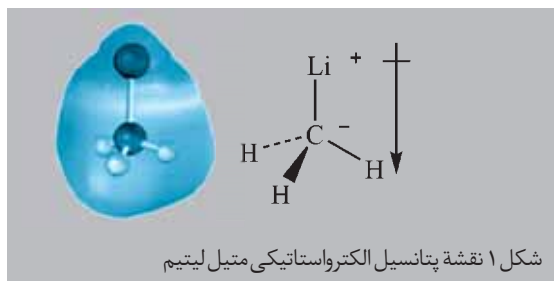


حسن حذرخانی
مسئول گروه شیمی دفتر برنامه‌ریزی و تألیف کتاب‌های درسی

شکل‌های رنگی این مقاله را می‌توانید در صفحه‌های ۲ و ۳ جلد مشاهده کنید.

به شدت قطبی بوده، جهت گشتاور دوقطبی در آن، از فلز لیتیم به سمت گروه متیل است. از این رو، متیل لیتیم به یک ترکیب یونی شباهت دارد، شکل ۱.



شکل ۲، نقشه‌های پتانسیل الکترومغناطیسی متانول، دی کلرومتان، بورتیری فلئورید، ترانس دی کلرواتیلن را نشان می‌دهد که تراکم بار الکتریکی و جهت گشتاور دوقطبی در این مواد را مشخص می‌کند.

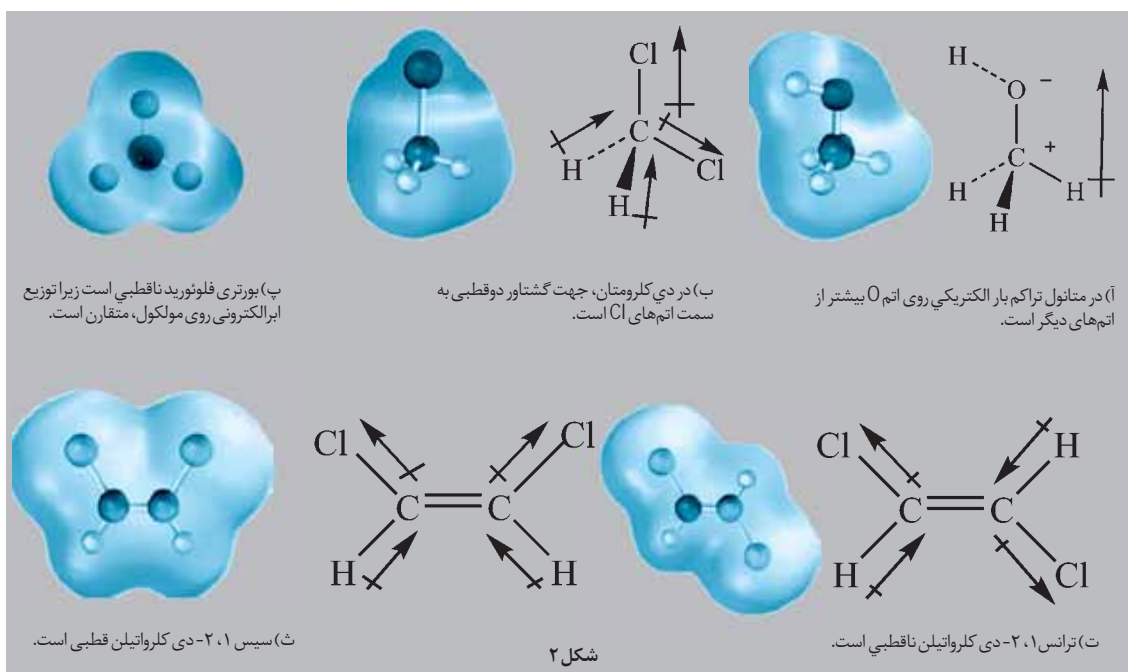
چکیده

نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی ابزار مناسبی برای تعیین میزان تراکم بار الکتریکی روی اتم‌های سازنده یک ترکیب‌اند. این نقشه‌ها در تعیین جهت گشتاور دوقطبی یک ترکیب، الکترون دهنده یا الکترون کشنده بودن یک گروه و واکنش پذیری مواد به کار می‌روند. از این گذشته، این نقشه‌ها در شیمی آلی کاربردهای فراوانی دارند. در این مقاله به برخی از این کاربردها اشاره می‌شود.

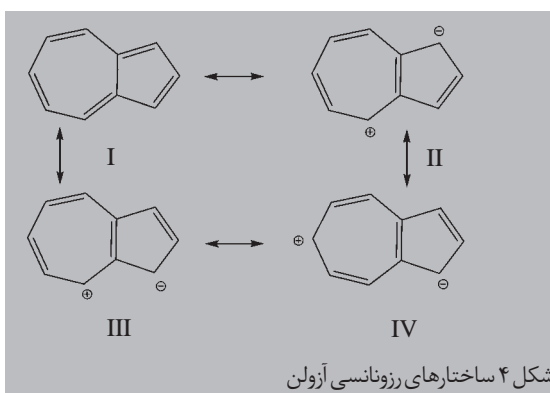
کلیدواژه‌ها: پتانسیل الکتریکی، گشتاور دوقطبی، قدرت اسیدی-بازی، چگالی الکترونی

تعیین جهت گشتاور دوقطبی

متیل لیتیم، ترکیبی آلی فلزی است که در آن گروه متیل از بار منفی جزئی، و لیتیم از بار مثبت جزئی برخوردار است. نقشه پتانسیل الکتریکی این ترکیب نیز نشان می‌دهد که متیل لیتیم



یادآوری می‌شود برای توجیه این واقعیت، می‌توان از ساختارهای رزونانسی استفاده کرد:



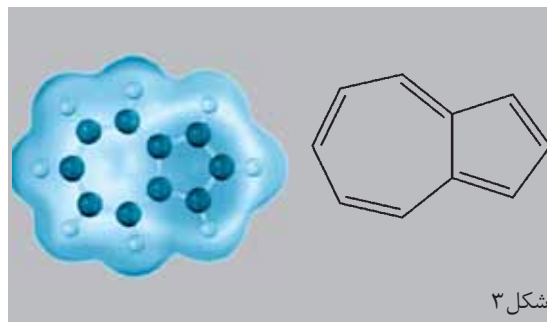
می‌بینیم که در ساختارهای رزونانسی II، III و IV هر دو حلقه، آروماتیک و شبیه بنزن هستند و از این رو، از شکل رزونانسی I پایدارترند. پس جهت گشتاور دوقطبی باید از حلقه هشت عضوی، به سمت حلقه پنج عضوی باشد.

نمونه ۲

می‌دانیم پیوندهای N-H و N-F، هر دو قطبی اند اما جهت قطبیت پیوند در آن‌ها عکس یکدیگر است؛ زیرا در N-F، اتم F از N الکترون‌گاتیوتر است در حالی که در N-H، اتم H از N الکترون‌گاتیوی بیشتری دارد. در این حال، جهت گشتاور دوقطبی در دو ملکول NH_3 و NF_3 چگونه خواهد بود؟ بررسی نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی این دو مولکول نشان می‌دهد که در آمونیاک، تراکم بار منفی روی اتم N بیشتر است اما در NF_3 ، بار منفی روی اتم‌های F تراکم بیشتری دارد.

نمونه ۱ - آزولن

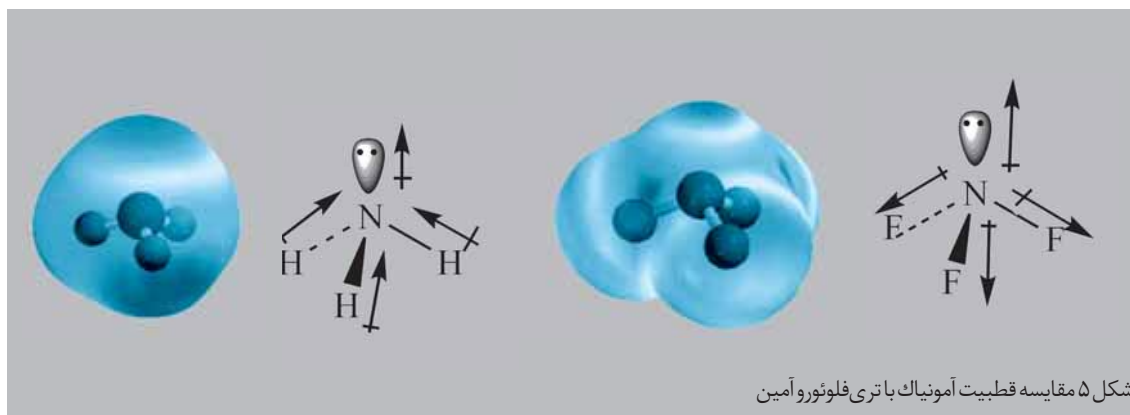
به‌عنوان یک نمونه، آزولن را در نظر می‌گیریم. این ترکیب، هیدروکربنی با فرمول $C_{10}H_8$ است. با توجه به فرمول ساختاری آزولن، انتظار می‌رود که این ترکیب، غیرقطبی باشد یا مقدار گشتاور دوقطبی بسیار کوچکی داشته باشد. این در حالی است که تجربه نشان می‌دهد آزولن، ترکیبی به شدت قطبی است و گشتاور دوقطبی آن به ۱ دو بای می‌رسد. به کمک نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی آزولن می‌توانیم بررسی کنیم که آیا این



ترکیب قطبی است؛ توزیع ابرالکترونی در آن چه وضعیتی دارد و متقارن است یا نامتقارن. همچنین جهت گشتاور دوقطبی نیز مشخص می‌شود.

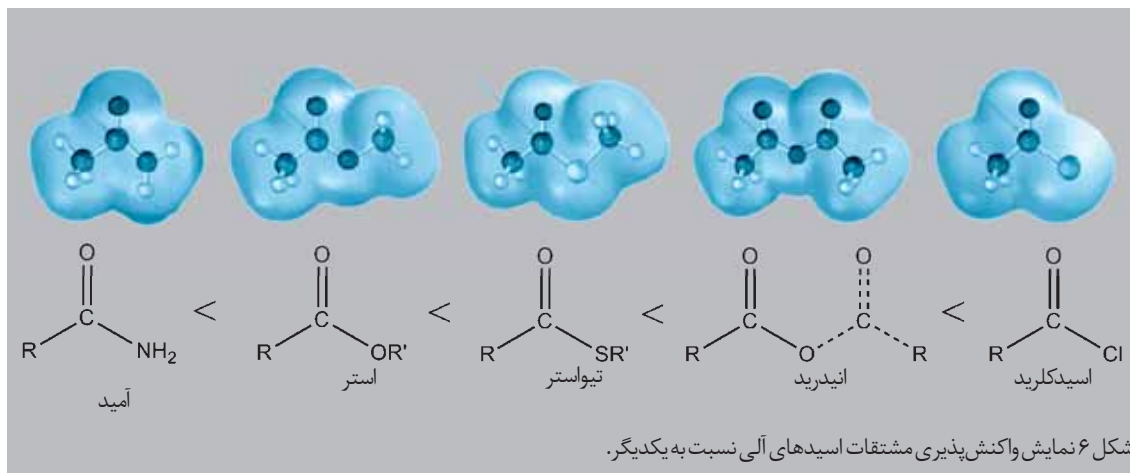
در شکل ۳، نقشه پتانسیل الکترواستاتیکی آزولن مشاهده می‌شود. رنگ سرخ، حلقه پنج عضوی را در این نقشه نشان می‌دهد. یعنی این حلقه دارای بار منفی است. تراکم بار الکتریکی روی حلقه پنج‌ضلعی بسیار بیشتر از حلقه هشت عضوی است. پس جهت گشتاور دوقطبی، به سمت حلقه پنج‌ضلعی است.

بنابراین جهت برآیند گشتاورهای دو قطبی در این مولکول‌ها، عکس یکدیگر است، شکل ۵.



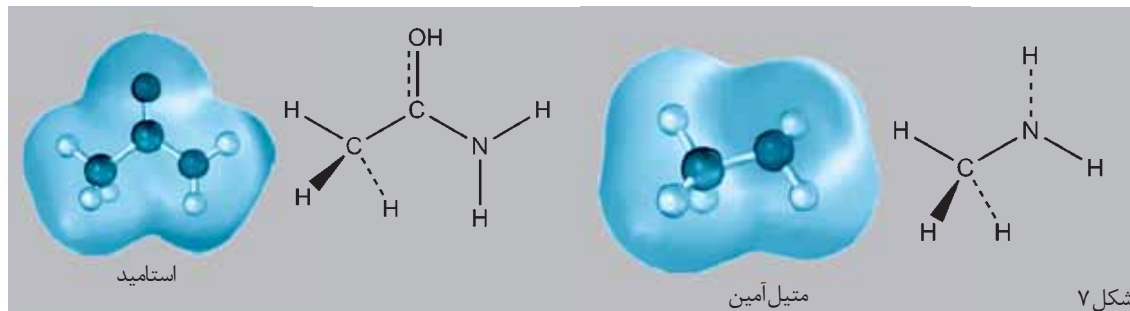
تعیین واکنش پذیری

آמיד، استر، تیو استر، انیدرید و اسیل کلریدها از مشتقات اسیدها به‌شمار می‌روند. اگر بخواهیم سرعت این ترکیب‌ها را در واکنش‌های جانمایی هسته‌دوستی با هم مقایسه کنیم، نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی راهگشا هستند. بنا به نقشه‌های این ترکیب‌ها، تمرکز بار مثبت روی گروه کربونیل در اسیل کلریدها بیشتر از بقیه مشتقات یادشده است. شکل ۶، ترتیب افزایش میزان بار مثبت گروه کربونیل و واکنش پذیری این مشتقات را نسبت به هم نشان می‌دهد.



تعیین ترتیب قدرت اسیدی یا بازی ترکیب‌های آلی

بنا به نظریه لوویس، معیار تعیین قدرت اسیدی و بازی، میزان توانایی گرفتن یا از دست دادن الکترون است؛ هرچه توانایی یا تمایل به از دست دادن الکترون بیشتر باشد، قدرت بازی بیشتر است. به کمک نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی می‌توان مشخص کرد که تراکم الکترونی روی کدام اتم یا ترکیب بیشتر است پس قدرت اسیدی و بازی ترکیب‌ها نسبت به هم مشخص می‌شود. اگر در دو ترکیب، اتم‌هایی که الکترون آزاد دارند یکسان باشند، ترکیبی که در آن تراکم الکترونی روی این اتم بیشتر است، قدرت بازی بیشتری دارد. برای نمونه، به نقشه‌های متیل آمین و استامید توجه می‌کنیم، شکل ۷.

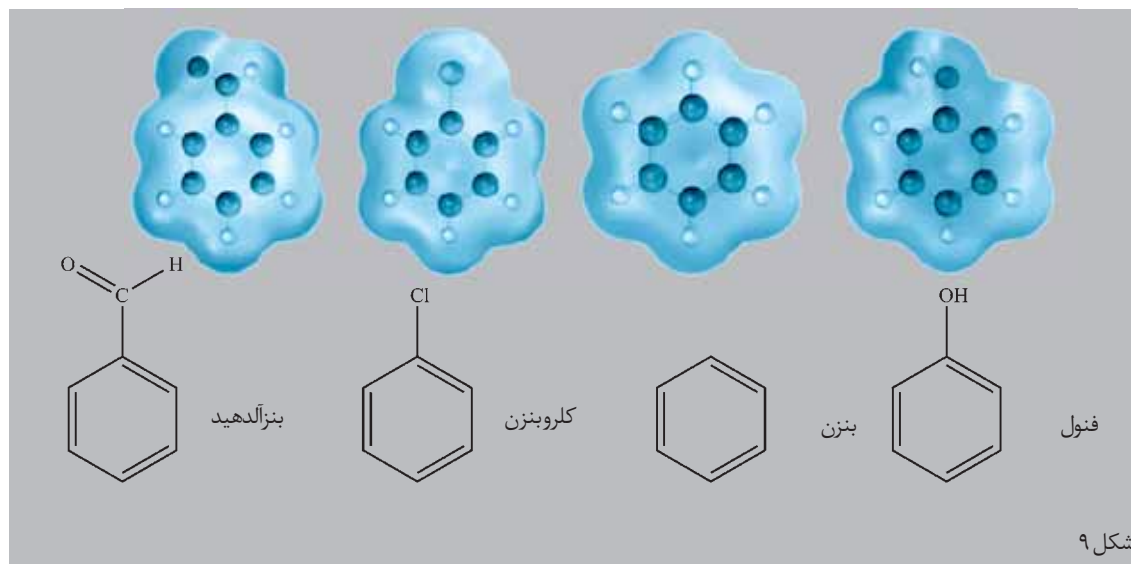
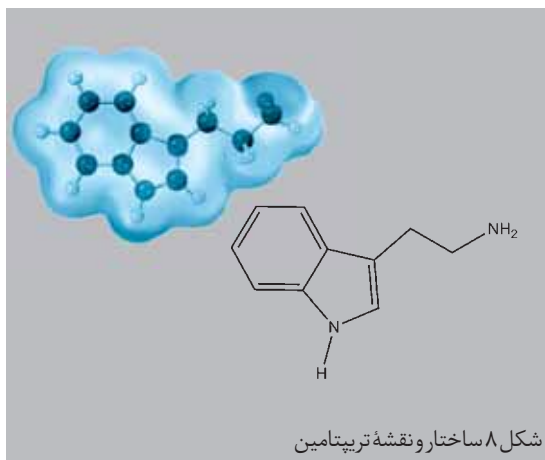


در متیل آمین، اتم N نسبت به اتم‌های دیگر، دارای بار منفی بیشتری است اما در استامید، تراکم بار روی N از بقیه اتم‌های این ترکیب کمتر است و مشاهده می‌شود که اتم O از بار منفی بیشتری برخوردار است. پس قدرت بازی متیل آمین از استامید بیشتر است.

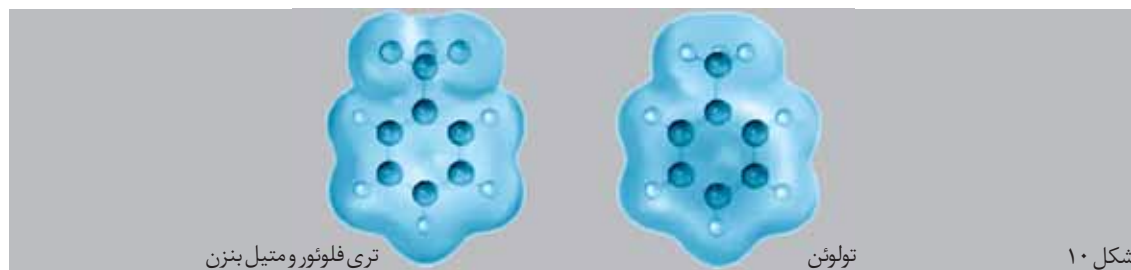
اهمیت نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی زمانی بیشتر آشکار می‌شود که ترکیب آلی دارای چند اتم نیتروژن باشد. در این حال برای تعیین اینکه کدام یک از این اتم‌ها قدرت بازی بیشتری دارند باید از شکل‌های رزونانسی کمک گرفت در حالی که به کمک نقشه‌های پتانسیل به آسانی می‌توان این اتم را مشخص کرد. برای نمونه، نقشه پتانسیل تریپتامین نشان می‌دهد که اتم نیتروژن متصل به شاخه آمین خاصیت بازی بیشتری دارد.

تشخیص گروه‌های استخلافی گیرنده و کشنده الکترون

گروه‌های متصل به حلقه بنزن، بنا به خاصیت الکترون دهنده‌گی القایی و رزونانسی می‌توانند چگالی بار الکتریکی و در نتیجه، واکنش‌پذیری حلقه را تغییر دهند. برای نمونه، فعالیت حلقه بنزن در فنول، کلروبنزن، بنزالدهید و بنزن با هم تفاوت دارد. بنا به نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی این ترکیب‌ها، حلقه بنزن در فنول به رنگ سرخ دیده می‌شود یعنی چگالی بار الکتریکی آن از بقیه ترکیب‌های یادشده بیشتر است. در کلروبنزن و بنزالدهید رنگ حلقه در نقشه، زرد است و نشان می‌دهد که تراکم بار الکتریکی روی حلقه بنزن در این ترکیب‌ها از فنول کمتر است، شکل ۹.

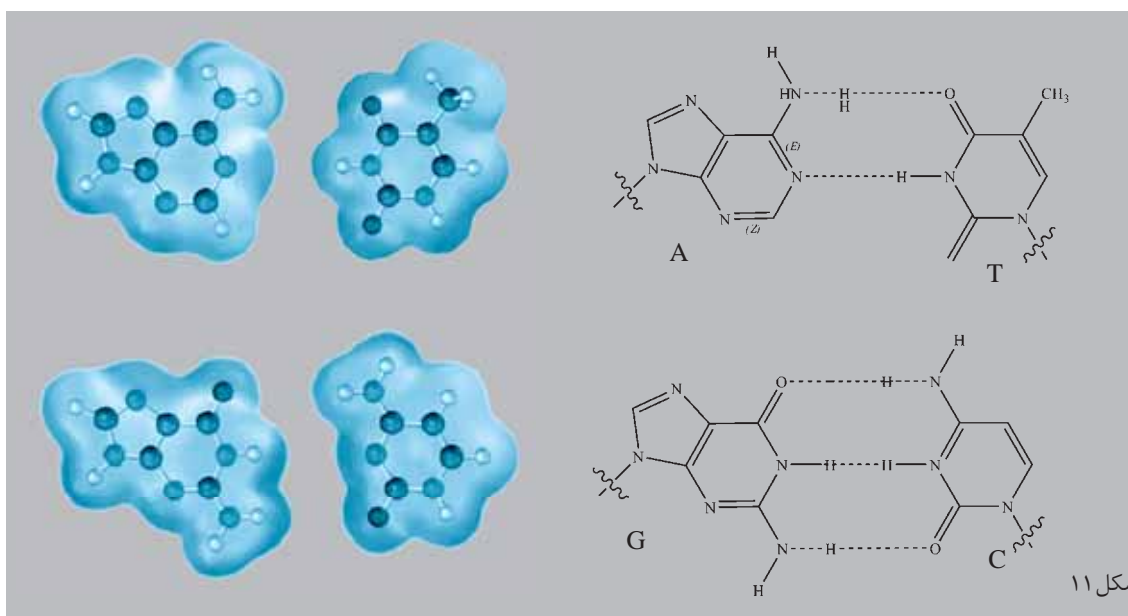


مقایسه نقشه‌های تری‌فلوئور و متیل بنزن و تولوئن نشان می‌دهد که تراکم بار الکتریکی روی حلقه بنزن در تولوئن بیشتر است پس CF_3 -گروهی کشنده الکترون است، شکل ۱۰.



تعیین جهت گیری در تشکیل پیوند هیدروژنی

درصد آمینواسیدهای آلانین (A) با تیمین (T)، و گوانین (G) با سیتوزین (C) در بدن انسان برابر است. براساس این برابری و با توجه

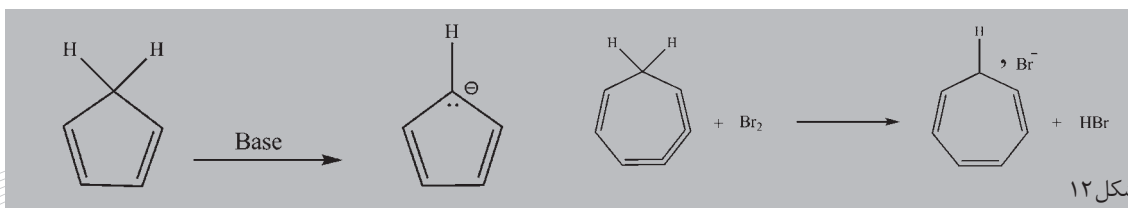


شکل ۱۱

به وجود گروه‌های عاملی $-N-H$ و $-C=O$ در این ترکیب‌ها می‌توان پیش‌بینی کرد که در مولکول DNA، میان آمینواسید A با T، و G با C پیوند هیدروژنی برقرار باشد. بررسی نقشه‌های این آمینواسیدها چنین نتیجه‌ای را تأیید می‌کند، شکل ۱۱.

تشخیص خاصیت آروماتیک بودن

سیکلوپنتادی ان به آسانی با بازها واکنش نشان می‌دهد و به سیکلوپنتادی انیل تبدیل می‌شود: این در حالی است که سیکلوهپتادی ان تمایلی به انجام این واکنش ندارد اما با الکتروفیل‌ها واکنش داده، کاتیون تشکیل می‌دهد: چگونه می‌توان اختلاف واکنش پذیری این دو ترکیب را توضیح داد؟ یادآوری می‌شود اگر فرآورده‌های واکنشی پایدار باشند، آن واکنش پیشرفت خوبی دارد. همچنین می‌دانیم هرچه باز مزدوج در یک واکنش پایدارتر باشد اسید آن خاصیت اسیدی بیشتری خواهد داشت و برعکس. پس می‌توان نتیجه گرفت که کاتیون‌های سیکلوهپتاتری انیل و آنیون سیکلوپنتادی انیل به شدت پایدارند و دلیل این پایداری به آروماتیک بودن آن‌ها بازمی‌گردد. نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی نیز پایداری آنیون و کاتیون یادشده را توضیح می‌دهند. در این نقشه، آنیون به رنگ سرخ ظاهر می‌شود و نشان می‌دهد که بار منفی در سراسر حلقه پخش شده و در حال رزونانس است، شکل ۱۲.



شکل ۱۲

1. Oxtoby, D.W.; Gillis, H. P.; Campion, A. "Principles: Modern chemistry", 6th Ed. 2008.
2. Chang, R. "Chemistry", 10th Ed. 2007.

منابع *