النادي الطبي

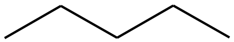
Organic chemistry

Lec: 5

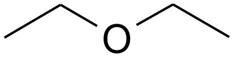
Done by: Dema Alhussine

Effects on Physical Properties (cont’d)

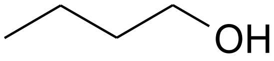
Hydrogen bonding: strongest intermolecular forces so BP are very high for equivalent MW compounds, i.e.



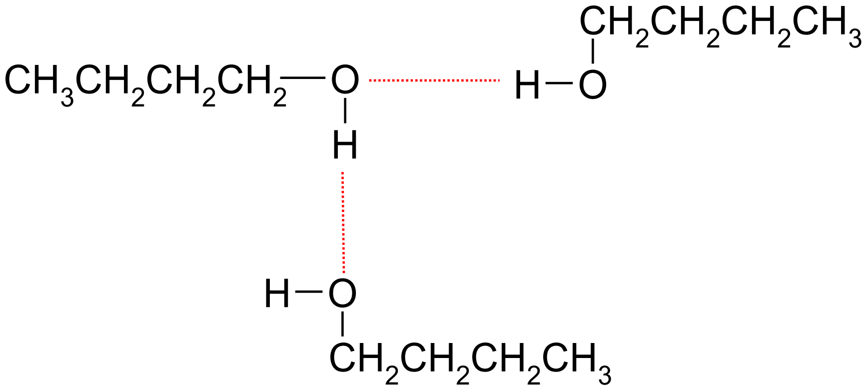
mass = 72 amu
BP = 36.1 °C

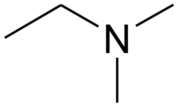


mass = 74 amu
BP = 35 °C

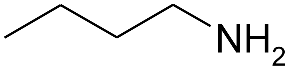


mass = 74 amu
BP = 117 °C





mass = 73 amu
BP = 36 °C



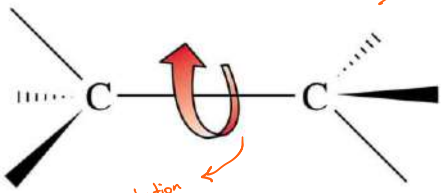
mass = 73 amu
BP = 78 °C

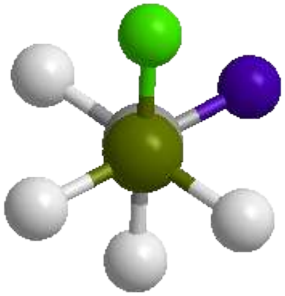
Conformational Isomers

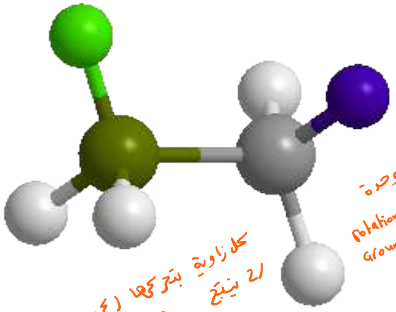
Conformational isomers (rotamers or conformers) are compounds with the same constitution (atoms are bonded in the same order) but the atoms are located in different places in space.

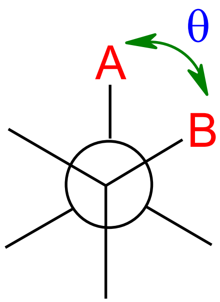
This is achieved by rotating about C-C single (s) bonds or the dihedral (or torsion) angle (q).

Rotation about a **single bond** occurs easily because the amount of overlap of the *sp*3 orbitals on the two carbon atoms is unaffected by rotation about the sigma bond









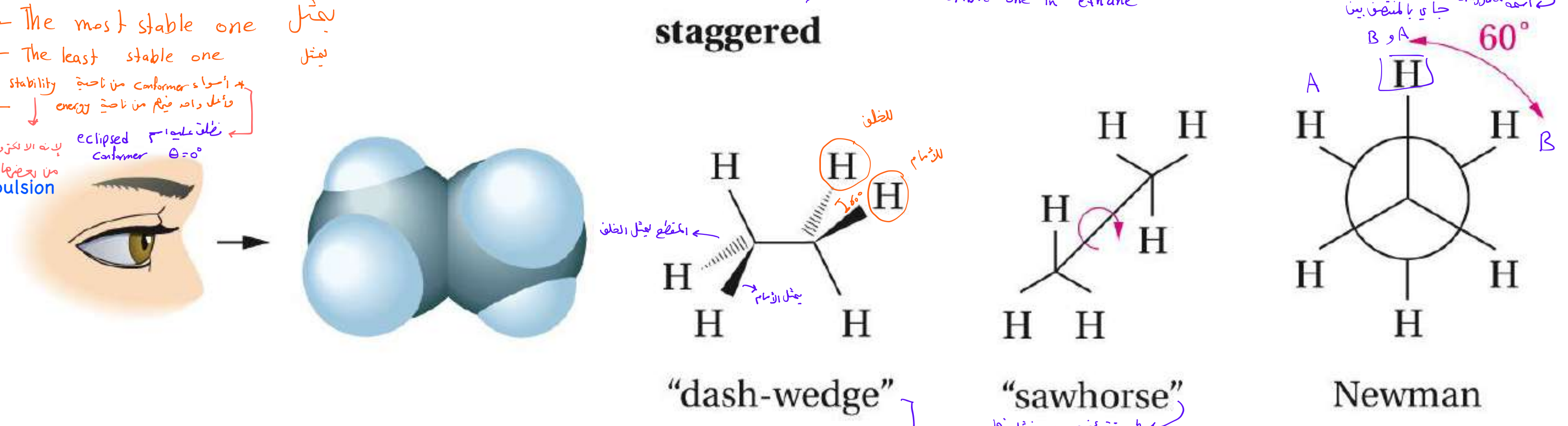
Conformational Isomers (cont'd)

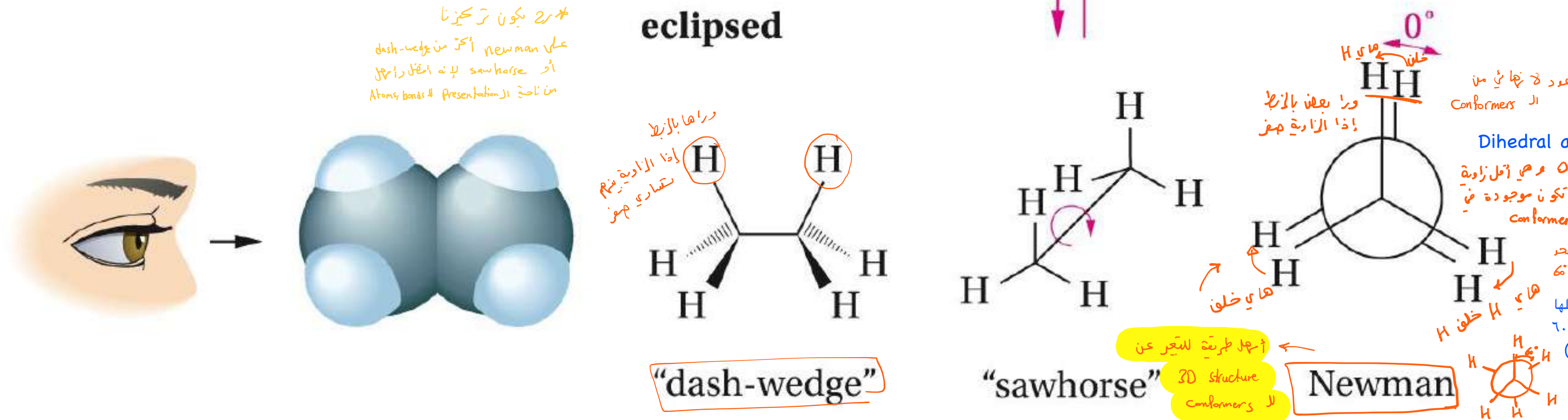
Two extremes exist for ethane: staggered & eclipsed

θ = 60° ← The most stable one

θ = 0° ← The least stable one

repulsion



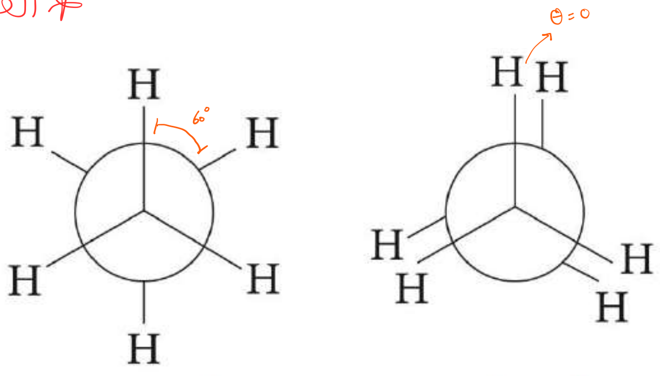


Conformational Isomers (cont'd)

* العلاقة بين relative energy و ال stability علاقة عكسية

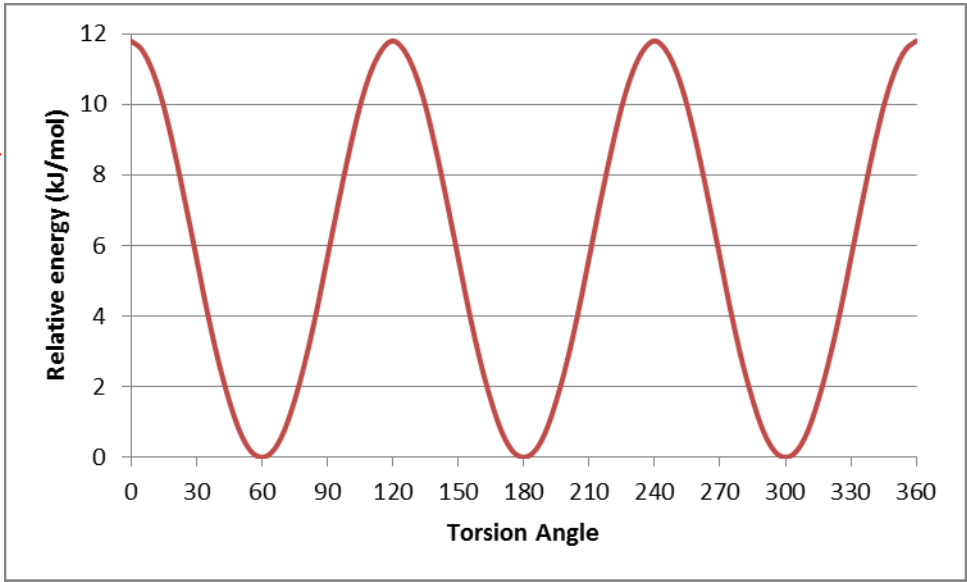
These two extremes represent high and low energy "conformations" of ethane. The "high" E is the eclipsed and low E the staggered.

* هل ال ethane دائماً staggered ؟



staggered — More Stable

eclipsed — More energy



Conformational Isomers (cont'd)

The difference in energy is caused by "steric" interactions between the H atoms. Steric interactions are repulsions caused when two atoms are too close together in space and their valence shell electrons repel each other.

إذا بدي أحول شكل هاد المركب من الأعلى استقرارية(الأقل طاقة) بحتاج طاقة مقدارها kcal/mol 3.0

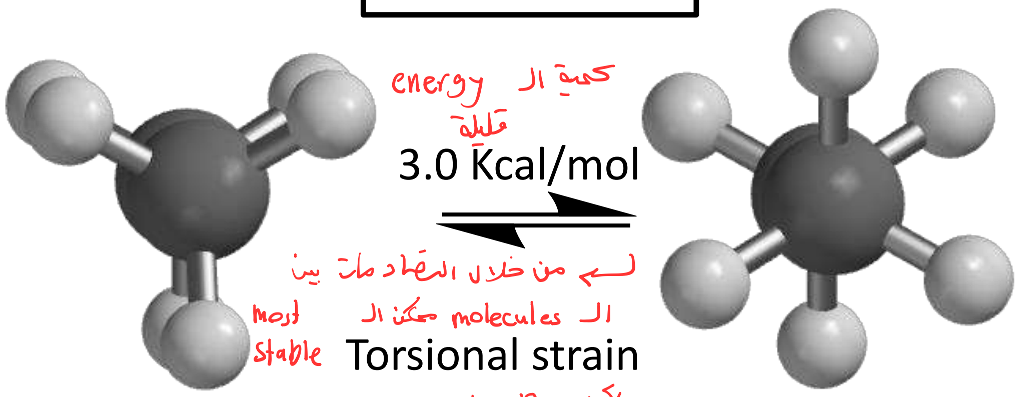
هذه الطاقة يحصل عليها المركب عن طريق التصادمات التي تحدث بين الجزيئات فبيكسب الطاقة وبيتحول للشكل الآخر

ممكن خلال ال motion تاعته يفقد هاد ويروح لل most stable

* نحن لك تتكلم سبعين هاد لل الاثنين، تتكلم عن العدد للانهائي إلا منهم) كل ما نغير الزاوية طلع لنا (another 3D structure

* الملاحظة المهمة: ال energy/الجهد الذي نكون عند الانتقال من most stable → least stable

هذا نسميه ← torsional strain بسبب المضايقة الفراغية بين ال Atoms إذا كانوا ورا بعض

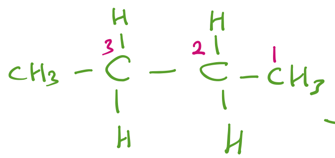


إذا ال torsional strain كمية من ال energy أنا بعطيها لل staggered بتحول لeclipsedفي حالة ال ethane أو في حالة الكين بشكل عام من الأقل طاقة للأعلى طاقة من الأكثر استقرارية للأقل استقرارية

The H – H distance in the eclipsed is 2.36 Å and 2.54 Å in the staggered.

هذا أكثر استقرارا لكن إذا إنت أعطيتوا ال energy
هذه صار أقل استقرارا لكن عملية الانتقال من هان لهان
والعكس صحيح عملية سهلة لكن احنا بدنا نكون فاهمين
إنه الأكثر وجودا أو ال contribution اله أكثر
Rotating one carbon 60
الي هوه ال staggered

* مثال فيه details أكثر :



→ بيوتان

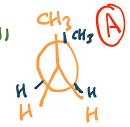
عندي نوعين رابطة صيجما

بين $CH_2 - CH_3$

وبين $CH_2 - CH_2$

* كم احتمال ممكن الزاوية تكون فيه صفر ؟

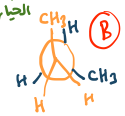
الخيار/ الاحتمال الأول

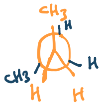


front carbon ← •

back carbon ← •

الخيار الثاني





← ممكن أنه خيار ثالث ولكن مافي اختلاف هم نفس ال energy

A , B ← ليس لها نفس الطاقة

A أسوء stability السبب لأنه CH_3
↓
large group

المطابقة حتكون أسوأ والـ potential energy حتكون أعلى إذا كانوا CH_3 و CH_3 ورا بعض

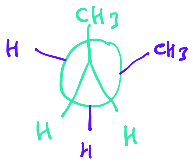
B سيء من ناحية ال stability ومن ناحية ال energy large of لبس تكون أهون من A لأنه CH_3 وراها H ← صغير في الحجم

* مين حيكون more stable في حالة الزاوية تساوي صفر ؟

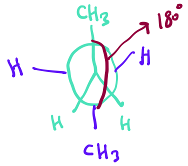
B is more stable than A

* كم خيار معنا لو كانت الزاوية 60° ؟

معلومة ع الهامش احنا في عنا عدد هائل لا نهائي من ال conformers بين الزاوية صفر وستين بس احنا اخذنا الزاوية صفر وستين ونشوف الفروقات بينهم 😩🤷‍♀️



back carbon • front carbon •



في خيار ثالث واللي هو CH_3 على اليسار لكن ما بيفرق من ناحية energy زي A بالطاقة

D more stable than C

* لو نيجي نرتب بين A,B,C,D من حيث ال Stability

1) D 2) C 3) B 4) A

أكثر ← أقل

* لو نرتب A,B,C,D من حيث ال energy

1) A 2) B 3) C 4) D

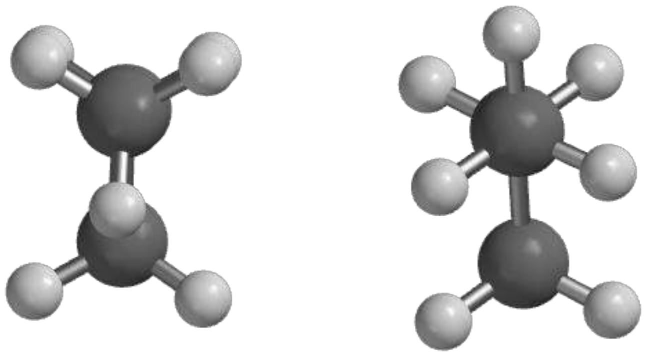
أكثر ← أقل

* الفكرة ① : الزاوية مهمة لكن وجود المجموعات ال large group مهم يكونوا معاكسين لبعض إذا بدي أفكر بال stability

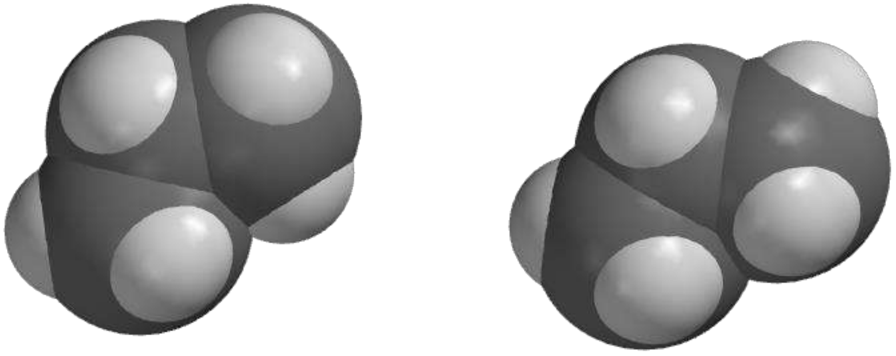
* فكرة ② : ممكن هدول يكونوا موجودين في (equilibrium) في حالة اتزان
← وكل ما كان large group متعاكسات كل ما كان الاتزان أكبر
〃 〃 〃 ال energy أقل كل ما كان الاتزان والاستقرار أكبر

Conformational Isomers (cont'd)

The problem is worse in propane as a methyl group is larger than a H atom. The eclipsed is on the left in both sets of images.

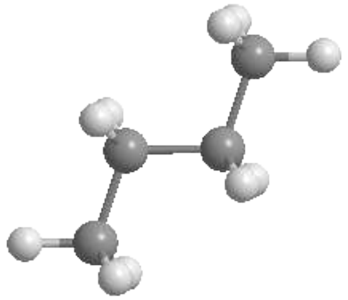


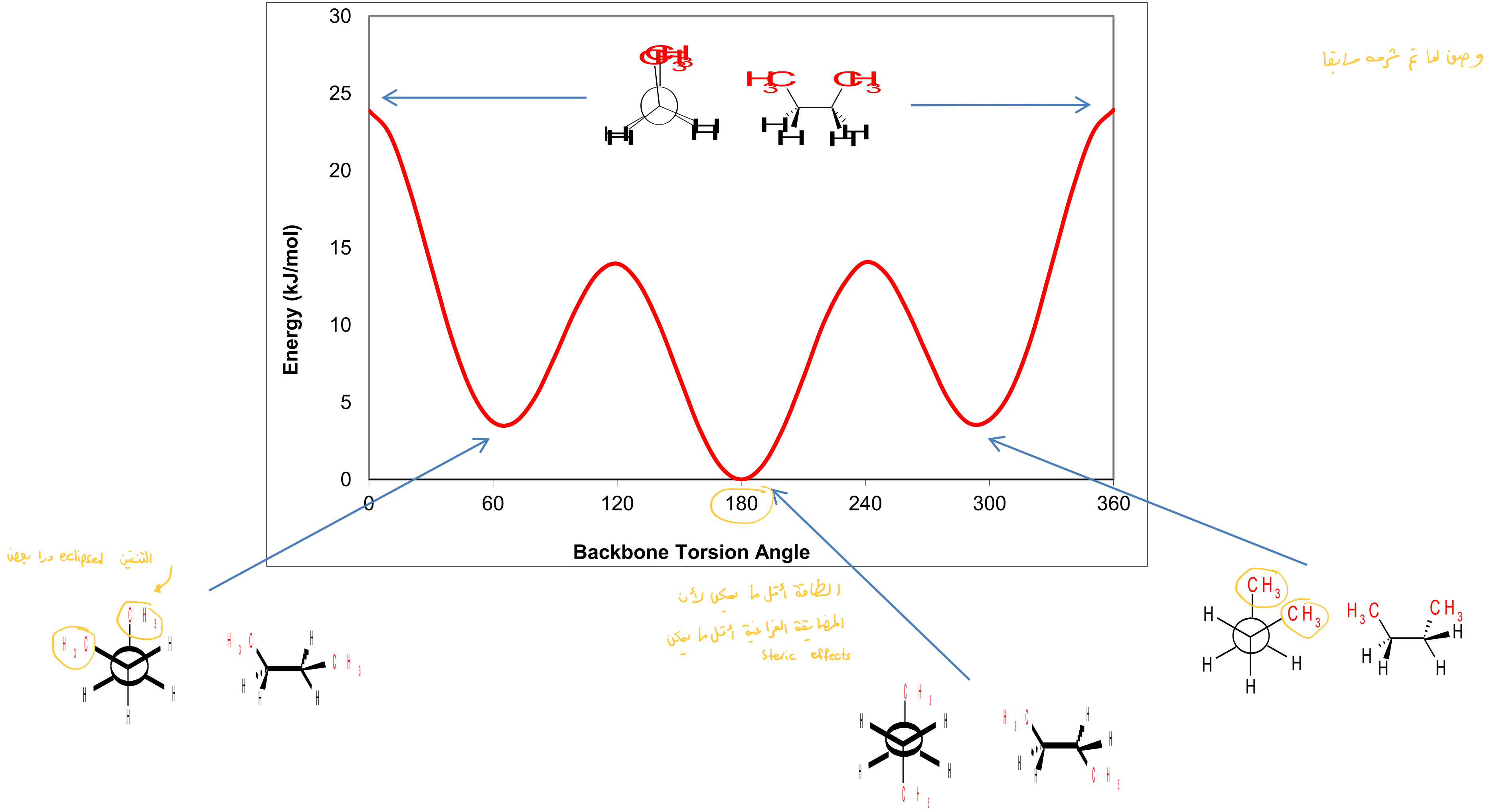
ball & stick



space filling

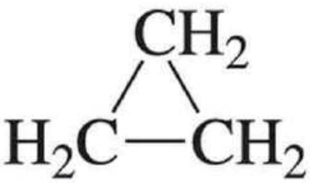
Steric effects reach their maximum in butane:



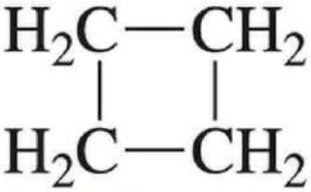


2.9 Cycloalkane Nomenclature and Conformation

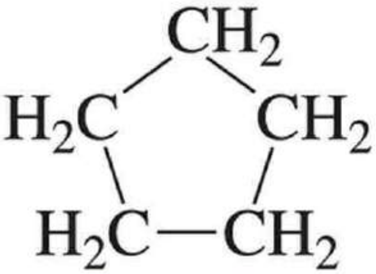
Cycloalkanes are saturated hydrocarbons that have at least one ring of carbon atoms. The general formula is CnH2n.



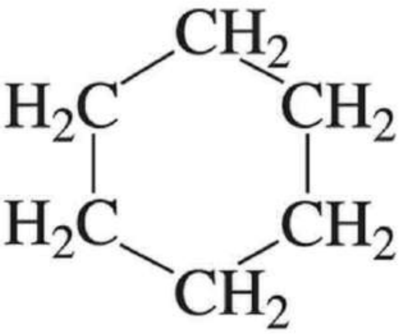
cyclopropane



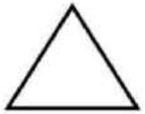
cyclobutane



cyclopentane

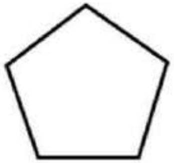


cyclohexane



cyclopropane

cyclobutane



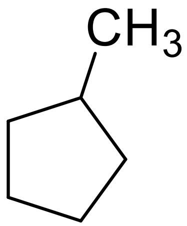
cyclopentane

cyclohexane

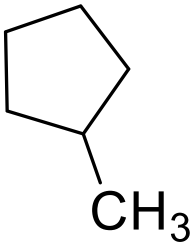
Cycloalkane Nomenclature

- **One substituent** is always located at ring carbon number 1. A number is not needed.

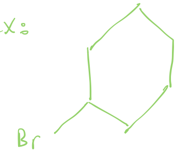
ما بفرق وين
تكون CH3 ماسكة
كلهم 2/ يكونوا نفس
التسمية →
* ما في داعي للترقيم



=



ex:



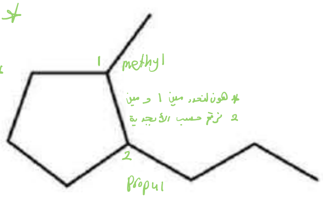
bromocyclohexaine

methylcyclopentane   methylcyclopentane

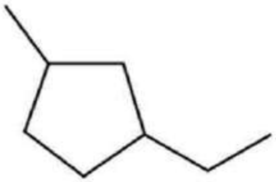
Two substituents : Substituents are stated in alphabetical order. #1 goes to the first-listed substituent

* هون ما حتفرق مين 1 ومين 2 لإنهم نفس ال Substituent
لهم أرقمهم وأعطيهم أقل رقم

* هون لازم نرقم
* نختار أقرب مسافة بينهم
بدنا نعطي ال substituents
أقل أرقام

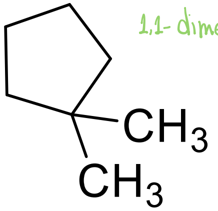


1-methyl-2-propylcyclopentane



1-ethyl-3-methylcyclopentane

1,3-dimethylcyclohexane

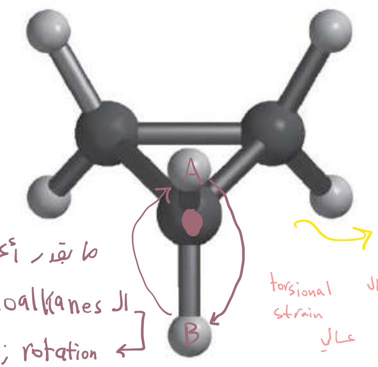


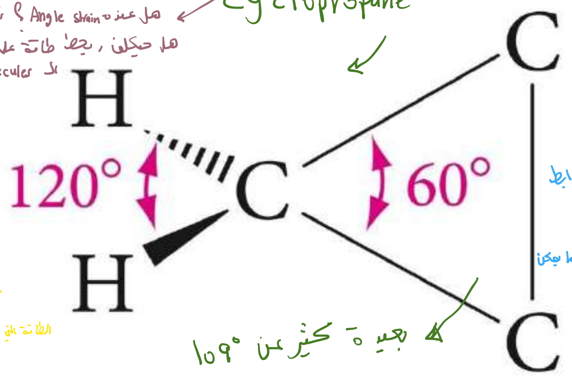
1,1- dimethylcyclopentane

Cycloalkanes: cyclopropane – is the smallest ring structure possible.

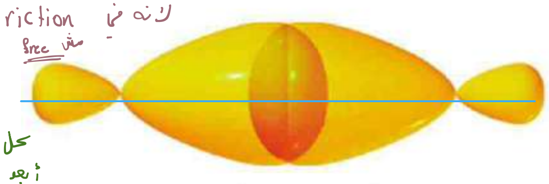
- It is rigid and very highly **strained** as the bond angles (60°) are distorted from ideals (109.5°)
- It is more reactive than a linear alkane as the strained C-C bonds are easier to break

Eclipsed Hydrogens





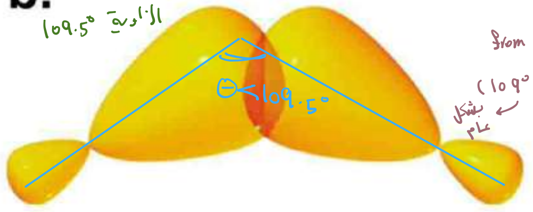
a.



good overlap
strong bond

tetrahedral bond angle = 109.5°

b.



poor overlap
weak bond

bond angle < 109.5°

Angle strain results from poor orbital–orbital overlap because bonds have to deviate from the ideal (109.5°) bond angle

إذا بدي أحكي عن ال stability لل cycloalkanes ومنهم ال cyclopropane (وهو أسوأهم بدك تطلع ع شغلتين :١- ال angle اديش بعيدة عن 109 elclipsing-2 هل كلهم eclipsing
ولا في حالات (متل ما حنشوف كمان شوي(minimaization للeclipsing أو عمال بقلل في ال tortional strain

Cyclobutane

* فضي ال cyclopropane ← ال tortional strain أعلا ما يمكن
ال Angle strain أعلى ما يمكن
ال ring strain at all أعلى شيء

ف ال cyclopropane مش بس لا يقارن بال liner alkane حتى هو يعتبر the worst one (زي ما حنشوف كمان شوي)

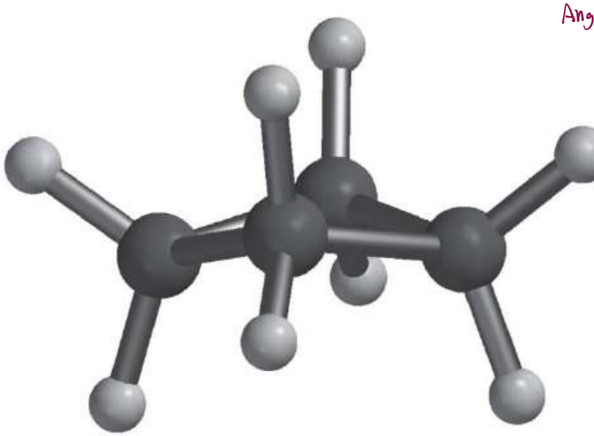
Cycloalkanes: cyclobutane – “puckered” conformation

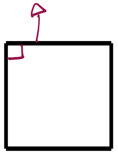
- It is more flexible than cyclopropane and is not flat although it is commonly drawn that way.
- It is more reactive than a linear alkane as the strained C-C bonds are easier to break, bond angle ~90°

* من الحلقة الرابعة فما بعد بيظهر عندي شيء آخر ممكن هوا
ال molecules تتخذه ← تعامل بعمل (Twisting) بيطل Planar شي
من cyclobutane فما بعد بيصير بعمل Twisting

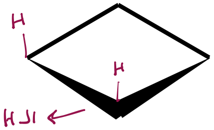
Angle strain is still بس درجة 30° درجة أحسن من 90°

Cyclobutane فيه Angle strain بس بيطل أحسن من cyclopropane





common



* Cyclobutane ← بيعمل شكل Puckered
بيعمل انثناء الكربون العنصر
ال H طاروا أبعد ←
عن بعض محققة minimization لل eclipsing energy
88°

better

they are not all eclipsing

عندي ← minimization لل eclipsed hydrogen

Molecules twist out of a planar arrangement to minimize angle strain and the number of eclipsed hydrogens

* والزاوية طارح تتغير كثير من 90° ← 88°
* Angle strain موجودة لكن أقل من ال Cyclopropane
وعدد ال eclipsed hydrogen أقل من الcyclopropane
* Cyclobutane أكثر استقرار من cyclopropane
* ولذلك الطاقة في ال Cyclobutane أقل من ال Cyclopropane

cyclopentane

Cycloalkanes: cyclopentane – “envelope” conformation

- It is more flexible than cyclobutane and bond angle are ~105°, and less strained

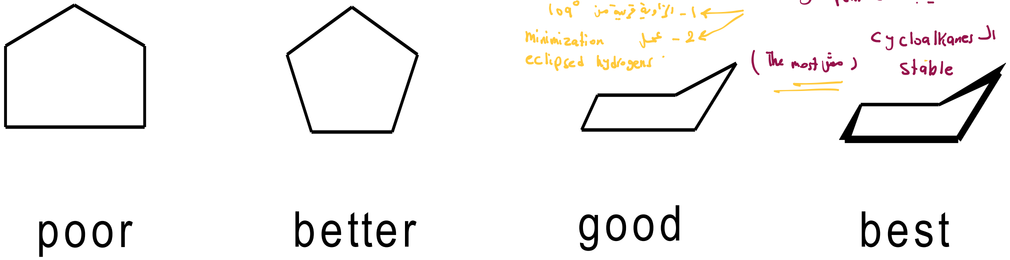
يوجد Angle strain ولكنها قليلة جدا

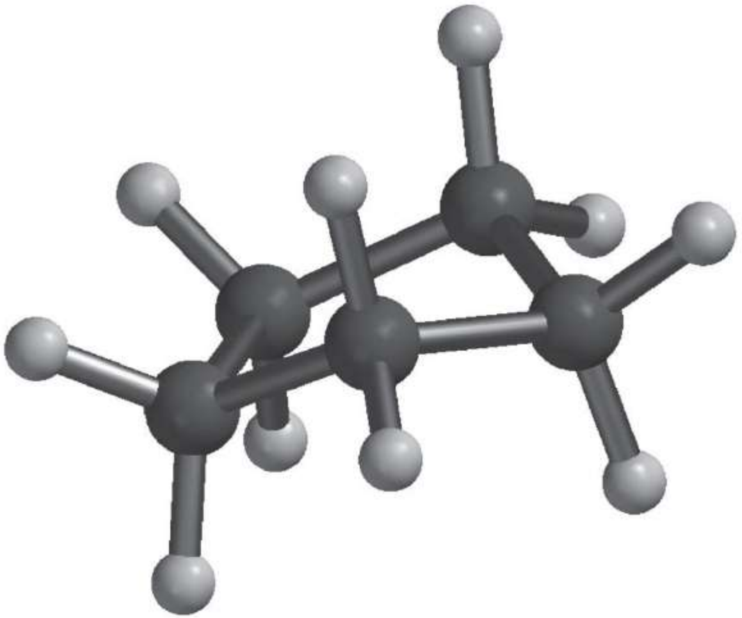
وكمية ال eclipsing قليلة لما أخذ envelope shape قل ال eclipsed hydrogen

لذلك يعتبر cyclopentane من أكثر ال cycloalkanes stable (The most مش)

1- الزاوية قريبة من 109°

2- عمل minimization eclipsed hydrogens





Molecules twist out of a planar Arrangement to minimize angle strain and the number of eclipsed hydrogens.

في عدة conformers

ولكن

نهتم بالموجودين بشكل طبيعي أو الموجودين

13-3-2024 Wednesday