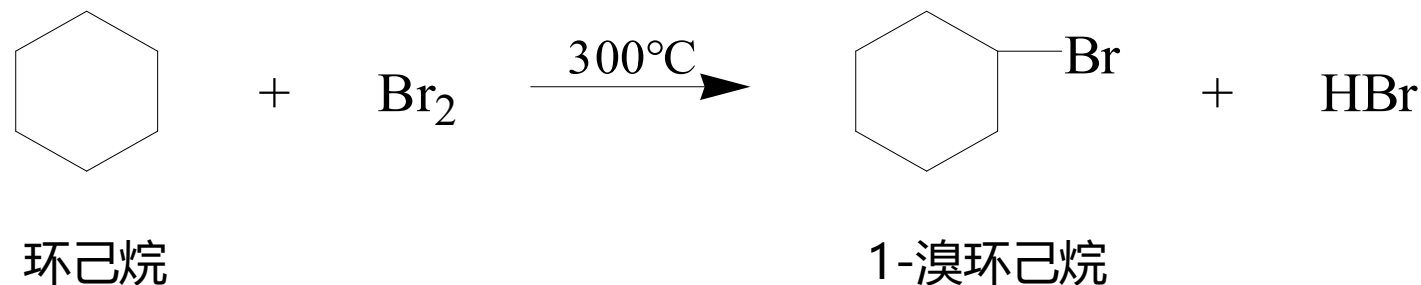


二、单环烷烃的性质

(一) 取代反应

环烷烃较稳定，与强酸（如硫酸）、强碱（如氢氧化钠）、强氧化剂（如高锰酸钾）等试剂都不发生反应，在高温或光照下能发生自由基取代反应。

例如：



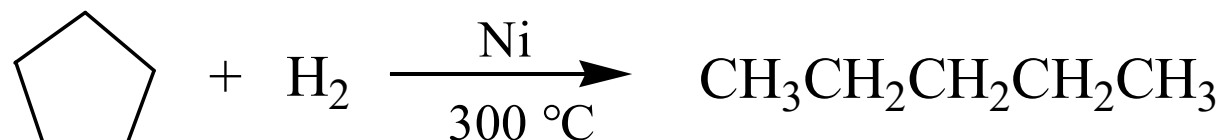
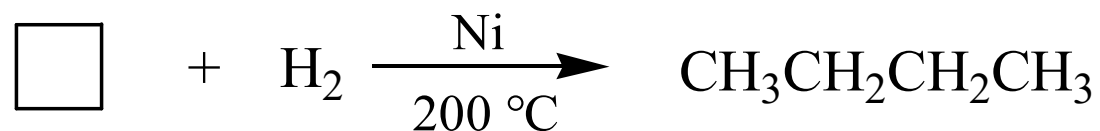
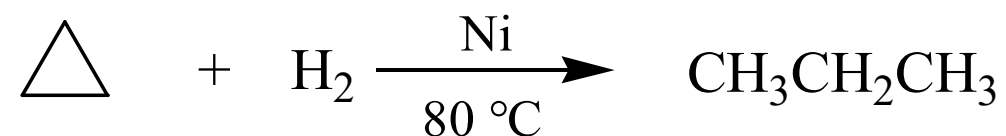


二、单环烷烃的性质

(二) 开环反应

由3或4个碳原子组成的小环环烷烃不稳定，在一定条件下易开环发生加成反应。

1. 加氢 在催化剂的作用下，环烷烃可进行催化加氢反应，环烷烃开环，碳链两端的碳原子与氢原子结合生成烷烃。例如：



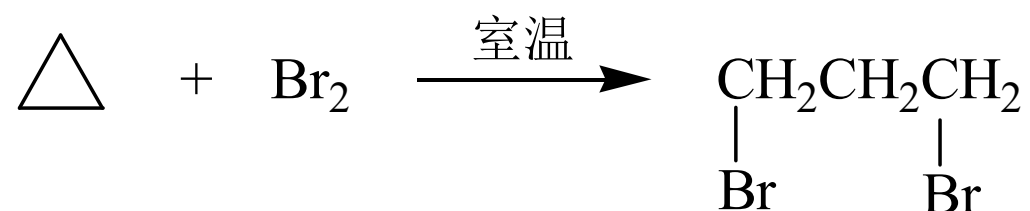
其活性大小顺序为环丙烷 > 环丁烷 > 环戊烷。



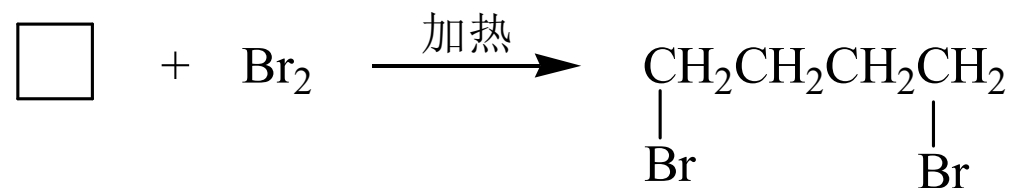
二、单环烷烃的性质

(二) 开环反应

2. 加卤素 在室温下，环丙烷可以与卤素分子发生加成反应。例如环丙烷与溴反应，生成1,3-二溴丙烷。



环丁烷需要在加热的条件下才能与卤素反应。例如丁烷与溴加成生成1,4-二溴丁烷。



环戊烷以上的环烷烃很难与卤素发生加成反应，而是随着温度升高发生自由基取代反应。



第三节

构象





一、乙烷的构象

烷烃分子中的 σ 键其特点之一就是成键的原子之间可沿键轴任意旋转。将乙烷球棍模型中的一个甲基固定不动，而使另一个甲基绕C—C键轴旋转，可以看到2个碳原子上的6个氢原子的相对位置在不断改变，从而产生多种不同的空间排列方式，使乙烷分子具有许多不同的空间形状。

这种由于C—C单键的旋转，导致分子中的原子或原子团在空间的不同排列方式称为**构象**。

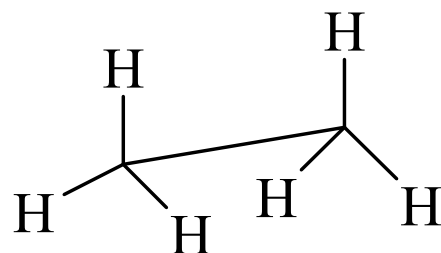
C—C单键的旋转而产生的异构体称为**构象异构体**。



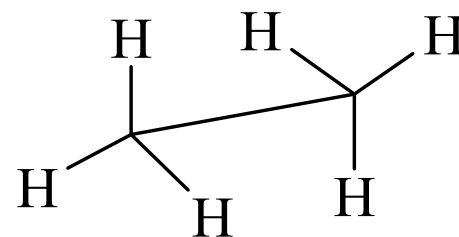
一、乙烷的构象

乙烷分子中由于C—C σ 键的旋转，可以产生无数个构象异构体。

锯架式

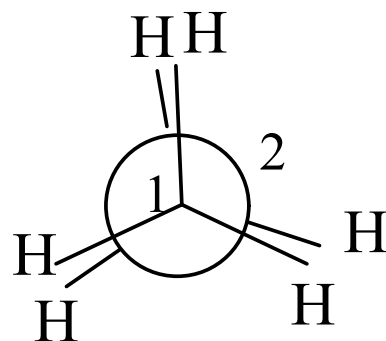


重叠式

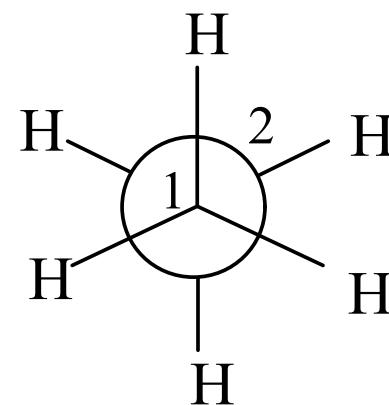


交叉式

纽曼投影式



重叠式

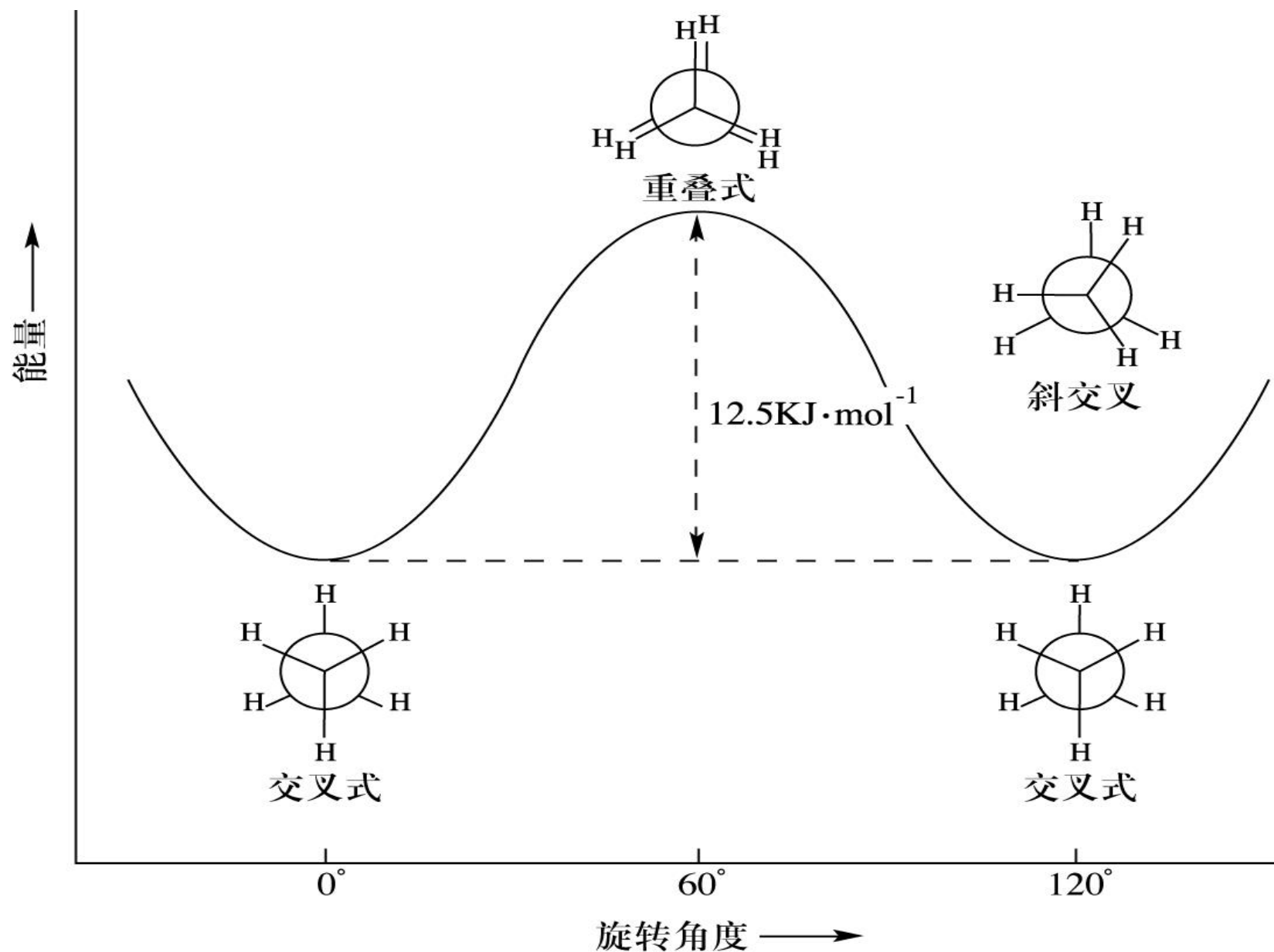


交叉式



一、乙烷的构象

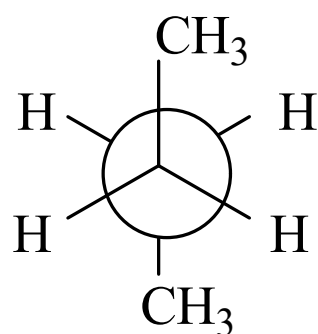
乙烷分子的交叉式构象中，2个碳原子上的氢原子之间的距离最远，相互间的斥力最小，内能最低，分子也最稳定。而重叠式构象中，2个碳原子上的氢原子的距离最近，排斥力最大，内能最高，最不稳定。



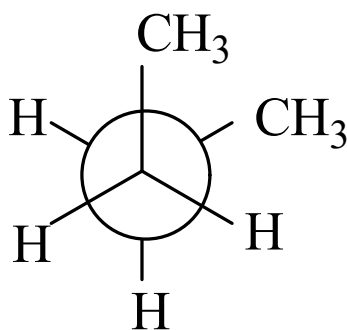


二、丁烷的构象

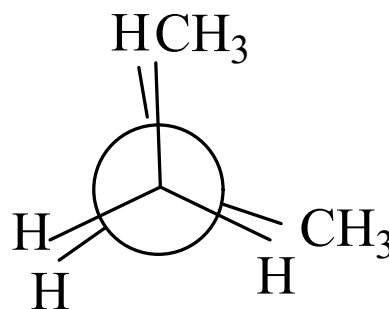
丁烷分子中有3个C—C σ 键，每个C—C单键的旋转都可以产生无数个构象异构体。为了讨论简便，这里主要讨论围绕C-2、C-3 σ 单键旋转时所得到的4种典型的构象异构体。



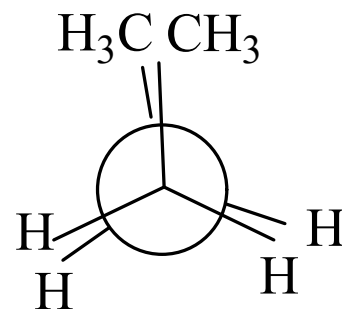
对位交叉式



邻位交叉式



部分重叠式

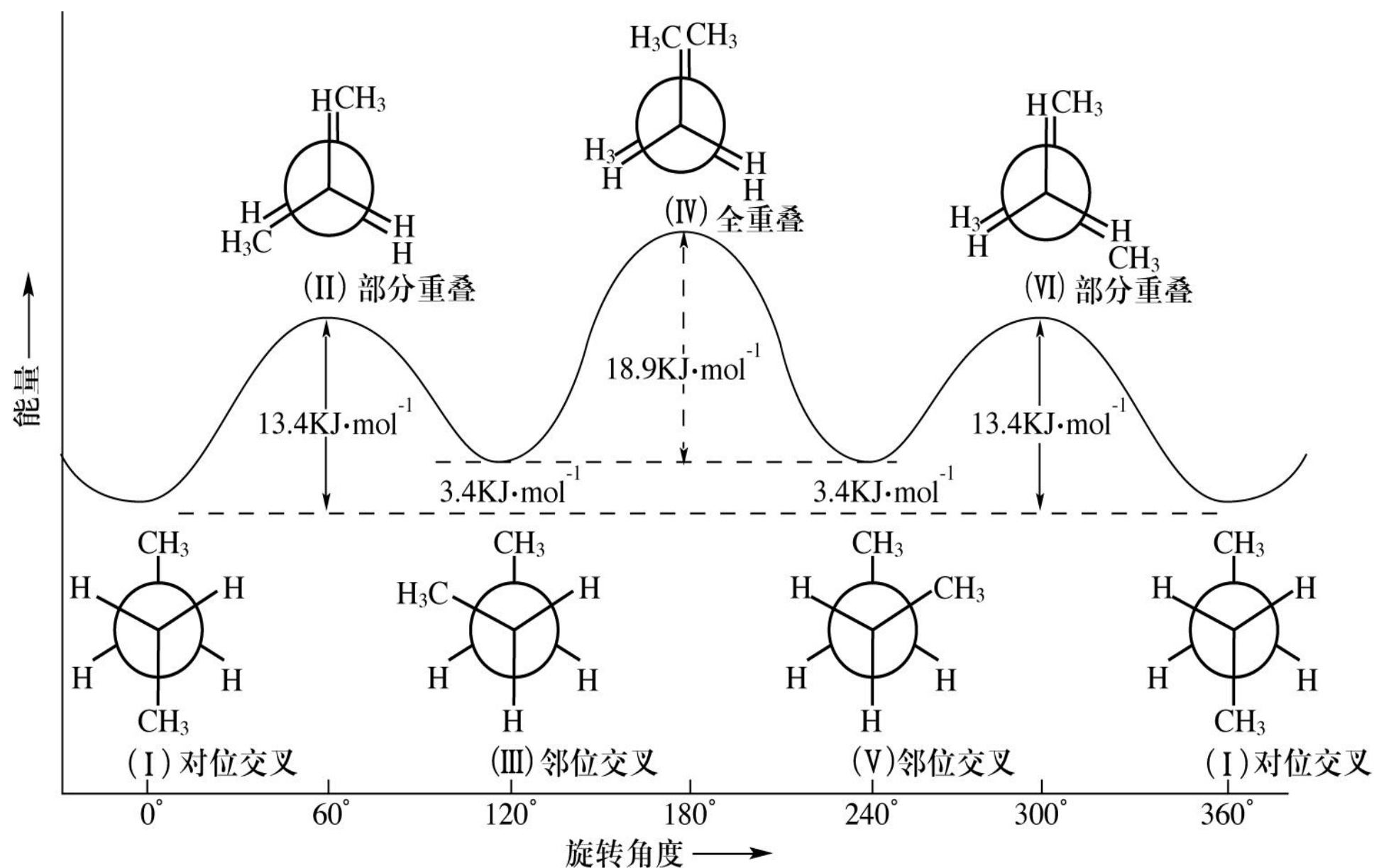


全重叠式



二、丁烷的构象

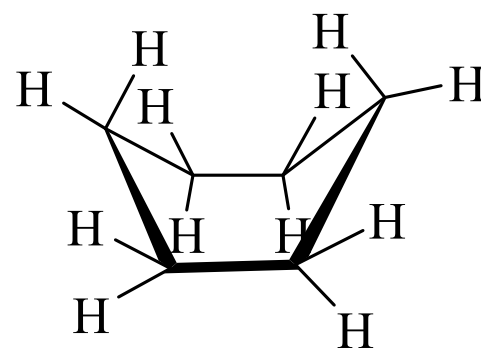
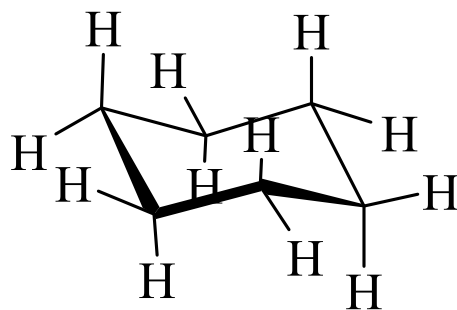
丁烷分子在室温下以对位交叉式构象（优势构象）为主。



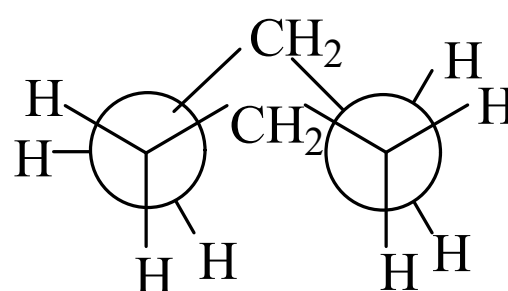
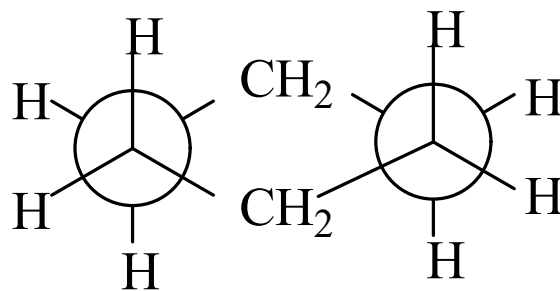
三、环己烷的构象

环己烷分子也是许多构象异构体的动态平衡体系，典型构象为椅式构象和船式构象。椅式构象中，相邻的碳原子全部是交叉式的构象，碳原子上的氢原子相距较远，不产生斥力，内能最低，是优势构象。

透视式



纽曼投影式



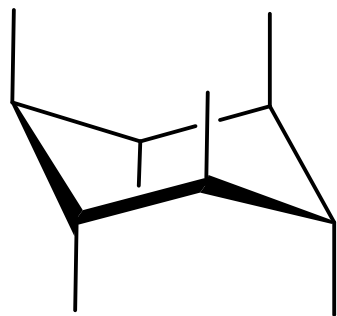
椅式构象

船式构象

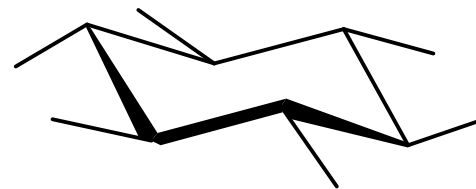


三、环己烷的构象

环己烷的椅式构象中，12个C—H键分为2种类型，垂直于平面的6个C—H键称为a键（竖键或直立键）；另6个C—H键与此平面呈一定的角度，称为e键（横键或平伏键）。



a 键

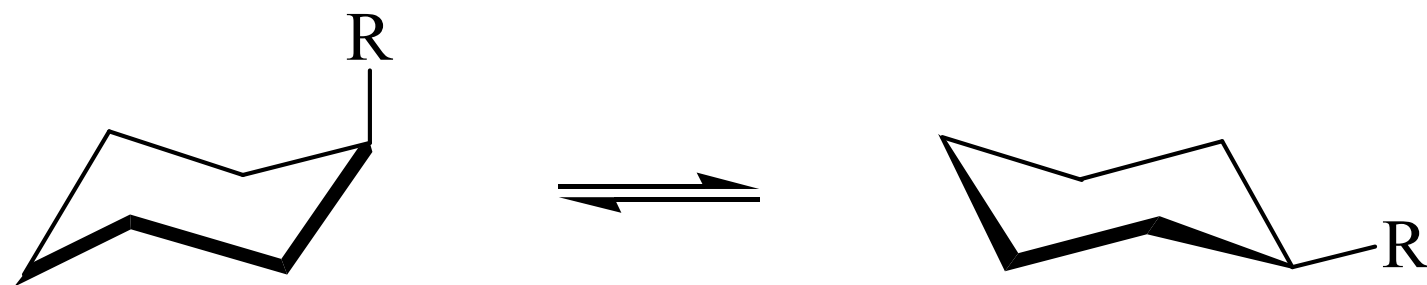


e 键



三、环己烷的构象

椅式环己烷还可通过环内C—C键的转动，从一种椅式构象转变为另一种椅式构象，称为转环作用。在这种构象转变过程中，原来的a键转为e键，e键转为a键。



小结

1. 甲烷为正四面体结构，烷烃分子中的碳原子为 sp^3 杂化，碳碳键、碳氢键均为 σ 键。烷烃的通式为 C_nH_{2n+2} ($n \geq 1$)；烷烃的同分异构现象为碳链异构，异构体的数目随碳原子数目的增加而增多。烷烃主要采用系统命名法，按3个步骤进行：选主链、编号、写名称。常温下，烷烃的化学性质稳定，在紫外线或加热条件下能与氯或溴发生取代反应。
2. 单环烷烃的命名原则与烷烃相似，母体称为环某烷。单环烷烃的化学性质表现为三元、四元的环烷烃易发生开环加成反应；五元、六元的环烷烃在一定条件下也可发生取代反应。
3. 构象异构体是由于C—C单键的旋转而导致原子或原子团在空间不同的排列方式而产生的。构象异构体常用锯架式或纽曼投影式表示。乙烷的优势构象是交叉式构象，而环己烷的优势构象是椅式构象。



药品

第二章 饱和烃

THANKS

谢谢观看



人民卫生出版社

PEOPLE'S MEDICAL PUBLISHING HOUSE