

Organic Chemistry 02

MKQ

September 10, 2019

Contents

1	烷烃的结构	1
1.1	碳的四面体构型	1
1.2	杂化	2
1.3	烷烃分子的表示方法	2
1.4	乙烷的构象	2
1.4.1	极端构象	2
1.4.2	丙烷的构象	2
1.4.3	正丁烷的构象	2
1.4.4	乙烷衍生物	2
2	烷烃的物理性质	3
2.1	状态	3
2.2	熔点	3
2.3	密度	3
2.4	化学性质	3
2.5	反应	3
2.5.1	卤代反应	3
2.6	反应机理	3
2.6.1	自由基稳定性	3
2.7	过渡态, 中间体, 活化能, 反应热	4
2.7.1	Hammond 假说	4

1 烷烃的结构

1.1 碳的四面体构型

- 构造: 平面的

- 构型: 空间的

1.2 杂化

sp^3 杂化轨道, s 轨道和 p 轨道进行杂化, 波相相同的一边波瓣变大, 不同的一边缩小

1.3 烷烃分子的表示方法

- 伞形式
- 锯架式
- 纽曼式

1.4 乙烷的构象

- 构象: 三维的

随着乙烷单键的旋转, 产生了无数构象

1.4.1 极端构象

- 交叉式
- 重叠式

氢的范德华半径是 120, 但交叉式中氢氢间距为 250, 重叠式为 229 交叉式是最稳定的, 优势构象, 内能最低的构象环烷烃可以把构象冻结起来, 单键的自由旋转并非完全自由, 交叉式重叠式的比例大概是 160:1

1.4.2 丙烷的构象

把一个氢换成甲基, 甲基的范德华半径是 200

1.4.3 正丁烷的构象

然后就有了甲基和甲基重叠的情况

- 构象分布: 各种构象的比例

1.4.4 乙烷衍生物

还有分子内的氢键的作用

2 烷烃的物理性质

2.1 状态

- 1-4 个碳: 气体
- qwq

2.2 熔点

和分子质量, 分子间作用力, 晶格堆积的密集程度有关, 偶数碳烷烃沸点增长要多一些

2.3 密度

大多数有机物沸点比水小, 但是有卤素可能会改变, 比如四氯化碳

2.4 化学性质

非常稳定不容易发生反应, 所以可以拿来作为溶剂

2.5 反应

2.5.1 卤代反应

甲烷的卤代

2.6 反应机理

卤代反应: 经历了自由基中间体 $\text{Cl}-\text{Cl}$ 比 $\text{C}-\text{C}$ 和 $\text{C}-\text{H}$ 更容易断裂, 这主要是键能的差别

- 氧气: 自由基抑制剂, 常用的有, 对苯二酚, 硝基甲烷, 但氧气还可以作为自由基引发剂

2.6.1 自由基稳定性

自由基中心碳是 sp^2 杂化的, 是个平面结构, 有个 p 轨道垂直于平面 C 外层是个缺电子的结构, 其他甲基可以给它一个给电子共轭当然还有位阻之类的原因

- 超共轭效应
- 诱导效应

认为氢不给电子也不吸电子, 给电子: 正共轭/诱导, 吸电子: 负共轭/诱导

2.7 过渡态, 中间体, 活化能, 反应热

- 过渡态: 波峰
- 中间体: 波谷
- 活化能: 底物到过渡态的能垒

2.7.1 Hammond 假说

过渡态的样子和能量接近的一方相近

- 所以说溴代反应比氯代反应选择性更高