

同分异构之官能团位置异构书写规律

浙江省缙云县仙都中学 321499 樊文杰

笔者研究了大量官能团位置异构书写,发现官能团异构书写方法基本上分为两大类。下面谈谈笔者的一些经验。

第一种类型为含有一价基官能团(-R)的有机物,通式为 $C_nH_{2n+1}R$ 。此类物质可看成是官能团R取代了烃 C_nH_{2n+2} 中的一个H,烃中氢的种类即为同分异构的数目,此法称为取代法。等效氢的分析是此法的关键,何为等效氢? 1. 连在同一碳上的氢等效; 2. 连在同一碳上的甲基上的氢等效; 3. 处于对称位置碳上的氢等效。现以 C_4H_9Cl 为例加以说明,可以将其看成丁烷中的一个H用一个Cl取代,分析丁烷等效氢的数目,丁烷有两种碳链异构,由图1可知等效氢为 $2+2=4$ 种,即 C_4H_9Cl 为四种,分别为: $CH_2(Cl)CH_2CH_2CH_3$, $CH_3CH(Cl)CH_2CH_3$, $CH_2(Cl)CH(CH_3)_2$, $C(CH_3)_3Cl$ 。再如书写羧酸 $C_4H_8O_2$ 的同分异构体。分析 $C_4H_8O_2$ 可看成是 C_3H_8 中一个H被羧基(-COOH)取代, C_3H_8 的等效氢如图2分析有两种。

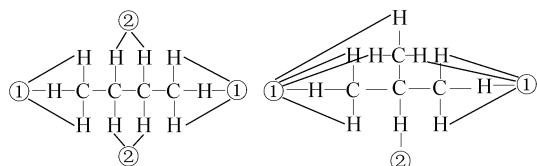


图1

所以 $C_4H_8O_2$ 的同分异构体为: $CH_3CH_2CH_2COOH$, $CH_3CH(CH_3)COOH$ 。

第二类官能团位置异构为含有二价基

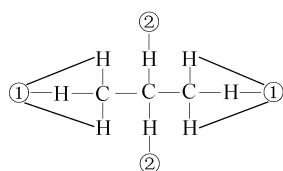


图2

官能团(-COO-, -O-等)有机物,此类官能团位置异构可将其看成是将二价基官能团插入到烃中的碳碳键或碳氢键中。即此类物质的同分异构体的数目是跟共价键有关,因此此类同分异构体数目分析的关键为“等效键”的分析。等效键的分析类同于等效氢。1. 连在同一碳上的碳氢键等效; 2. 连在同一碳上的甲基上的碳氢键等效; 3. 处于对称位置共价键等效。例如 $C_4H_{10}O$ 的等效键分析如图3,共有4种。

例如书写醚类 $C_4H_{10}O$ 的同分异构体。可将其看成将“-O-”

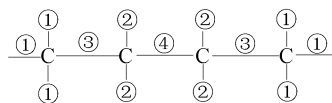


图3

插入到 C_4H_{10} 的碳碳键中(不考虑碳氢键,因为如果插到碳氢中的话就是羟基,变成醇了)其等效碳碳键分析如图4所示,共有3种,结构简式分别为: $CH_3OCH_2CH_2CH_3$, $CH_3CH_2OCH_2CH_3$, $CH_3OCH(CH_3)_2$ 。再比如书写分子式为 $C_4H_8O_2$ 所有的酯类同分异构体。可将其看成将-COO-插入到 C_3H_8 的共价键中, C_3H_8 的等效键分析如图5所示:

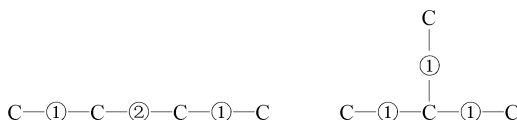


图4

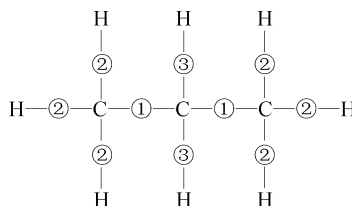


图5

考虑到官能团 $-C(=O)-$ 是不对称的,在每个键的位置可以插入两次,所以其结构简式为:①处有 $CH_3COOCH_2CH_3$, $CH_3CH_2COOCH_3$; ②处有 $HCOOCH_2CH_2CH_3$ (氧原子不能连到H上,连到H上官能团就变为羧基了,不是酯基了); ③处有 $HCOOCH(CH_3)_2$ (同②处分析)。

综上所述,官能团位置异构的分析也就是在碳链异构的基础上分析等效氢,等效键(具体根据官能团的特点考虑C-C或C-H或C-C与C-H插入官能团,若官能团不对称,则要正反插入两次)的问题,然后分别使用取代法与插入法即可。

(收稿日期:2016-02-17)