Subject:
Year. Month. Date. ( )

آلی ۱

شروع شیمی آلی :

$$Pb(OCN)_2 + 2H_2O + 2NH_3 \longrightarrow 2\, H_2N\overset{O}{\overset{\|}{C}}NH_2 + Pb(OH)_2$$

معدنی — آلی

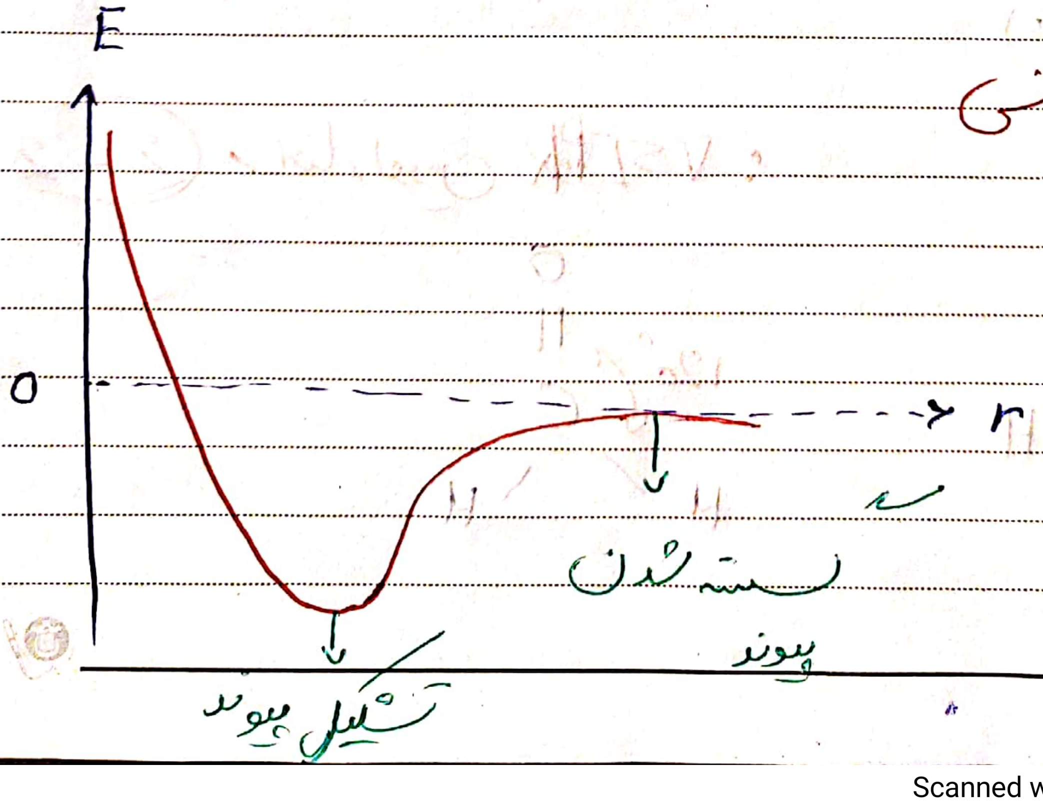
فصل ۱ : ساختار و تشکیل پیوند

در این فصل به یادآوری آنچه از قبل می‌دانیم خواهیم پرداخت

⓪ قانون کولن : نیروی بین اتم‌ها ⟶ $F_e = K \frac{q_1 q_2}{r^2}$

① تشکیل پیوند:

(۱-۱) پیوند کووالانسی



Subject:
Year. Month. Date. ( )

2-1 پیوند یونی :

$Na \longrightarrow Na^{+} + e^{-}$ IE(IP) = 119 $Kcal.mol^{-1}$

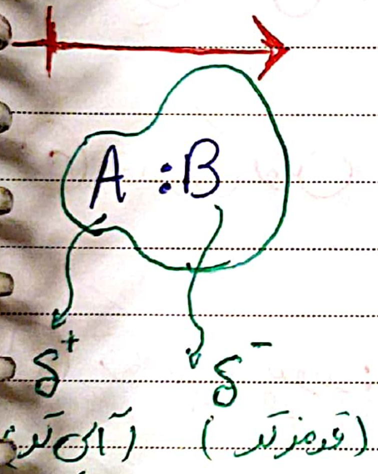
$Cl + e^{-} \longrightarrow Cl^{-}$ EA = -83 $Kcal.mol^{-1}$

$\rightarrow Na + Cl \longrightarrow NaCl$: ~~36~~ $Kcal.mol^{-1}$

-84 $Kcal.mol^{-1}$ ← به علت ایجاد جاذبه بین یون

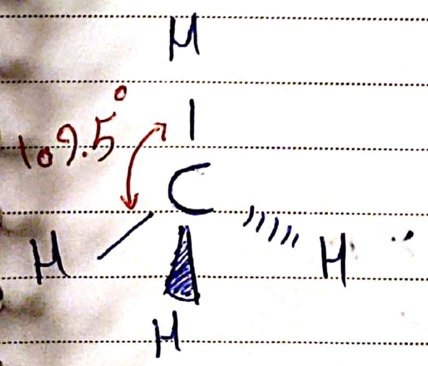
2 ساختار لوویس و قطبیت پیوند :

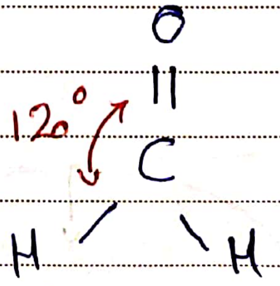
2-1 قطبیت و الکترونگاتیوی :



$\Delta E.N$
- $< 0.3 \rightarrow$ non Polar
- $0.3 < \quad < 2 \rightarrow$ Polar
- $> 2 \rightarrow$ ionic

2-2 ساختار لوویس VSEPR :

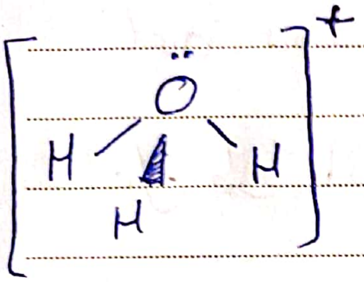




Subject:
Year. Month. Date. ( )

③ بار قراردادی :

$F.C = \#V.S\,e^- - \#nonbonding\ e^- - \frac{1}{2}\#bonding\ e^-$



$O: 6 - 2 - \frac{1}{2}(6) = +1$ → هیچ ربطی به معنای الکترونگاتیو ندارد!!!

④ اوربیتال :

⑭ رفتار کوانتمی :

$\psi_n(x)$ → تابع موج / توصیف حرکت الکترون

ψ^2 → چگالی احتمال حضور الکترون

$\psi = 0$ → گره تابع موج →
- $n - l - 1$ → # گره شعاعی
- l → # گره زاویه‌ای

Subject:
Year. Month. Date. ( )

2-1) سه بحث مهم :

اصل آفبا ← ترتیب پرشدن زیرلایه ها

قاعده هوند ← اول یک الکترون در هر اوربیتال

اصل طرد پائولی ← ماکسیمم ظرفیت هر اوربیتال = ۲ الکترون

5) تشکیل پیوند کووالانسی :

تشکیل یا عدم تشکیل پیوند ← نوع برهم کنش توابع موج

اوربیتال پیوندی ↑

تداخل سازنده ← ψ_1 , ψ_2 هم فاز هستند

تداخل ویرانگر ← ψ_1 و ψ_2 در فاز مخالف هستند

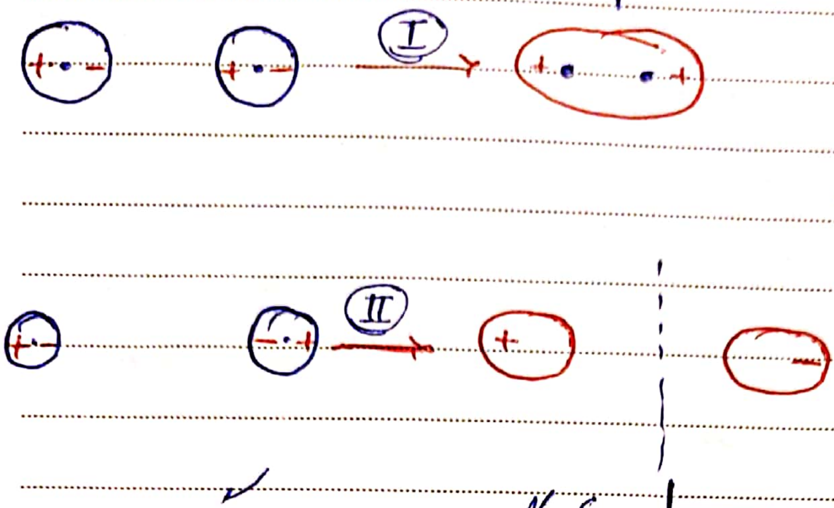
↓ اوربیتال ضدپیوندی

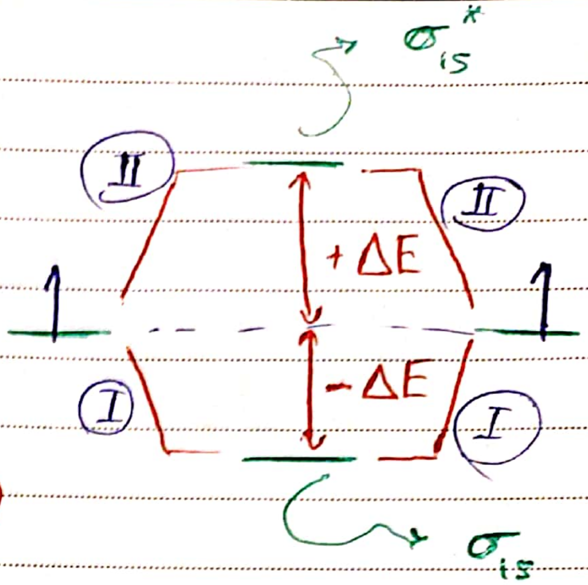
$$\psi_i = C_{1i}\chi_1 + C_{2i}\chi_2 + \cdots$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_i = \sum_{r=1}^{n} C_{ri}\chi_r}$$

Scanned with CamScanner

در وسط دارای چگالی احتمال بالا است





در وسط دارای چگالی احتمال صفر (گره) است

برای اوربیتال‌های هم انرژی (مثل 2P)

- کله به کله ← σ_{2p} و σ^*_{2p} (در امتداد محور هسته‌ها)
- جانبی ← π_{2p} و π^*_{2p} (عمود بر محور هسته‌ها)

$$\text{bond order} = \frac{1}{2}(\#\, b.e^- - \#\, a.b\, e^-)$$

6) توجیه خاصیت مغناطیسی :

از شیمی عمومی و معدنی می دانیم

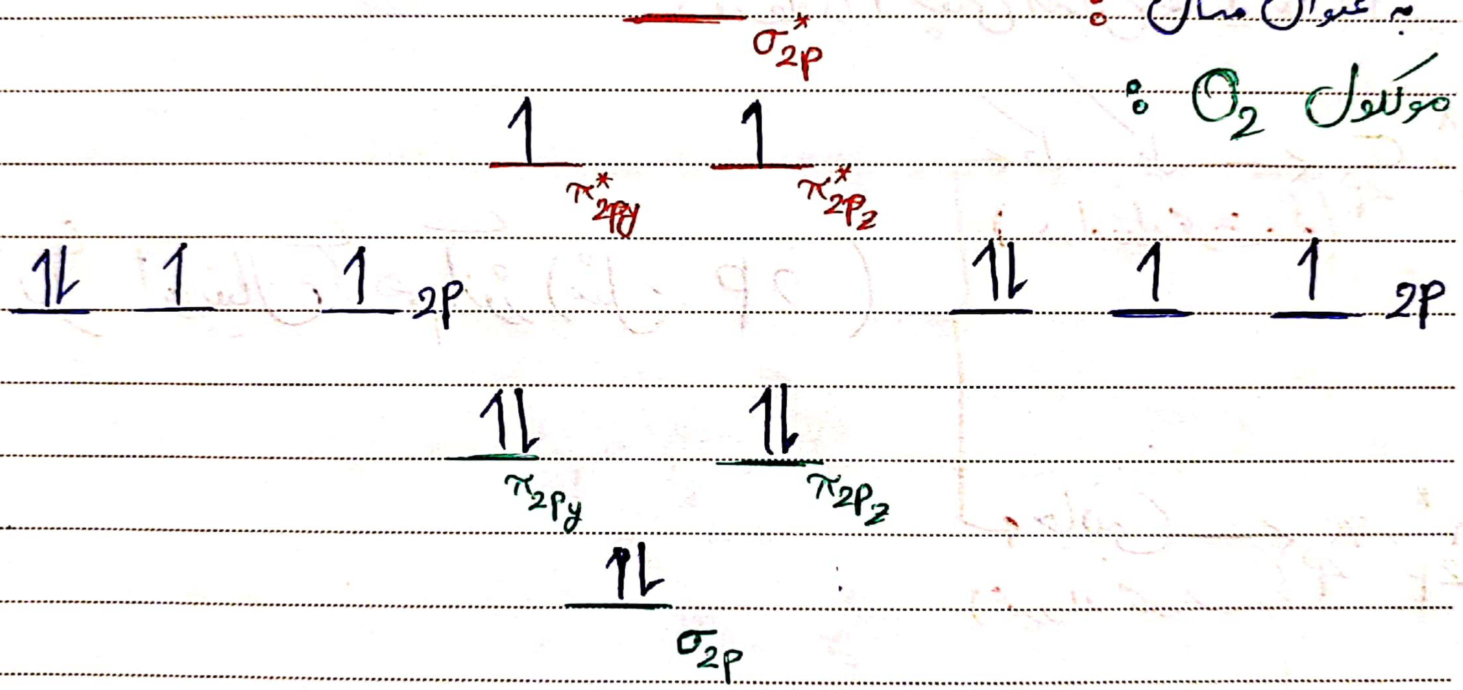
$\mu_s = \sqrt{n(n+2)}$ B.M , $1\ B.M \simeq 9.274\times10^{-24}\ \frac{J}{T}$

برای مواد دیامغناطیس $\mu = 0$, $n = 0$

برای مواد پارامغناطیس $\mu_s > 0$, $n \geq 1$

به عنوان مثال :

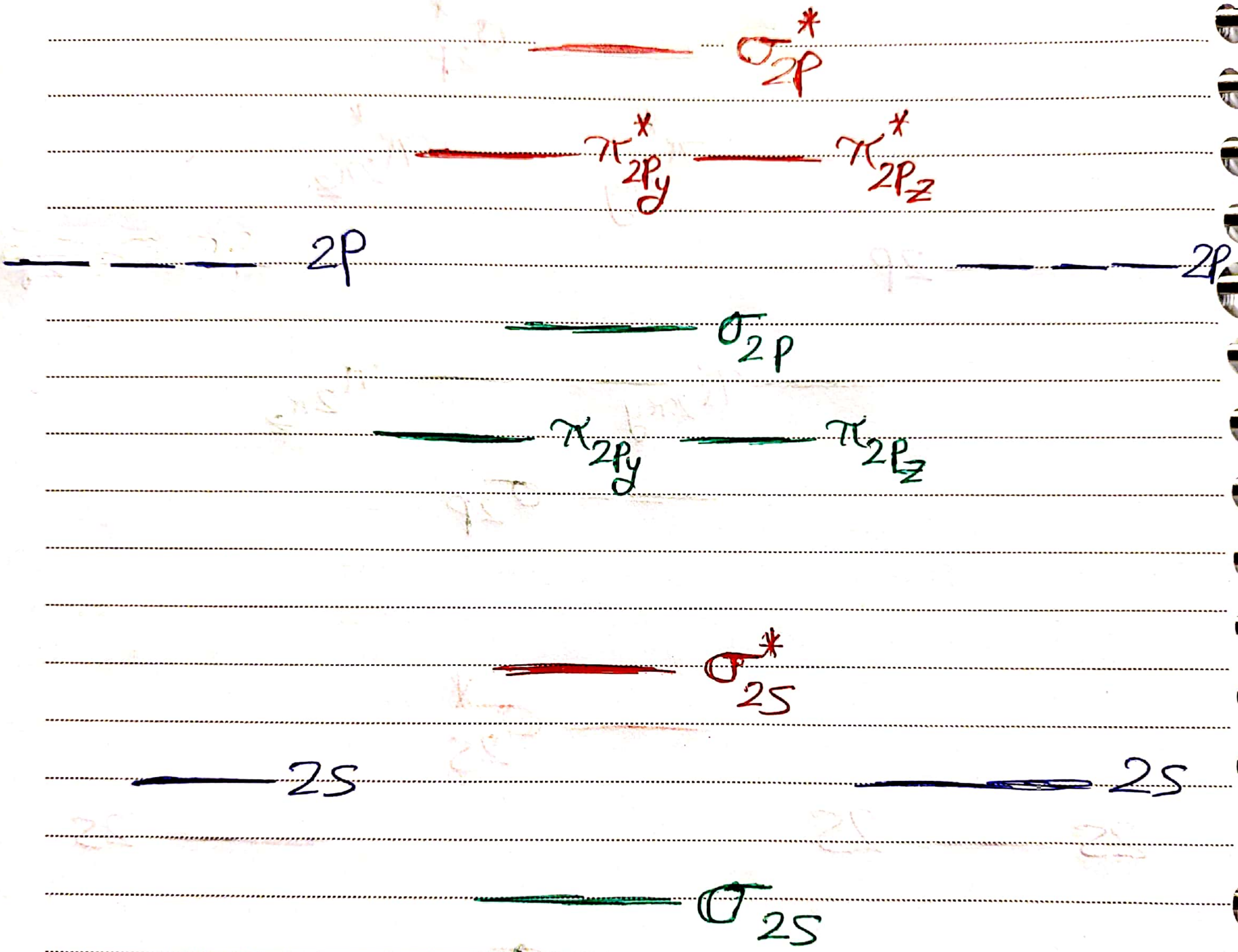
مولکول O_2 :



$n \geq 1 \longrightarrow \mu_s > 0 \longrightarrow$ مولکول O_2 پارامغناطیس است

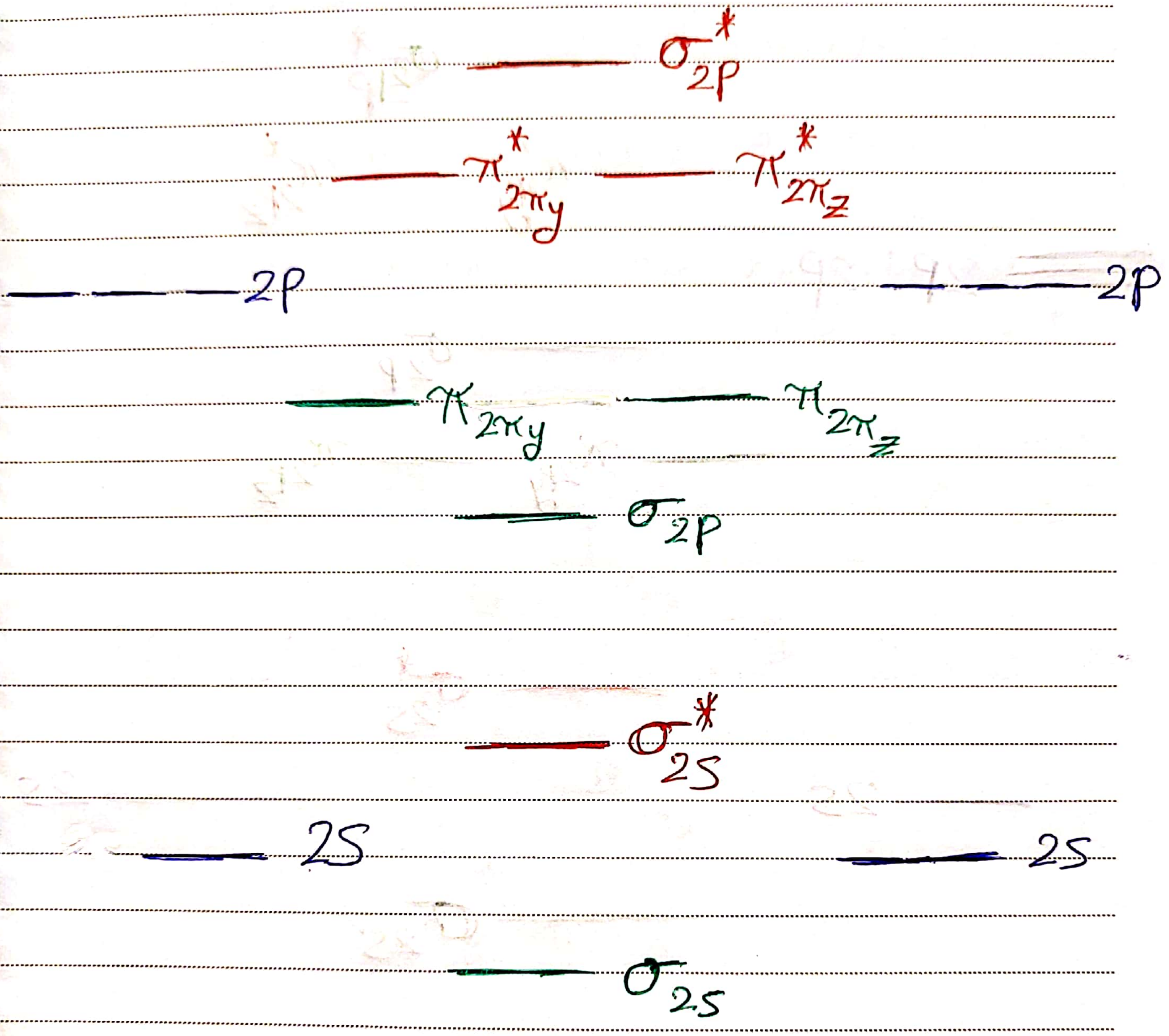
Subject:
Year. Month. Date. ( )

⑦ ساختار الکترونی مولکول های دو اتمی H_2, He_2, Li_2, Be_2, B_2, C_2, N_2:



Subject:
Year. Month. Date. ( )

O_2 , F_2 , Ne_2



Scanned with CamScanner

⑧ اوربیتال ناپیوندی HOMO و LUMO :

HOMO : Highest Occupied Molecular orbital

LUMO : Lowest unoccupied Molecular orbital

واکنش بین اسید لوویس و باز لوویس :

اگر اسید لوویس را طبق تعریف، "گونه دارای اوربیتال خالی (LUMO)"

و باز لوویس را طبق تعریف، "گونه دارای جفت الکترون ناپیوندی (HOMO)"

بدانیم واکنش بین اسید و باز را می‌توان توجیه کرد.

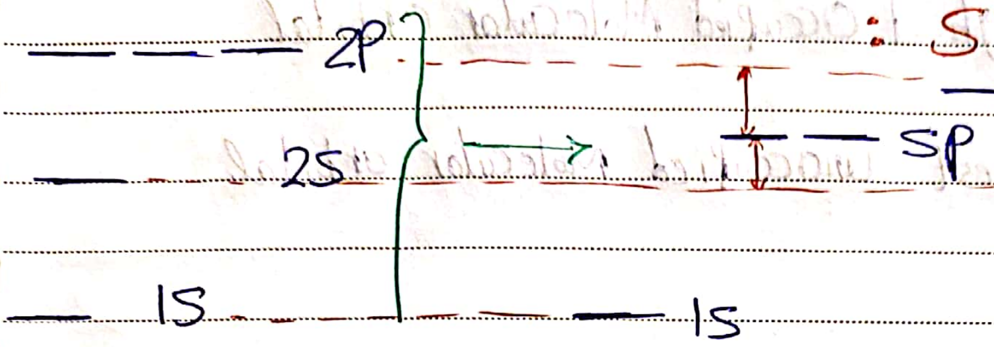
تذکر: HOMO و LUMO را در ادامه شیمی آلی و به خصوص در

شیمی فیزیک آلی مطالعه خواهیم کرد.

Scanned with CamScanner

۹) اوربیتال هیبریدی:

۹-۱) هیبرید SP:

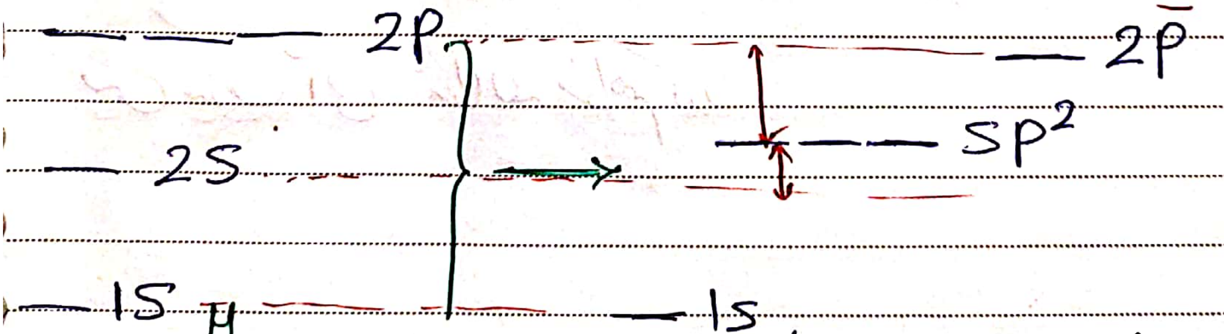


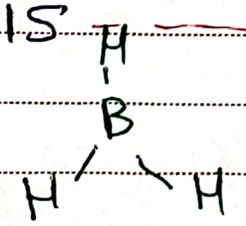
۱- این هیبریداسیون ساختار خطی می دهد   H—Be—H

۲- 50% خاصیت P دارد

۳- کربن برای پیوند سه گانه استفاده می کند (دو پیوند σ، دو پیوند π)

۹-۲) هیبرید SP^2:



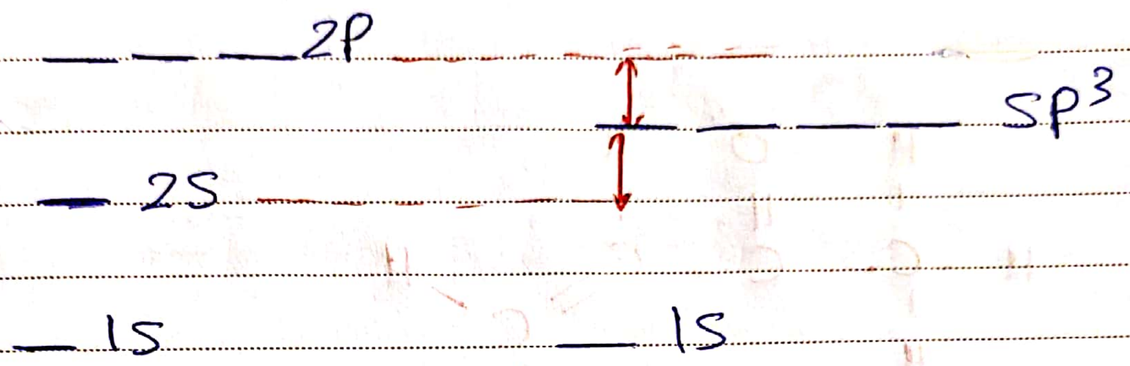


۱- این هیبریداسیون ساختار مسطح مثلثی دارد ←

۲- 66% (67%) خاصیت P دارد

۳- کربن برای پیوند دوگانه استفاده می کند (سه پیوند σ، یک پیوند π)

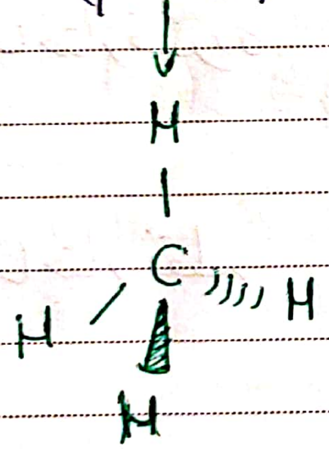
۳-۹) هیبرید sp^3 :



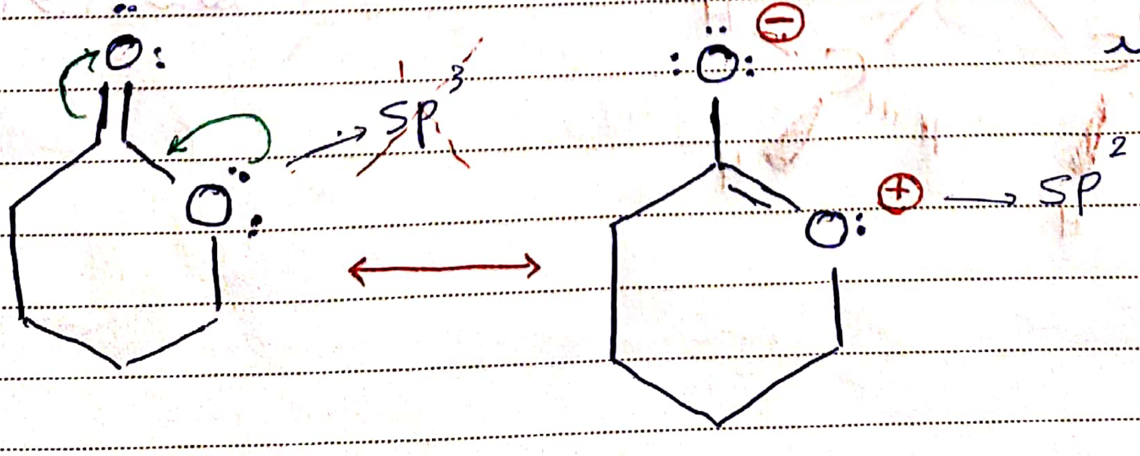
۱- این هیبریداسیون شکل تتراهدرال (هرم چهاروجهی) چهاروجهی منتظم) دارد

۲- 25٪ خاصیت P دارد

۳- کربن برای پیوند یگانه استفاده می کند
(چهار پیوند σ)

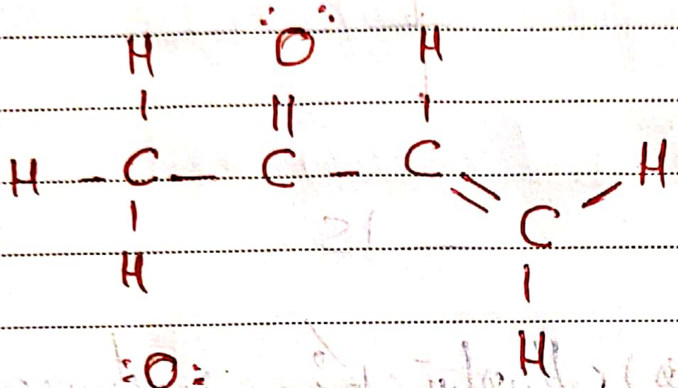


تذکر: اگر sp^3 داشتیم که شامل ناپیوندی بود، رزونانس داریم و می تواند متفاوت باشد



(15) ساختار آلی :

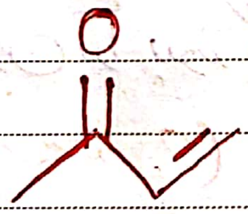
ساختار گسترده



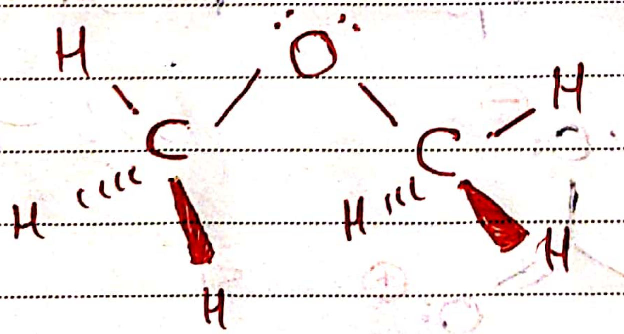
ساختار فشرده

$$H_3C\overset{\overset{\displaystyle :\ddot{O}:}{\|}}{C}CH=CH_2$$

ساختار نقطه

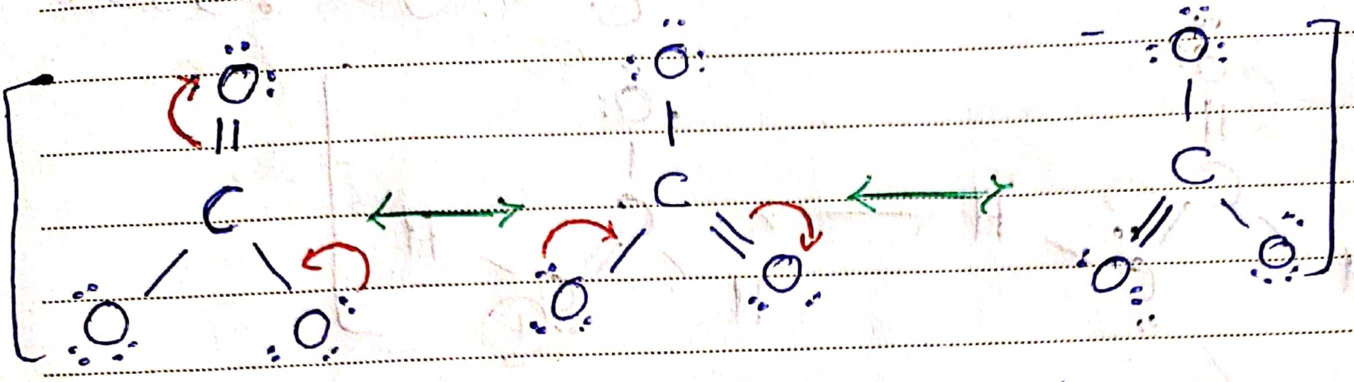


ساختار سه بعدی

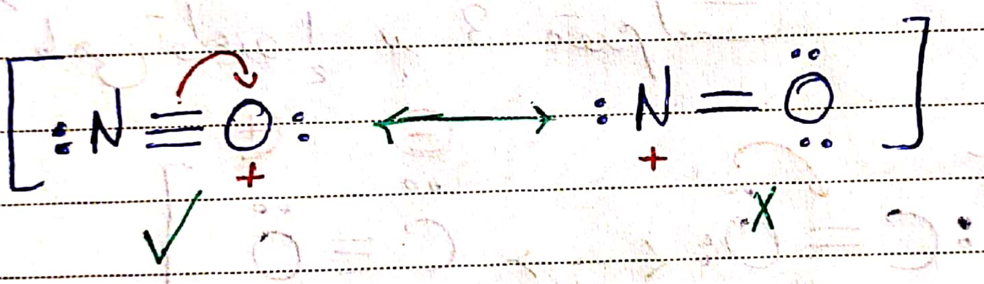


Subject:
Year. Month. Date. ( )

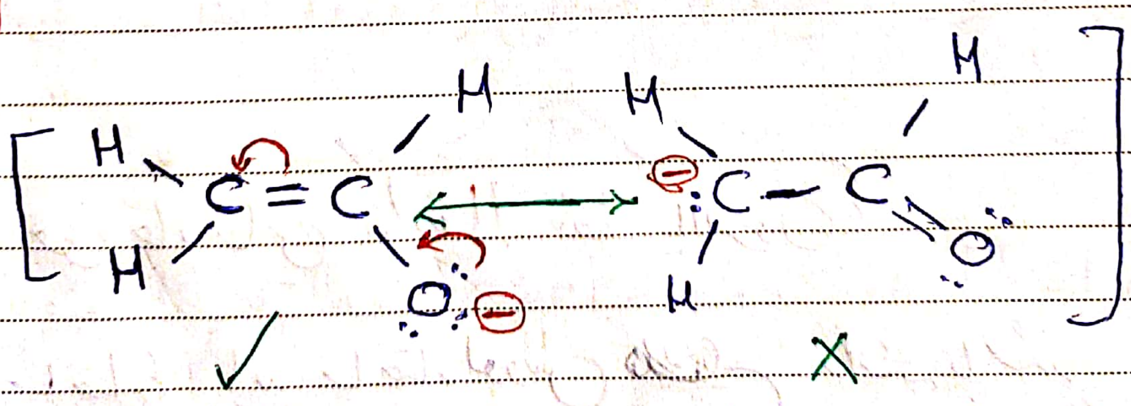
(11) رزونانس :



قاعده ۱ : ماکزیمم اوکتت ارجح است

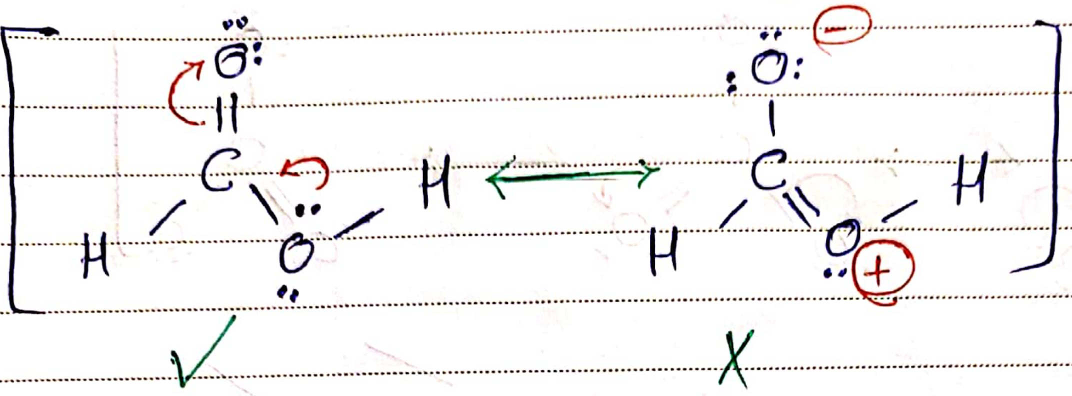


قاعده 2 : بار روی اتم با الکترونگاتیوی آنها باید سازگار باشد ← اولویت با قاعده ۱ است

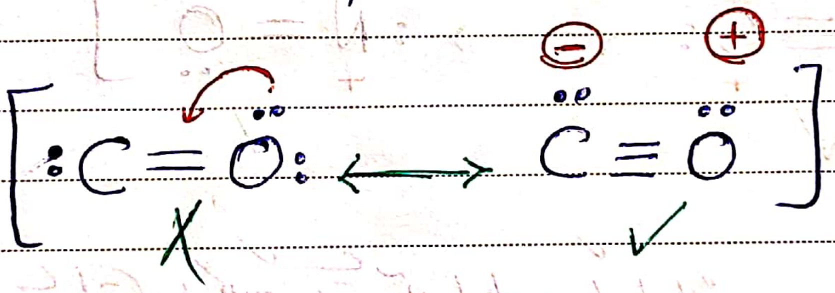


Subject:
Year. Month. Date. ( )

قاعده 3 : حداقل جدایی بار ارجح است



تذکر: گاهی قاعده ۲ به 3 مقدم است



چند تذکر:

1) اتم ها حق جابجایی ندارند!! فقط الکترون ها.

2) تمام ساختارها باید ساختار لوویس صحیح داشته باشند

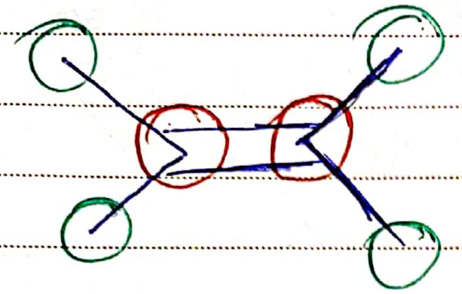
3) ساختارها باید تعداد جفت پیوندی و ناپیوندی (الکترون های جفت شده) و تکی یکسان داشته باشند

4)

Subject:
Year. Month. Date. ( )

شناخت الگوی رزونانس :

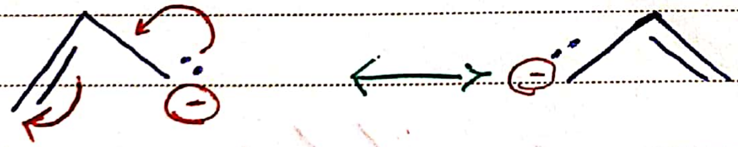
① آلیلیک و وینیلیک :



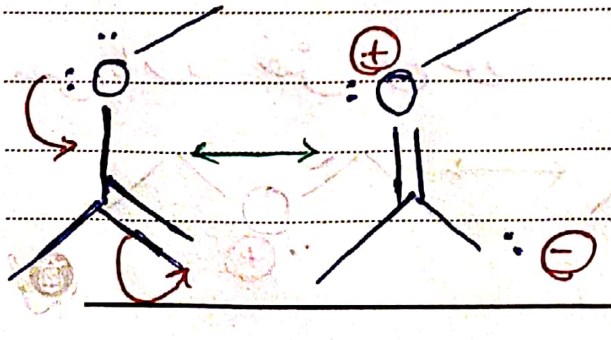
به طور کلی رزونانس در ساختار آلیلیک در اثر حضور اتمی با الکترون جفت شده ناپیوندی در کنار اتمی با پیوند چندگانه ایجاد می شود

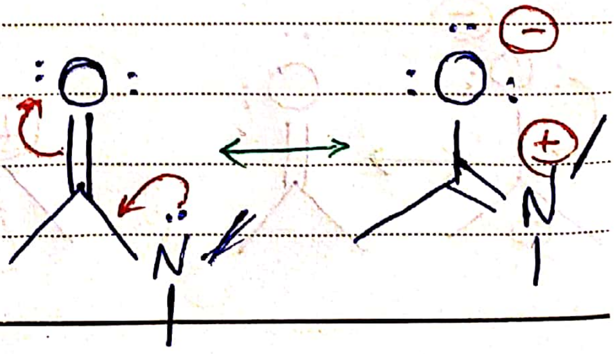
دو نکته مهم در ساختار رزونانسی آلیلیک :

۱- اگر اتم دارای جفت ناپیوندی دارای بار منفی باشد، بار منفی به اتم گیرنده الکترون که پیوند π متصل می شود. (آلیلیک در کربانیون)



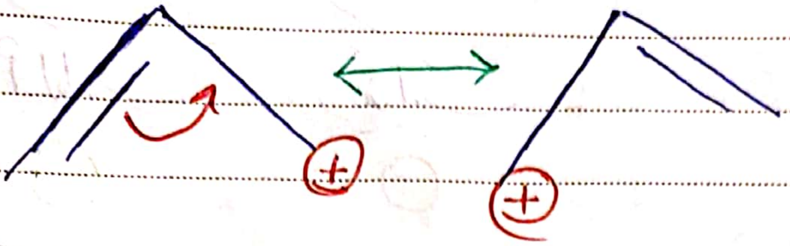
2- اگر اتم دارای جفت ناپیوندی خنثی باشد، باز هم بار منفی به اتم گیرنده الکترون که پیوند π متصل می شود، ولی اتم اول دارای بار مثبت می شود.





Scanned with CamScanner

② آلیلیک در کربوکاتیون :

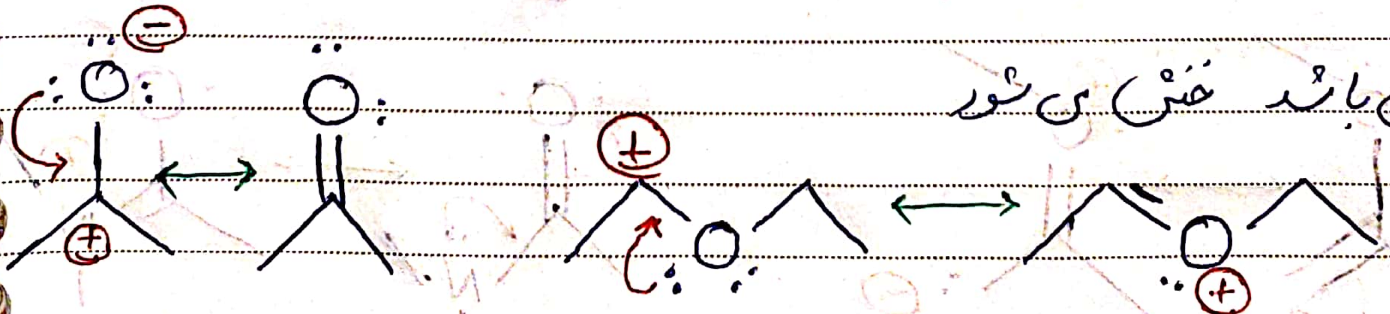


③ سیستم مزدوج (conjugated) :

پیوند π بین پیوند σ سیستم مزدوج را تشکیل می دهند

② جفت ناپیوندی در کربوکاتیون

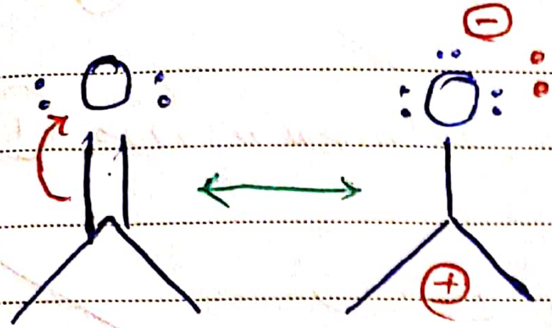
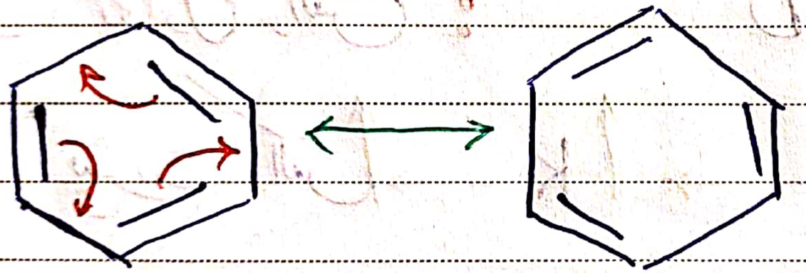
اگر اتم دارای جفت ناپیوندی خنثی باشد دارای بار مثبت شده و اگر دارای بار منفی باشد خنثی می شود



Scanned with CamScanner

Subject:
Year. Month. Date. ( )

② پیوند π بین دو اتم با الکترونگاتیو متفاوت:



③ سیستم مزدوج در حلقه: