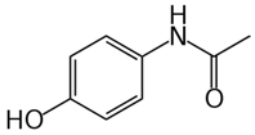
บทที่ 10
สารประกอบอะโรมาติก
(Aromatic compounds)

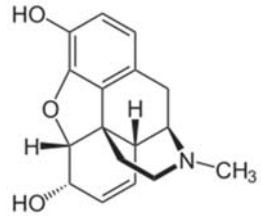
พิมพร มนเทียรอาสน์
คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยแม่โจ้ จ.เชียงใหม่

January 14, 2014

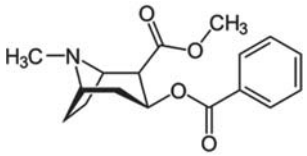
สารประกอบอะโรมาติกที่พบได้ในธรรมชาติ



Paracetamol



มอร์ฟีน(Morphine)



โคเคน (Cocaine)

10.2 อะโรมาติกซิตี้(Aromaticity)

สิ่งที่ต้องมีในโครงสร้างของสารอะโรมาติก

อะตอมคาร์บอนจับกันเป็นวงมีสมบัติเฉพาะที่ต่างจากอะลิไซคลิกคือ

1. โครงสร้างเป็นวงแบนราบ (Planar cycle)

2. ทุกอะตอมของคาร์บอนต้องมี p– ออร์บิทัล อย่างน้อยหนึ่งออร์บิทัที่ตั้งฉากกันระนาบของวง

3. ในวงมีไพ–อิเล็กตรอน (¶ –electron)วิ่ง(ดีโลคัลไลซัน:delocalization)

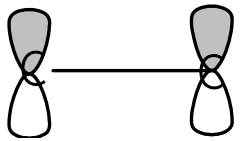
ได้รอบวงและมีจำนวนไพ–อิเล็กตรอนเท่ากับ 4n+ 2 (Hückel Rule)

จำนวนไพอิเล็กตรอน (¶ – e) = 4n + 2

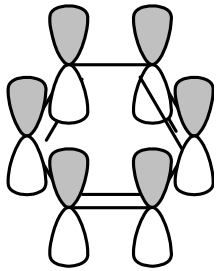
เมื่อ n คือ เลข 0 หรือจำนวนเต็มบวก เช่น 1,2,3...

สารที่มีสมบัติครบทั้งสามข้อนี้เรียกว่าสารอะโรมาติก

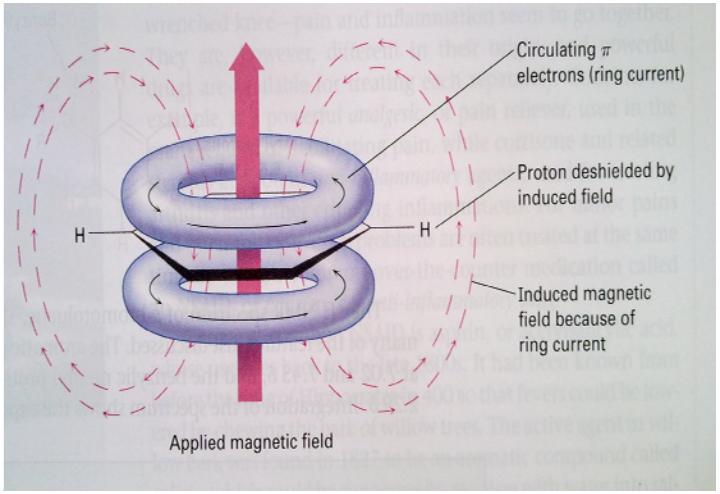
p–Orbitalภายในโครงสร้างสารอะโรมาติก



side view

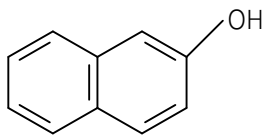


projection

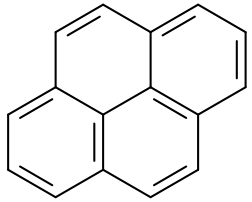


ที่มา : Mc Murry J., Organic chemistry,seventh,Thomson Learning,Inc,2008

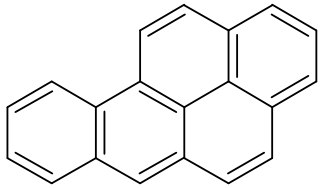
Polycyclic aromatic



2- Napthol



Pyrene



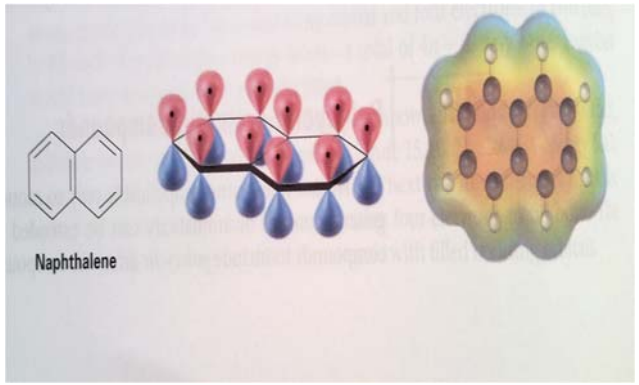
Benzo[a]pyrene

Carcinogen

: barbecue gril

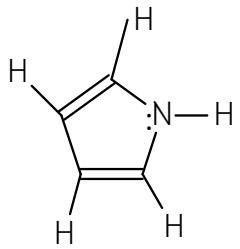
: tobacco smoke

แนฟทาลีน (Naphthalene)

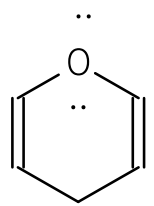


ที่มา : Mc Murry J., Organic chemistry,seventh,Thomson Learning,Inc,2008

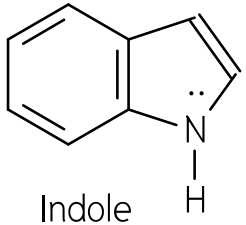
Heterocyclic aromatic



Pyrrole

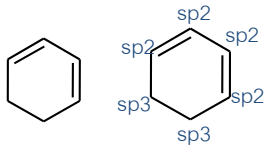


Pyran



Indole

การพิจารณาโครงสร้างที่เป็นอะโรมาติก



1. โครงสร้างเป็นวงแบนราบ (Planar cycle) : ไม่
2. ทุกอะตอมของคาร์บอนต้องมี p – ออร์บิทัลอย่างน้อยหนึ่งออร์บิทัล ที่ตั้งฉากกันระนาบของวง
3. ในวงต้องมี ไพอิเล็กตรอน(¶ –electron) วิ่งได้รอบวง

และมีจำนวนไพอิเล็กตรอนเท่ากับเป็น4n+ 2

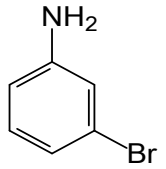
เมื่อ n คือ เลขจำนวนเต็ม เช่น 0,1,2,3...

จำนวนไพอิเล็กตรอน = 2 x จำนวนพันธะไพ

4n+2= 2x2 = 4

n =4–2/4 =1/2

นั่นคือ โครงสร้างหกเหลี่ยมมีพันธะคู่ 2 ไม่มีคุณสมบัติเป็นอะโรมาติก



- โครงสร้างเป็นวง,แบน
- p– orbitalตั้งฉากกับระนาบของวง; sp^2

จำนวน ไพอิเล็กตรอน = 4n + 2 = 6

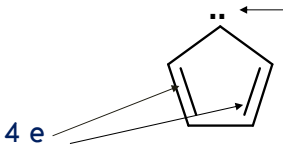
- (พันธะไพ 3 พันธะ มีจำนวนไพอิเล็กตรอน= 3x2=6)

4n = 6 –2

n = 4/4 = 1

หมู่เกาะไม่ทำให้โครงสร้างเปลี่ยนแปลง

โครงสร้างนี้เป็นอะโรมาติก



อิเล็กตรอนคู่ที่ไม่ใช้ในการสร้างพันธะ

- โครงสร้างวงแบน
- ทุกอะตอมคาร์บอนจัดตัวแบบ sp2
- จำนวนไพอิเล็กตรอน=4n+2= 2x2 =6
- { พันธะไพ 2 พันธะ(พันธะคู่) + อิเล็กตรอนคู่ 1คู่(2e)}

4n = 6–2 = 4

n = 1

- มีคุณสมบัติเป็นอะโรมาติก

การค้นพบเบนซีน (Discovery of benzene)

Michael Faraday

- ค.ศ.1825 แยกเบนซีนจากแก๊สที่ได้จากถ่านหิน
- พบการทำสเตนเลส (stainless Steel)

โดยใช้ Fe + Ni

- ยังไม่ทราบโครงสร้างที่แท้จริง

ปฏิกิริยาเคมีของเบนซีนกับรีเอเจนต์บางตัว

รีเอเจนต์(reagents)	ปฏิกิริยาที่คาดว่าจะเกิด	ผลที่ได้
Br_2 / CCl_4	การเติมของ Br_2	ไม่เกิด
$KMnO_4$ / H_2O	ออกซิเดชัน	ไม่เกิด
H_2 /Ni	การเติมไฮโดรเจน	เกิดที่ Tสูง,P สูง,ช้า

แต่เกิดปฏิกิริยา ดังต่อไปนี้

- เบนซีนทำปฏิกิริยาการแทนที่กับโบรมีน เมื่อมีตัวเร่ง

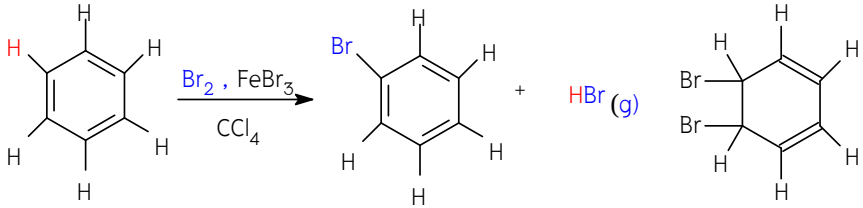
$$C_6H_6 + Br_2 \xrightarrow{Fe} C_6H_5Br + HBr$$

Benzene — Bromobenzene

- เบนซีนทำปฏิกิริยาการเติมกับโบรมีน เมื่อมีแสง

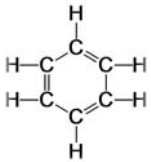
$$C_6H_6 + (Br_2)_3 \xrightarrow{h\nu} C_6H_6Br_6$$

Hexabromobenzene



is not formed

Friedrich August Kekulé von Stradonitz



Kekulé structure

ค.ศ. 1866 Kekulé ได้เสนอโครงสร้างของเบนซีน ซึ่งประกอบด้วย

- โครงสร้างมีคาร์บอนต่อกันเป็นวงหกเหลี่ยม
- พันธะคู่สลับพันธะเดี่ยว
- คาร์บอนแต่ละอะตอมมีไฮโดรเจนเพียงหนึ่งอะตอมเท่านั้น
- Kekulé structure

เรโซแนนซ์ (resonance)

โครงสร้างเรโซแนนซ์ (resonance structure)
คือ โครงสร้างที่อย่างน้อยตั้งแต่ 2 โครงสร้างขึ้นไป ที่แตกต่างกันเฉพาะตำแหน่งของอิเล็กตรอน(มีการจัดอิเล็กตรอน แต่ไม่มีการเปลี่ยนแปลงตำแหน่งของนิวเคลียสของอะตอม) เนื่องจากเกิดดีโลคัลไลเซชันของอิเล็กตรอน

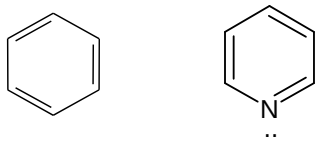
ดีโลคัลไลซ์(Delocalization)

การที่อิเล็กตรอนไม่อยู่ประจำที่มีการเคลื่อนที่หรือเปลี่ยนแปลงตำแหน่ง

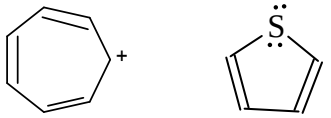
back

สารประกอบอะโรมาติก(aromatic compounds)

▣ พวกที่มีวงเบนซีน (benzenoid)



▣ พวกที่ไม่มีวงเบนซีน (nonbenzenoid)



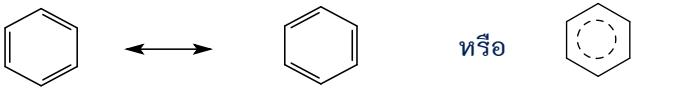
เบนซีน(benzene)

▣ สูตรโมเลกุล C_6H_6 จุดเดือด = 80 °C

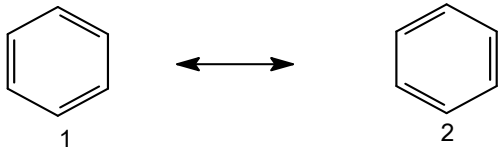
▣ อะตอมคาร์บอนต่อกันเป็นวงหกเหลี่ยม แต่ละอะตอมคาร์บอนจัดตัวแบบเป็น sp^2

▣ มีดีโลคัลไลซ์ดีโลคัลไลซ์(Delocalization)ของ¶-e รอบวงเบนซีน เกิดเรโซแนนซ์ (resonance)

▣ Kekule' เสนอโครงสร้างเรโซแนนซ์ของเบนซีน 2 แบบ

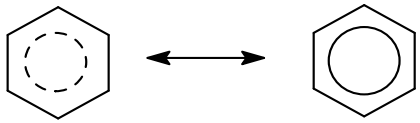


Resonance hybrid



1 2

โครงสร้างที่แท้จริงของเบนซีน(1) +(2)

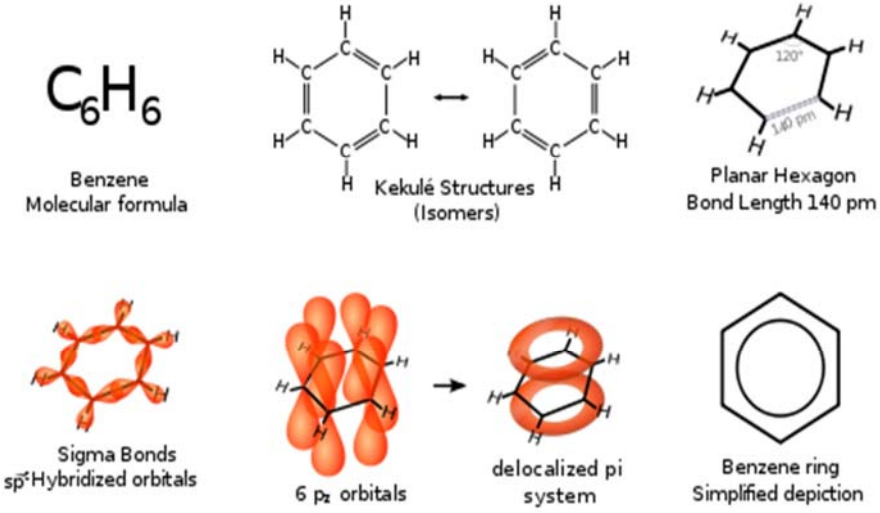


Resonance hybrid

ความยาวพันธะของคาร์บอน- คาร์บอนในโมเลกุลเบนซีน

➲ความยาวพันธะ C–C ทุกพันธะในวงเบนซีนมีความยาวเท่ากัน และมีค่าความยาวอยู่ระหว่างพันธะเดี่ยวกับพันธะคู่

C—C	C---C	C=C
พันธะเดี่ยว	พันธะในเบนซีน	พันธะคู่
1.54 °A	1.40 °A	1.34°A



http://en.wikipedia.org/wiki/Benzene

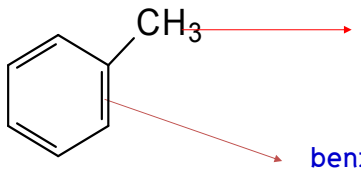
10.4 การเรียกชื่อ

10.4.1 พวกที่มีอะตอมเกาะที่วงเบนซีน 1 แห่ง

(monosubtituted benzene)

✹อนุพันธ์เบนซีนที่มีอะตอมหรือหมู่แทนที่อะตอมแทนที่ไฮโดรเจน 1 แห่ง

✹ การเรียกชื่อให้เรียกชื่ออะตอมหรือหมู่แทนที่เกาะอยู่ลงท้ายด้วยคำว่า benzene (โซ่หลัก)



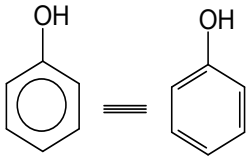
หมู่เกาะเรียก เมทิล (methyl)

benzene :โซ่หลัก

มีหมู่เกาะ คือ methyl 1 หมู่

ชื่อ IUPAC : Methylbenzene

ชื่อเฉพาะ : Toluene



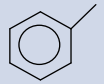
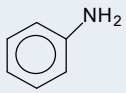
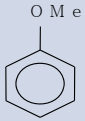
โซ่หลัก : benzene

หมู่เกาะชื่อ Hydroxy

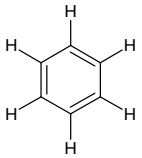
ชื่อ IUPAC :Hydroxybenzene

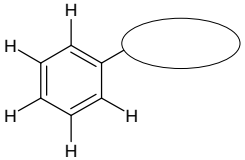
ชื่อเฉพาะ : Phenol

ชื่อเฉพาะอนุพันธ์ของสารเบนซีน

โครงสร้าง	โครงสร้างอย่างย่อ	ชื่อเฉพาะ	ชื่อIUPAC
	Ph-Me	Toluene	Methylbenzene
	Ph-NH_2	Aniline	Aminobenzene
	Ph-OMe	Anisole	Methoxybenzene

โครงสร้างโมเลกุลของเบนซีนและหมู่เกาะฟีนีล



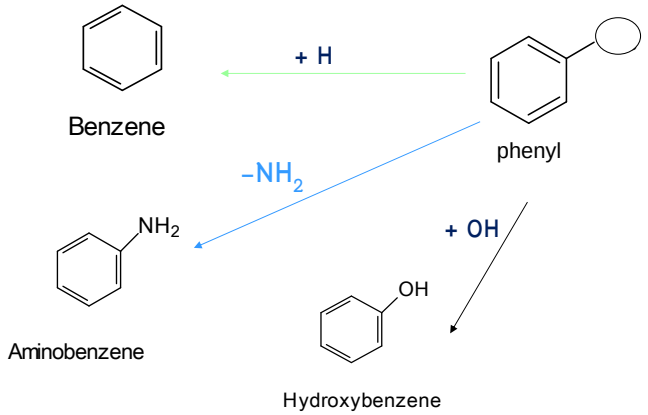


- ✓ C_6H_6 (Ph–H)
- ✓ เรียกว่าเบนซีน (benzene)
- ✓ เป็นโมเลกุล

- ✓ C_6H_5 (Ph–) เรียกว่า phenyl
- ✓ ไฮโดรเจนอะตอมหายไป1 อะตอม
- ✓ ทำหน้าที่เป็นหมู่แทนที่หรือหมู่เกาะ

back

การแทนที่ด้วยหมู่เกาะของโครงสร้างฟีนีล (Phenyl)



10.4.2 การเรียกชื่อพวกที่มีอะตอมเกาะที่วงเบนซีน 2 แห่ง

(Disubstituted benzene)

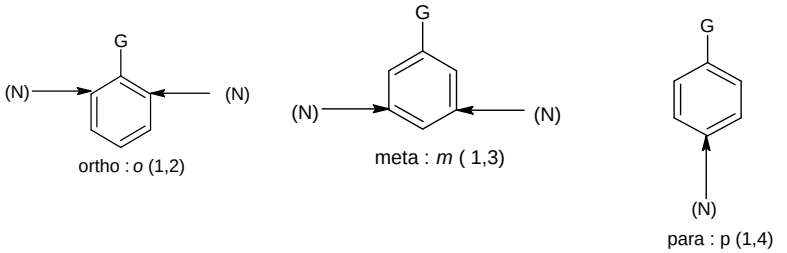
อนุพันธ์เบนซีนที่มีอะตอมแทนที่ไฮโดรเจน 2 ตำแหน่งมี 3 isomer

ตำแหน่งที่อะตอมหรือหมู่อะตอมทั้งสองเกาะอยู่หน้าโซ่หลัก คือ

- ตำแหน่ง Ortho : ออร์โทหรือ *o*–
- ตำแหน่ง Meta : เมต้าหรือ *m* ––
- ตำแหน่ง Para : พาราหรือ *p*–

G = หมู่แทนที่เดิม

(N) = หมู่แทนที่หมู่ที่สอง

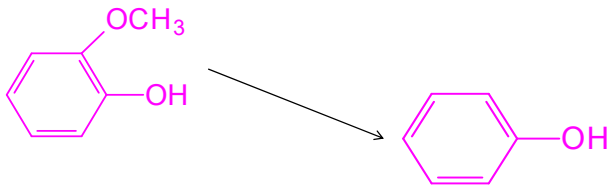


การเรียกชื่อพวกที่มีอะตอมเกาะที่วงเบนซีน 2 แห่ง

- ให้เรียกชื่ออะตอมหรือหมู่แทนที่อะตอมที่เกาะ

โดยระบุตำแหน่งของหมู่เกาะใหม่เป็น *o,m* และ *p*

- ส่วนโซ่หลักเรียก benzene หรือชื่อเฉพาะ



:โซ่หลัก : hydroxybenzene

: หมู่เกาะที่ตำแหน่ง ออร์โท ชื่อ methoxy

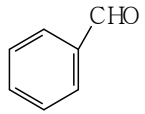
:ชื่อ IUPAC = *o* – Methoxyhydroxybenzene

หรือ = *o* – Methoxyphenol

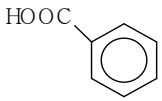
= *o* – Hydroxymethoxybenzene

โครงสร้างที่มีชื่อเฉพาะ

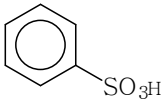
– ใช้เป็นชื่อหลัก หรือคำลงท้ายในชื่อ IUPAC



Benzaldehyde



Benzoic acid



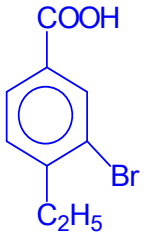
Benzenesulfonic acid

10.4.3 การเรียกชื่อพวกที่มีอะตอมเกาะที่วงเบนซีนมากกว่า 2 แห่ง(Polysubstituted benzene)

- ให้เรียกชื่ออะตอมหรือหมู่แทนที่อะตอมที่เกาะ

โดยระบุตำแหน่งของหมู่เกาะใหม่เป็น *ตัวเลข*

- ส่วนคำต่อท้ายเรียก benzene



: โซ่หลัก benzoic acid

: หมู่เกาะที่ 3 = bromo

หมู่เกาะที่ 4 = ethyl

ชื่อ IUPAC = 3–Bromo–4–ethylbenzoic acid