

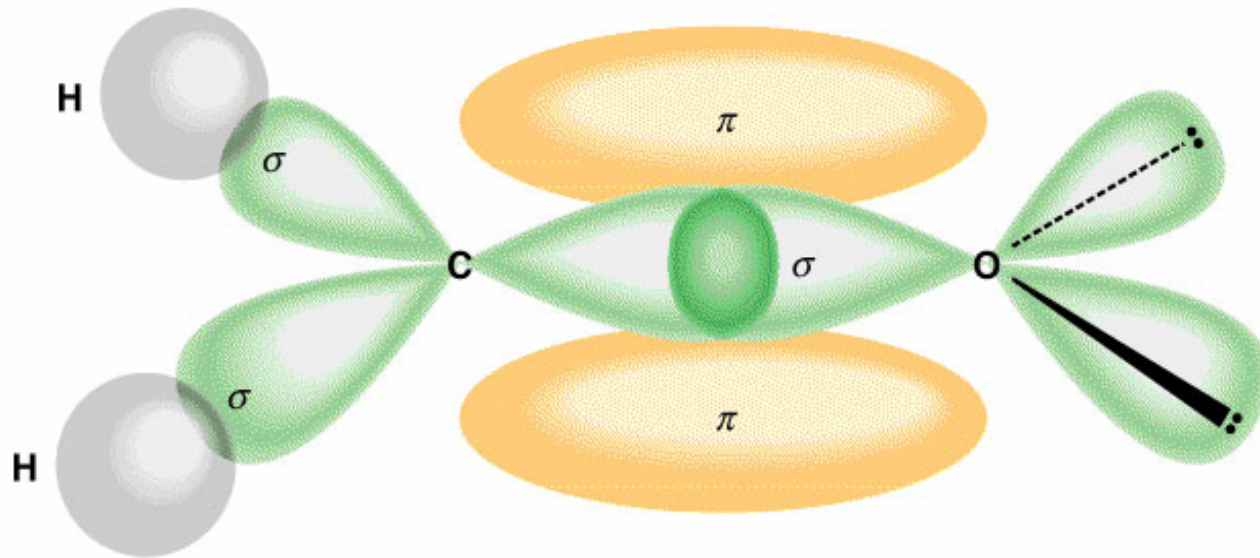
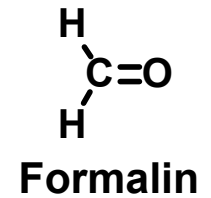
Atom- och molekylorbitaler

När två blir en...

**Chang, kapitel 9.1, 9.4, 10.1, 10.3 –
10.8**



Hybridisering - bindingsvinklar



VB-teori - Valence bond theory

- **Valence bond theory**
 - Elektronerna i en molekyl befinner sig i respektive atoms atomorbitaler.
 - Bindningar skapas genom att de olika atomorbitalerna överlappar varandra, det vill säga när två orbitaler delar ett gemensamt område i rymden.
 - Varje individuell atom är en del i molekylen och tillsammans skapar atomerna molekylens bindningar.



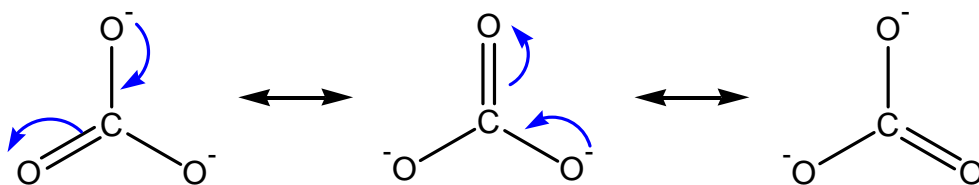
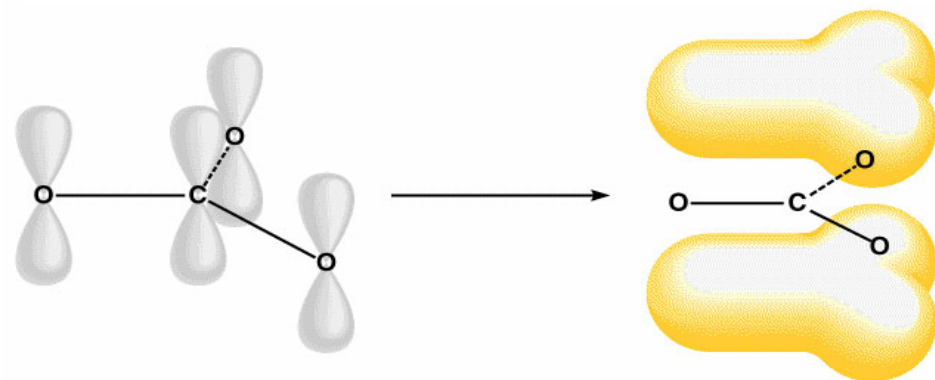
MO-teori

- **MO-teori (Molecular orbital)**
 - Molekylorbitaler skapas av de i molekylen ingående atomernas atomorbitaler.
 - Varje elektron deltar i en orbital som är karakteristisk för molekylen som helhet.
 - Om orbitalerna som överlappar varandra är i samma fas skapas en bindning, de kallas bindande orbitaler. De bindande orbitalerna har låg energi.
 - Om orbitalerna som överlappar varandra är i motsatt fas skapas ingen bindning, de kallas antibindande orbitaler. De antibindande orbitalerna har hög energi och är ostabila.



Hybridisering - resonans

- Konjugerade föreningar har liksom bensen delokaliserade elektroner, ett exempel är CO_3^{2-} (karbonatjonen).

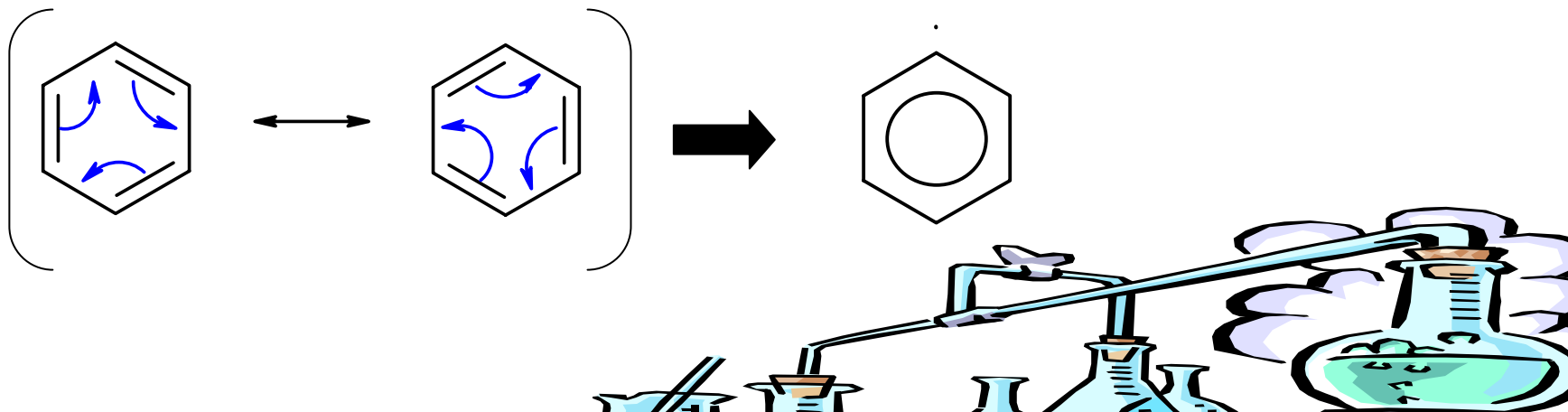


Resonansformer



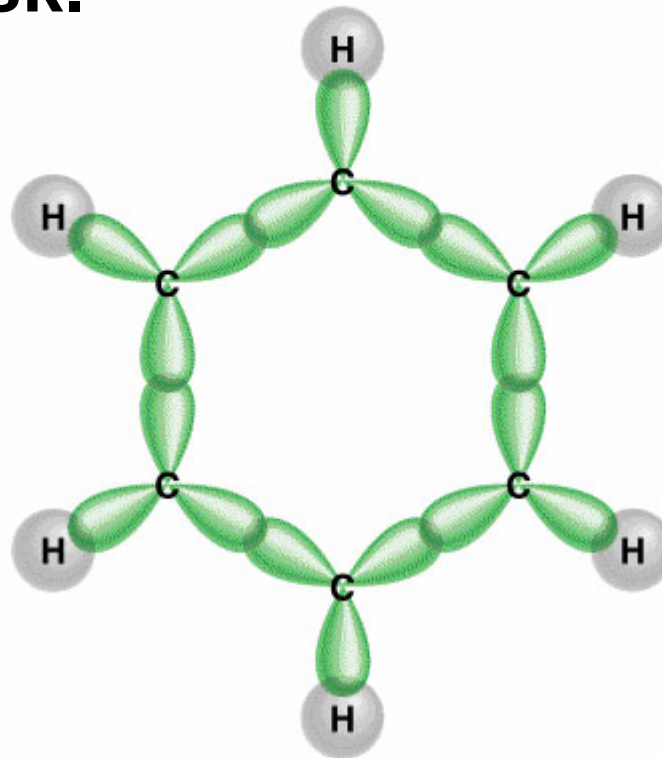
Hybridisering – aromatisitet

- En bensenring sägs ha delokaliserade elektronerna, dvs elektronerna befinner sig inte mellan två till varandra bindande atomer utan är "utdragna" över tre atomer eller fler. Elektronerna är fria att röra sig runt i bensenringen.



Hybridisering - aromatisitet

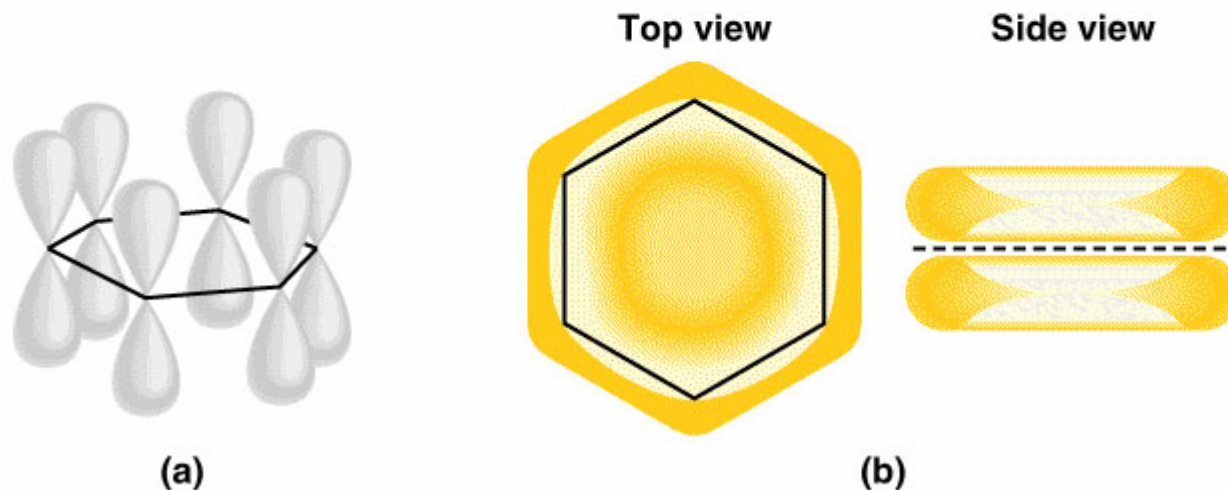
- Molekylen är cyklisk.
- Alla kolen är sp^2 -hybridiserade.
- Molekylen är konjugerad.
- Molekylen är plan.



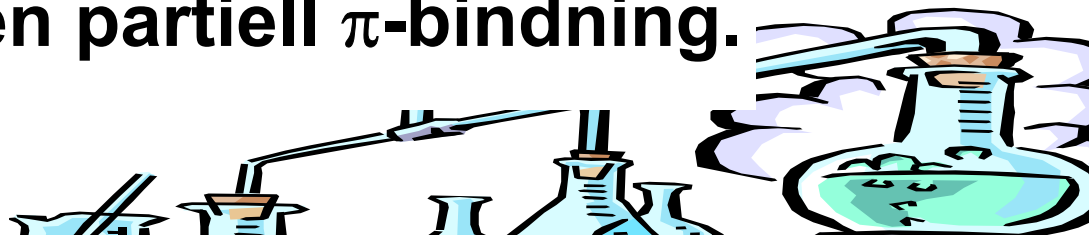
Bilden visar σ -bindningarna



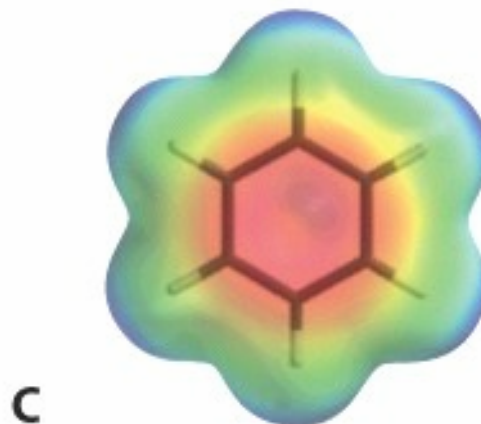
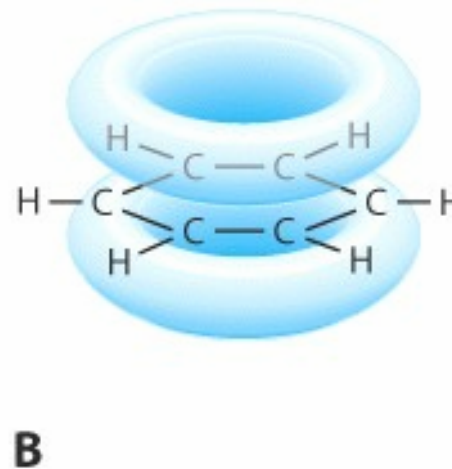
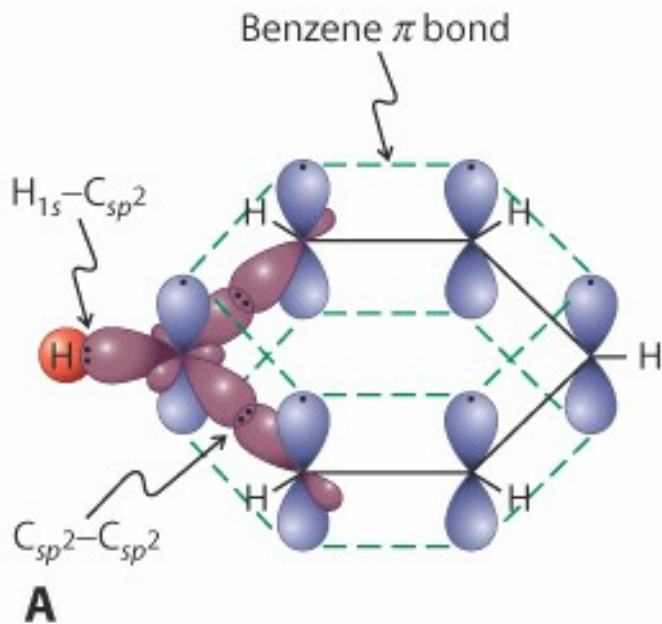
Hybridisering - aromatisitet



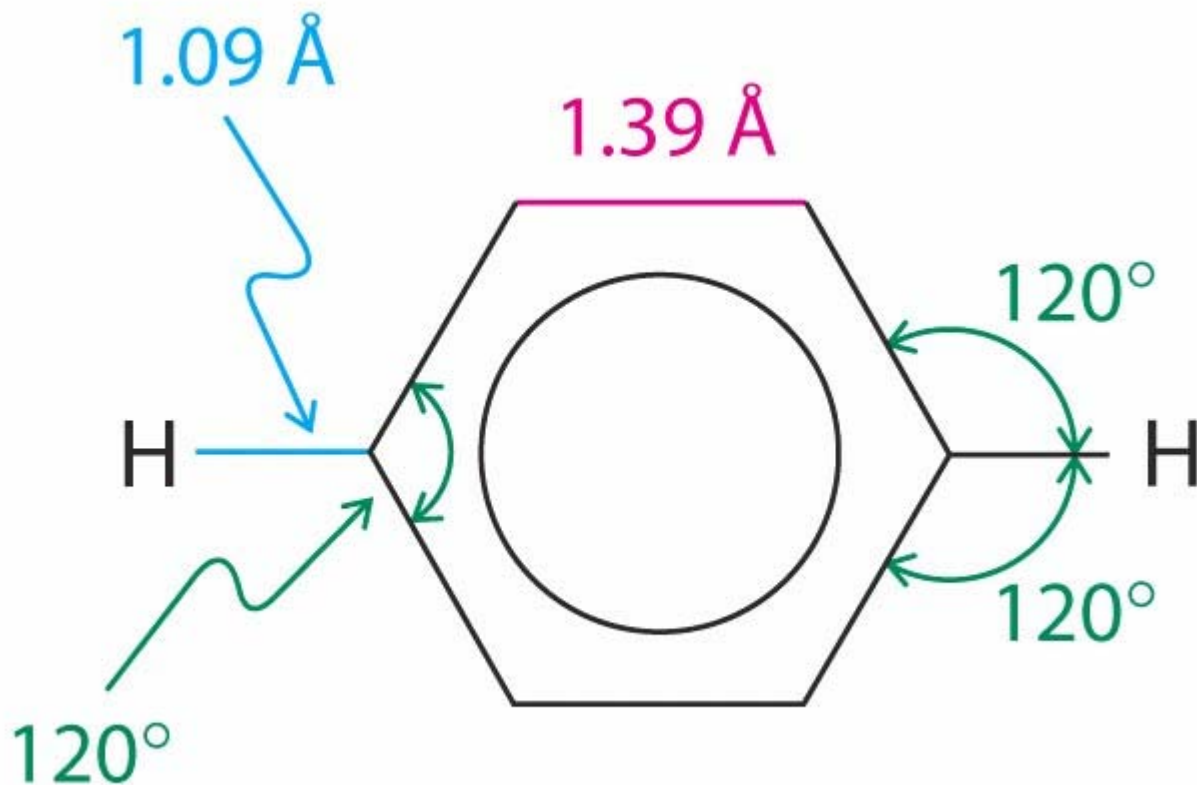
- Elektronerna hoppar fritt mellan p-orbitalerna. Varje "fog" mellan två kolatomer i bensenringen består av en σ -bindning och en partiell π -bindning.



Hybridisering - aromatisitet

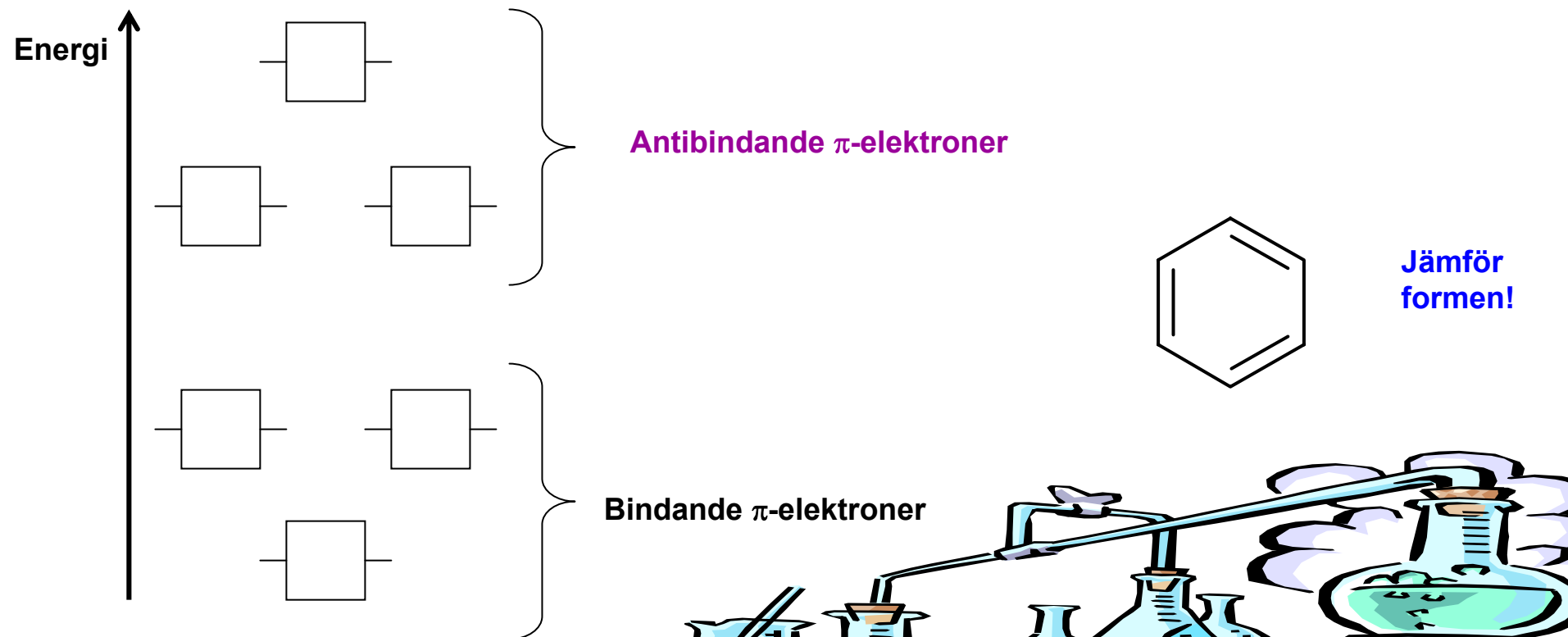


Hybridisering - bensen

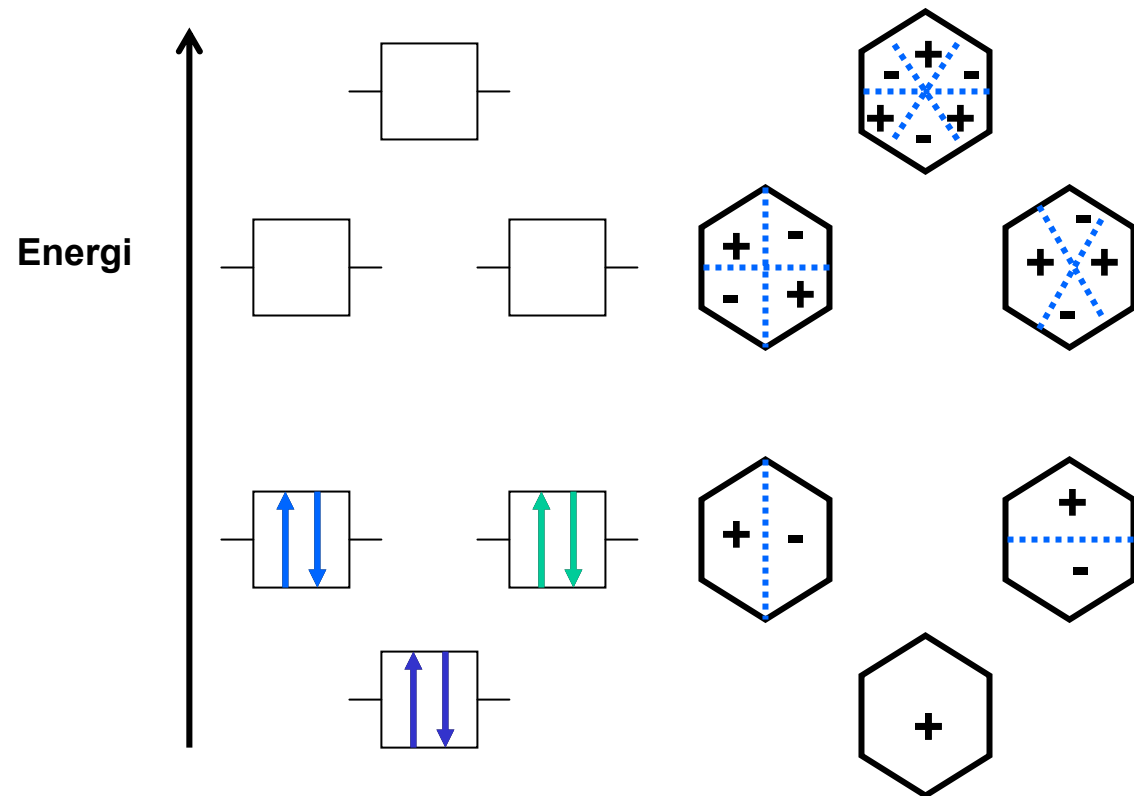


MO - aromatisitet

- Ett energidiagram över bensens tre π -bindningar ritas upp:



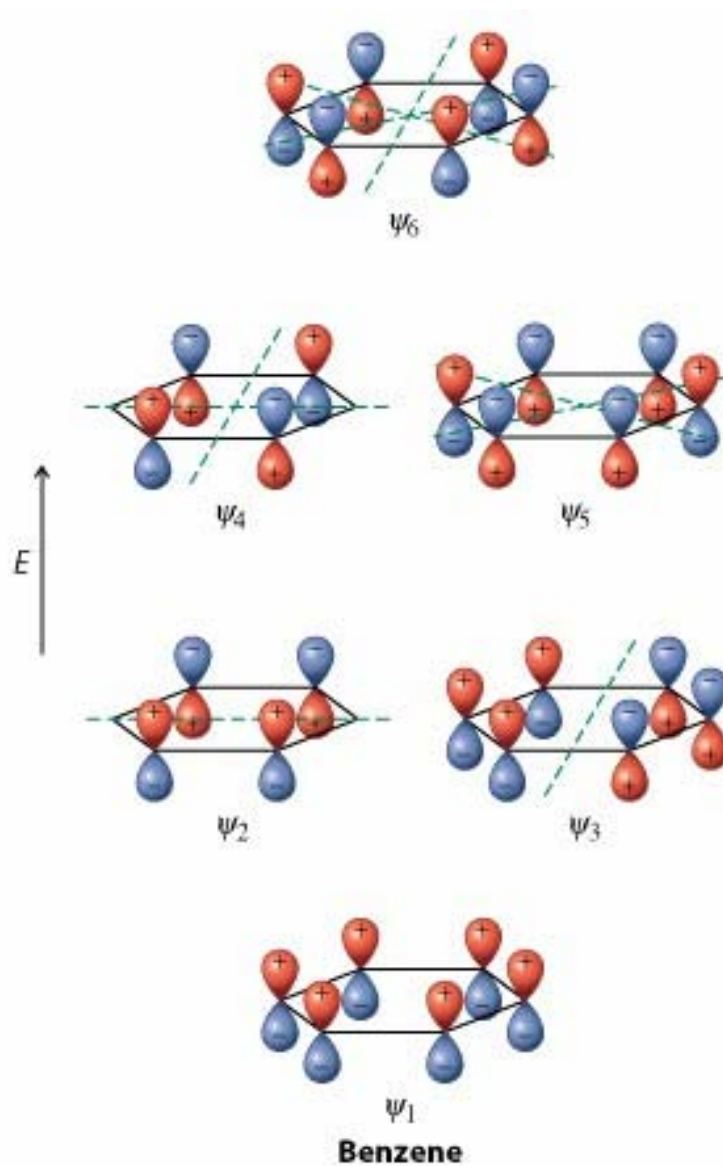
MO - aromatisitet



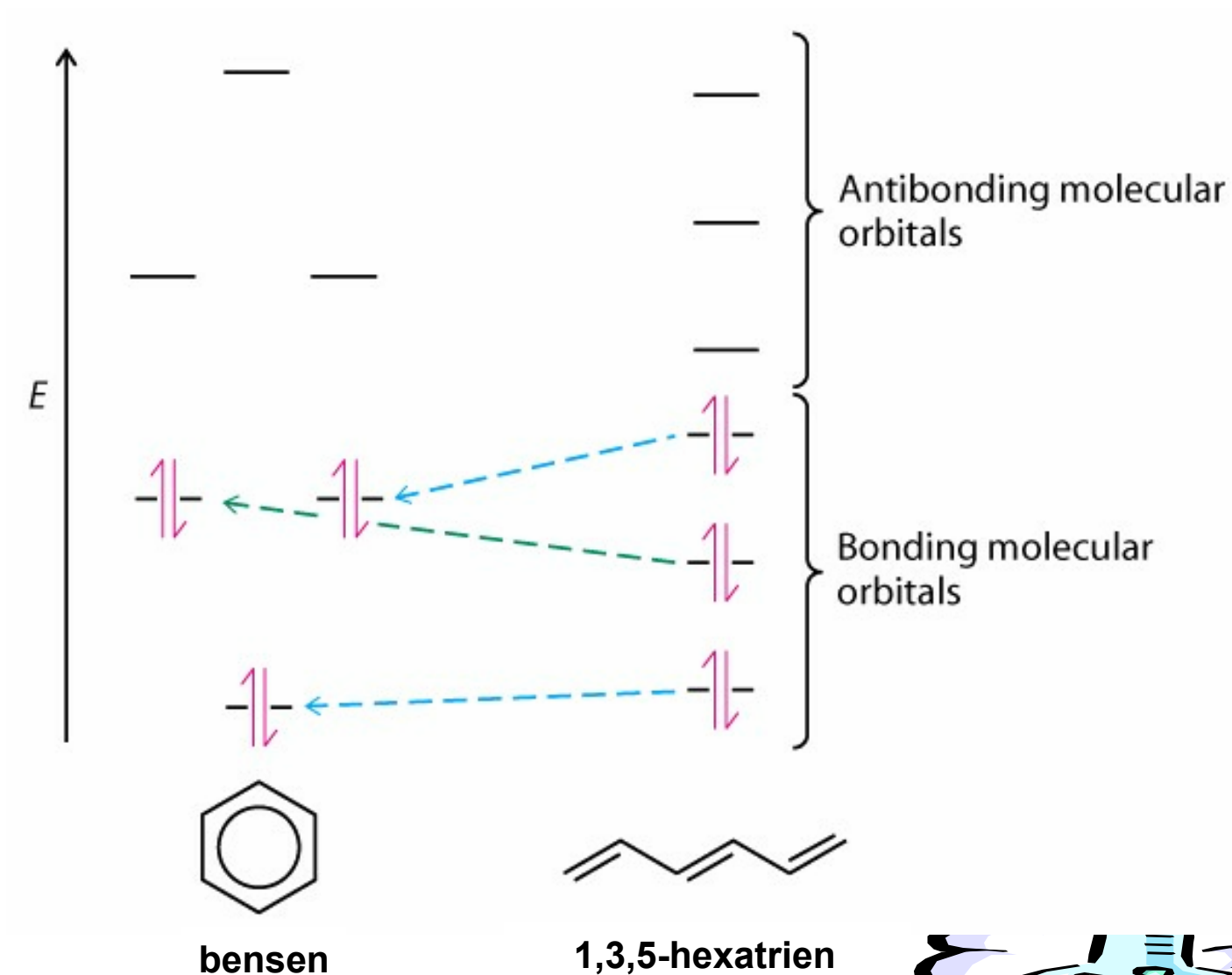
- Antalet noder avgör om vi får en bindande eller en antibindande π -bindning.
- Om molekylen är aromatisk ska alla bindande π -orbitaler vara fyllda.



MO - aromatisitet



MO - aromatisitet

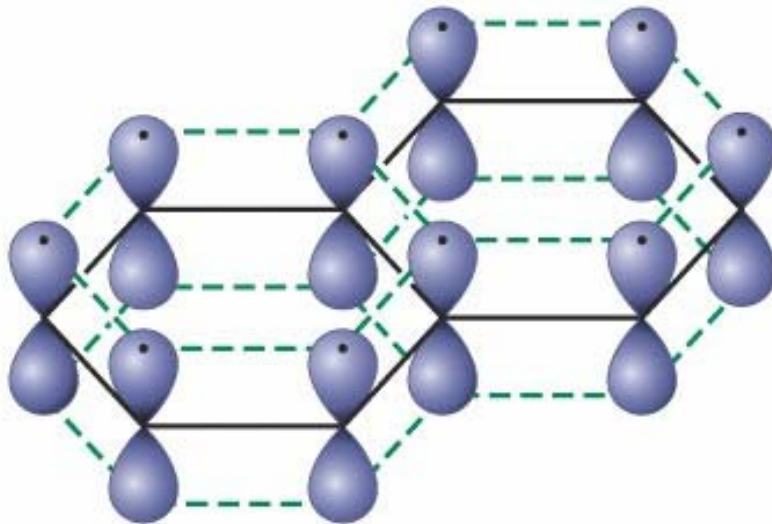
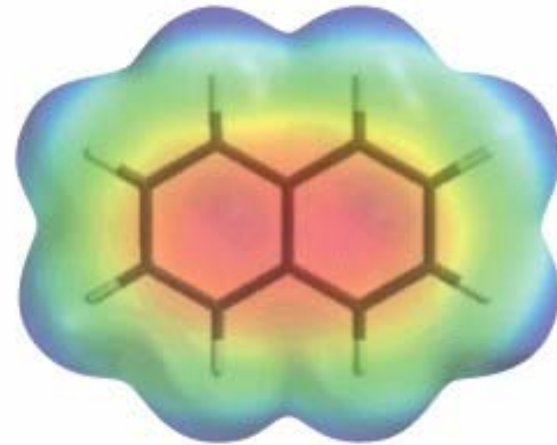
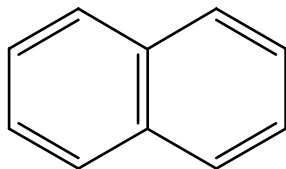


Hybridisering - aromatisitet

- Kan andra molekyler än bensen vara aromatiska?
 - plan
 - cyklisk
 - sp^2 -hybridiserade kol
 - konjugerad
 - uppfyller Hückels-regel

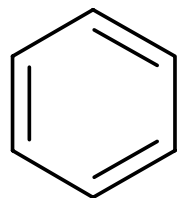


Aromatisitet - naftalen

**A****B**

Hybridisering - aromatisitet

- Hückels-regel:**
I en aromatisk molekyl finns $4n+2$ π - elektroner.
(n är ett heltal.)

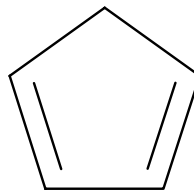


Bensen



$3 \times 2 = 6$ st elektroner

Uppfyller Hückels-regel
för $n = 1$.



Cyklopentadien

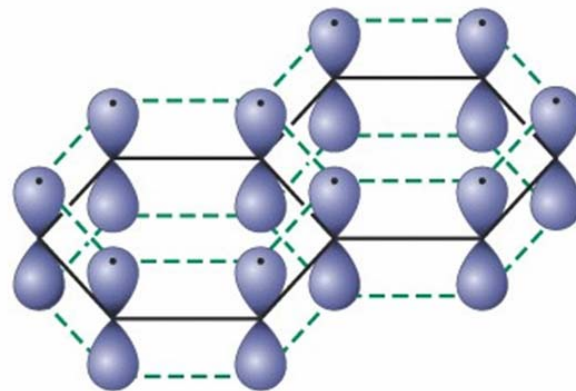
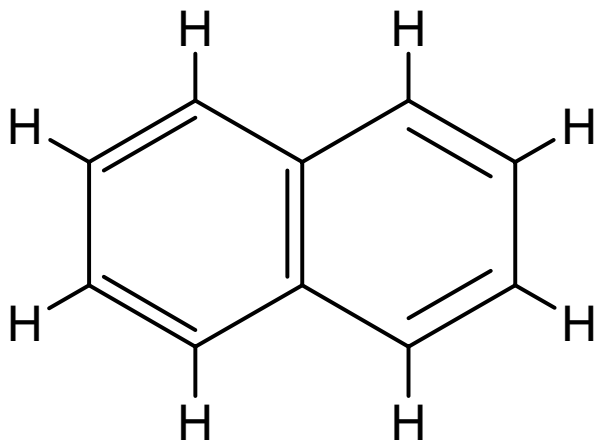


$2 \times 2 = 4$ st elektroner

Uppfyller INTE Hückels-regel.



Aromatisitet - naftalen



Hückel $4n+2$

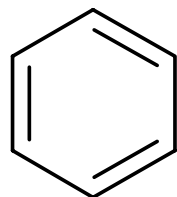
**Naftalen uppfyller Hückels-regel
för $n = 2$**

Naftalen är aromatisk



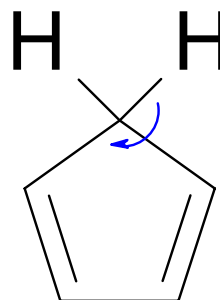
Hybridisering - aromatisitet

- Hückels-regel:**
 I en aromatisk molekyl finns $4n+2$ π - elektroner.
 (n är ett heltal.)



$3 \times 2 = 6$ st elektroner

Uppfyller Hückels-regel
för $n = 1$.

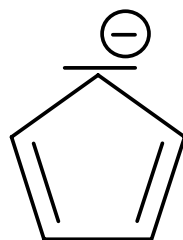


$2 \times 2 = 4$ st elektroner

Uppfyller INTE Hückels-regel.

Cyklopentadien

$-H^+$



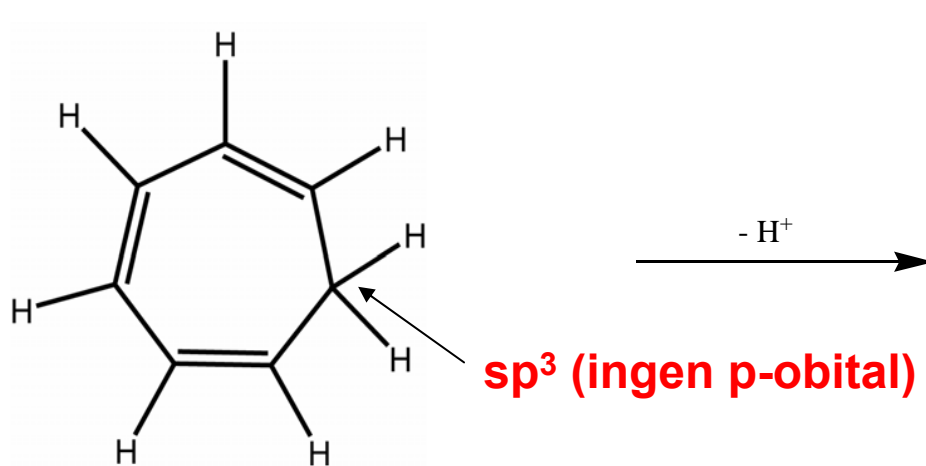
$3 \times 2 = 6$ st elektroner

Uppfyller Hückels-Regel
för $n = 1$.

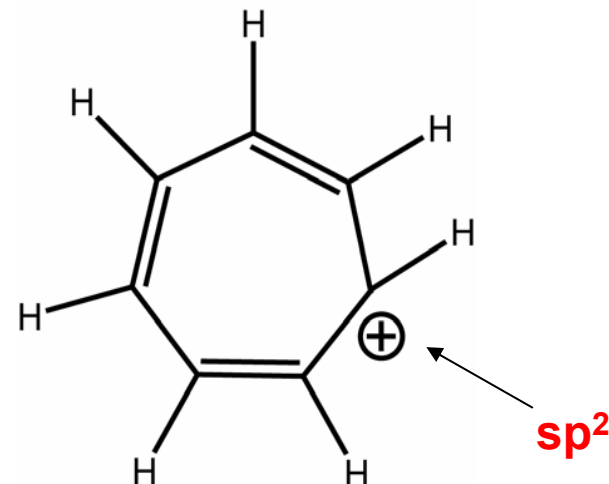
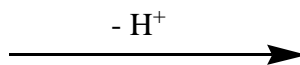
Anjon av
cyklopentadien



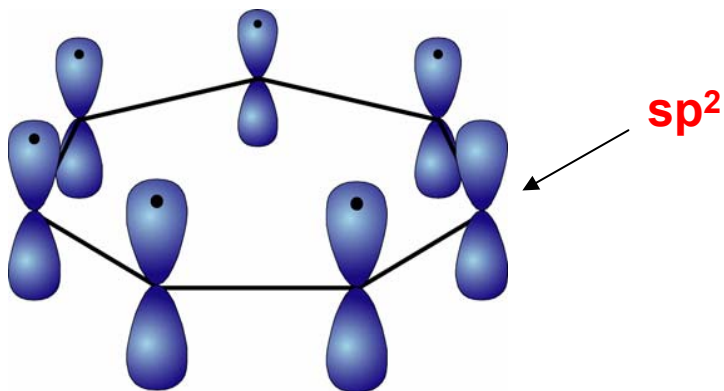
Aromatisitet - cykloheptatrien



Cykloheptatrien



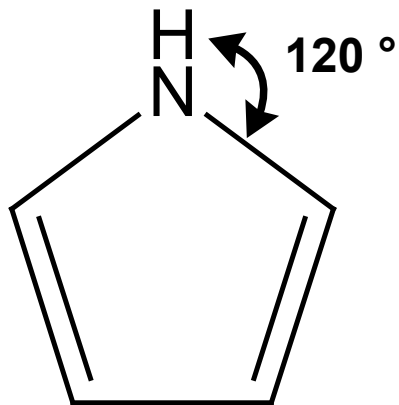
Cykloheptatrienkation



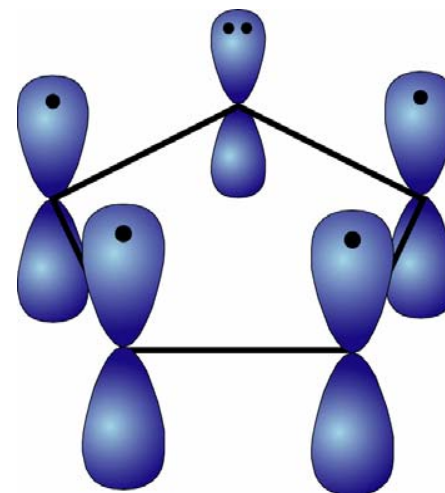
Cykloheptatrienkationen
uppfyller Hückels
regel för $n=1$
Cykloheptatrienkationen
är aromatiska



Aromatisitet - pyrrol



pyrrol



6 π -elektroner

Hückels regel $4n+2$

pyrrol uppfyller Hückels regel för $n=1$

pyrrol är aromatisk

