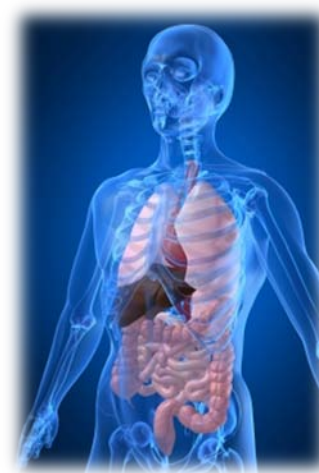




ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

1^η θεματική ενότητα: Η δομή του ατόμου του C



Σχολή: Περιβάλλοντος
Τμήμα: Επιστήμης Τροφίμων και Διατροφής
Εκπαιδευτής: Χαράλαμπος Καραντώνης



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Άδειες Χρήσης

- ❑ Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- ❑ Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αιγαίου**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.



- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Το περίγραμμα του μαθήματος

- **Είδη των δεσμών στις ενώσεις του άνθρακα**
- **Δομή ενώσεων του άνθρακα**
- **Σχέση δομής-δραστηκότητας των οργανικών ενώσεων.**
- **Κύριες τάξεις των οργανικών μορίων**
- **Ονοματολογία κύριων τάξεων οργανικών μορίων**
- **Μηχανισμοί οργανικών αντιδράσεων**

Το μάθημα αυτό δίνει τη γνώση στους φοιτητές/ριες ώστε να μπορούν να ερμηνεύσουν και να προβλέψουν οργανικές αντιδράσεις σε διάφορα συστήματα.

ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

- Τι είναι η οργανική χημεία και γιατί θα πρέπει να την μελετήσουμε;

ΟΡΓΑΝΙΚΕΣ ΧΗΜΙΚΕΣ ΕΝΩΣΕΙΣ

Οι τροφές αποτελούνται από οργανικές χημικές ενώσεις
Φαρμακοθρεπτικά συστατικά-φάρμακα

Οι πρωτεΐνες (π.χ. Μύες)
Το **DNA** (γενετικός κώδικας)

ΒΙΟΜΟΡΙΑ

Από τη βιταλιστική θεωρία στη σύγχρονη οργανική χημεία

- Θεμελίωση οργανικής χημείας: Μέσα 18^{ου} αιώνα (αλχημεία→σύγχρονη επιστήμη)

- Παρατήρηση διαφορών σε ουσίες διαφορετικής προέλευσης (ζωντανές πηγές –ορυκτά).

Οι ουσίες από ζωντανές πηγές:

Δύσκολη απομόνωση και καθαρισμό & διάσπαση

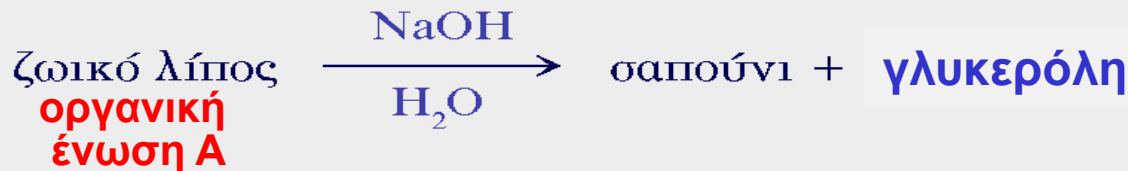
Διαχωρισμός μεταξύ ανόργανων και οργανικών ενώσεων (1770)

- Ο όρος οργανική χημεία κατέληξε να σημαίνει τη χημεία των ενώσεων που προέρχονται από ζωντανούς οργανισμούς

Ο **Βιταλισμός** ή Ζωτικοκρατία (*Vitalism*) είναι μια φιλοσοφική θεωρία της Φυσιολογίας, η οποία υποστηρίζει την **ύπαρξη μιας ζωτικής δύναμης (*vis vitalis*)**, η οποία δημιουργεί όλες τις ζωτικές λειτουργίες των έμβιων οργανισμών.

Στη Χημεία, η *vis vitalis* θεωρείτο απαραίτητη για τη σύνθεση οργανικών ενώσεων.

Από τη βιταλιστική θεωρία στη σύγχρονη οργανική χημεία

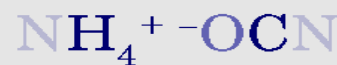


Michel Chevreul,
1816

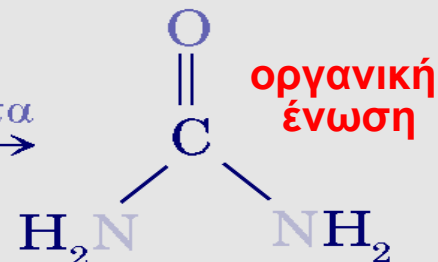
Friedrich Wöhler,
1828

Ο Βιταλισμός απορρίφθηκε μόλις το 1828, όταν ο F.Wöhler παρασκεύασε οργανικές ενώσεις από ανόργανα άλατα, χωρίς δηλαδή να χρησιμοποιήσει κάποια *vis vitalis*. Τον βιταλισμό τον διαδέχθηκε η μηχανιστική άποψη σύμφωνα με την οποία ο τρόπος λειτουργίας του οργανισμού μπορεί να γίνει κατανοητός με βάση την φυσική και την χημεία.

Ανόργανη ένωση



Κυανικό αμμώνιο



Ουρία
ήδη γνωστή (1727)

Μέσα του δέκατου ένατου αιώνα, όλες οι μαρτυρίες συνηγορούσαν κατά της «βιταλιστικής θεωρίας», «Δεν είναι δυνατόν να χαραχτεί καμία καθοριστική γραμμή μεταξύ οργανικής και ανόργανης χημείας. Οποιοσδήποτε διαφορές

...

θα πρέπει προς το παρόν να ληφθούν υπόψη απλά...

ΣΥΓΧΡΟΝΗ ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

Οι σύγχρονοι χημικοί, με μια τεράστια ποικιλία ιδιαίτερα εξειδικευμένων μεθόδων, είναι σε θέση να συνθέσουν νέες οργανικές ενώσεις στο εργαστήριο

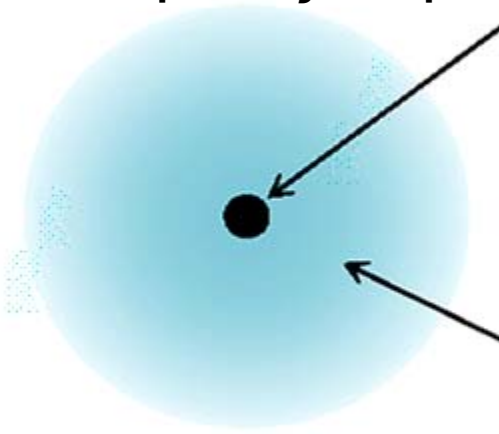
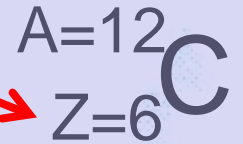
- Πρόσθετα τροφίμων
- Φυτοφάρμακα
- Πολυμερή
- Πλαστικά
- Χρώματα - Χρωστικές
- Φάρμακα -
Φαρμακοθρεπτικά

ΔΟΜΗ ΑΤΟΜΟΥ ΑΤΟΜΙΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

Η ΔΟΜΗ ΤΟΥ ΑΤΟΜΟΥ

Όλα τα άτομα ενός δεδομένου στοιχείου έχουν τον ίδιο ατομικό αριθμό

Πυρήνας (πρωτόνια + νετρόνια)



Διάμετρο: 10^{-14} έως 10^{-15} m

ΑΤΟΜΙΚΟ ΒΑΡΟΣ C: 12,011

Χώρος γύρω από τον πυρήνα, όπου «περιστρέφονται» τα ηλεκτρόνια

Διάμετρο: 2×10^{-10} m

$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

ΑΤΟΜΙΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

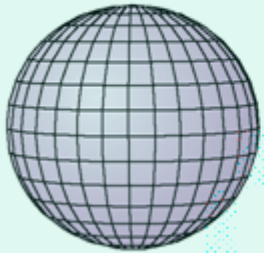
Κατανομή ηλεκτρονίων στα άτομα

Η κίνηση ενός ηλεκτρονίου γύρω από έναν πυρήνα μπορεί να περιγραφεί μαθηματικά με τη γνωστή ως κυματική εξίσωση (Θεωρία κβαντομηχανικής, Erwin Schrödinger)

Λύση της κυματικής εξίσωσης: Τροχιακό (ή κυματική συνάρτηση ψ)

Το $|\psi|^2$ προσδιορίζει την περιοχή του χώρου γύρω από έναν πυρήνα, στον οποίο είναι πιθανό να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο

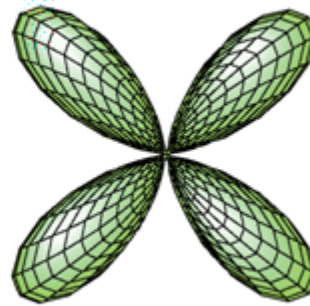
ΜΟΡΦΗ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ



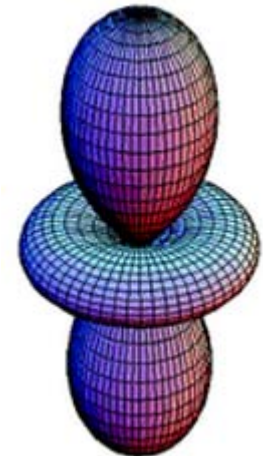
Τροχιακό s



Τροχιακό p

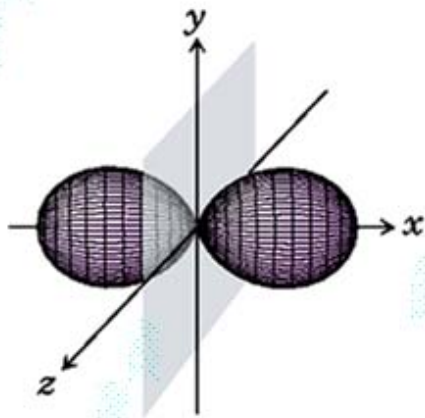


Τροχιακό d

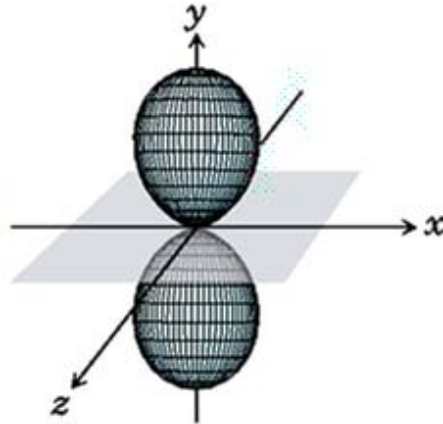


Τροχιακό d

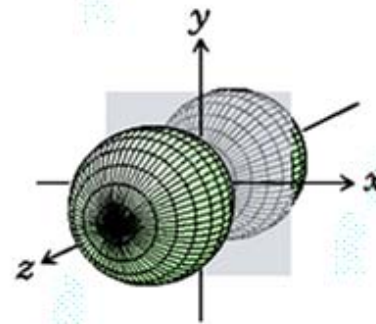
ρ-ΤΡΟΧΙΑΚΑ



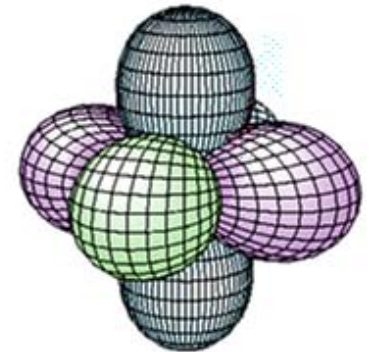
Τροχιακό $2p_x$



Τροχιακό $2p_y$



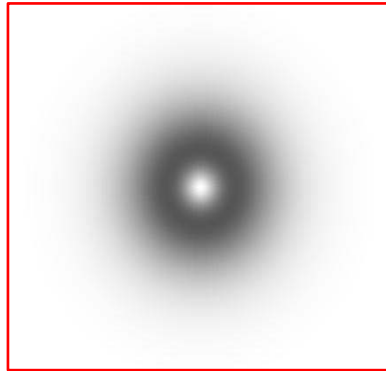
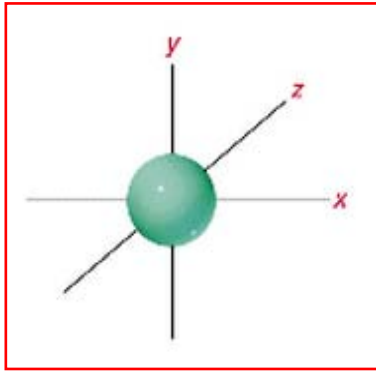
Τροχιακό $2p_z$



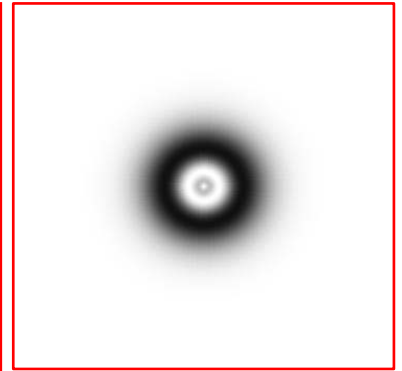
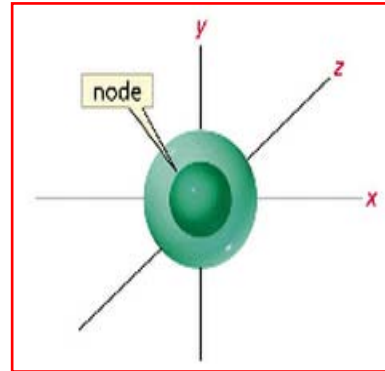
Τρία τροχιακά $2p$

Μια περιοχή μηδενικής ηλεκτρονικής πυκνότητας καλείται κόμβος και το επίπεδο που διέρχεται από την περιοχή αυτή ονομάζεται κομβικό επίπεδο.

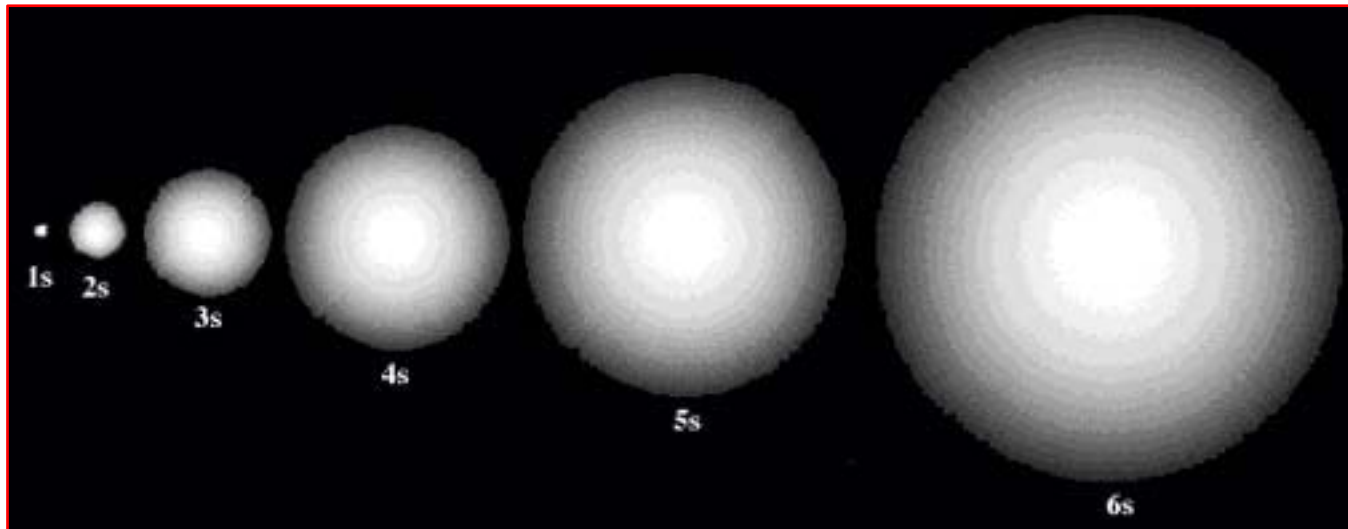
s-TPOXIAKA



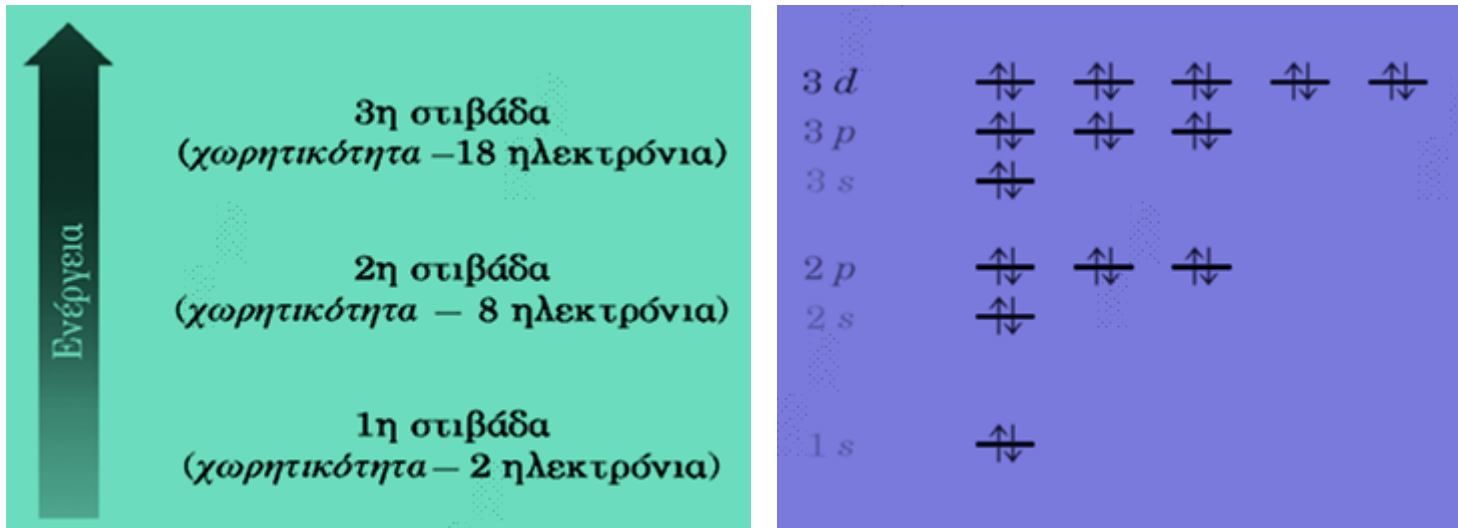
1s



2s



ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ



ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΙΑΤΑΞΗ ΒΑΣΙΚΗΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ

Η χαμηλότερης ενέργειας διευθέτηση των ηλεκτρονίων ενός ατόμου

1) ΑΡΧΗ ΤΗΣ ΕΛΑΧΙΣΤΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ

Πρώτα καταλαμβάνονται τα χαμηλότερης ενέργειας τροχιακά ($n+l$), σύμφωνα με τη σειρά



2) ΑΠΑΓΟΡΕΥΤΙΚΗ ΑΡΧΗ ΤΟΥ Pauli

Μόνο δύο ηλεκτρόνια μπορούν να καταλάβουν ένα τροχιακό και πρέπει να είναι αντίθετου σπιν

3) ΚΑΝΟΝΑΣ ΤΟΥ HUND

Εάν υπάρχουν διαθέσιμα δύο ή περισσότερα κενά τροχιακά ίσης ενέργειας, το καθένα καταλαμβάνεται από ένα ηλεκτρόνιο έως ότου ημιπληρωθούν όλα τα τροχιακά, με τα ηλεκτρόνια να έχουν παράλληλα σπιν.

Στοιχείο	Ατομικός αριθμός	Διάταξη
Υδρογόνο	1	1s \uparrow
Άνθρακας	6	1s $\uparrow\downarrow$ 2s $\uparrow\downarrow$ 2p $\uparrow\downarrow$ \uparrow $_$

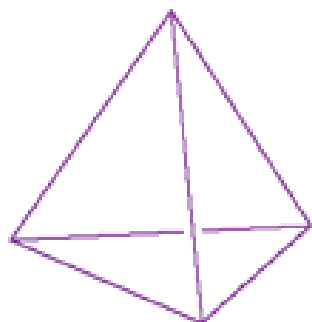
ΧΗΜΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

ΧΗΜΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ ΚΑΙ ΤΟ ΑΤΟΜΟ ΤΟΥ ΑΝΘΡΑΚΑ

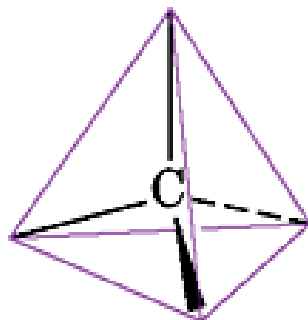
- Ο άνθρακας είναι **τετρασθενής** και μπορεί να σχηματίσει έως και τέσσερις δεσμούς όταν συνδέεται με άλλα στοιχεία.
- Τα άτομα του άνθρακα μπορούν να σχηματίζουν δεσμούς μεταξύ τους με τη μορφή εκτεταμένων **αλυσίδων**.
- Η σύνδεση μεταξύ των ατόμων του άνθρακα είναι δυνατή και με **πολλαπλούς δεσμούς**.
- Οι ανθρακικές αλυσίδες μπορούν να αναδιπλωθούν και να δημιουργήσουν **δακτυλίους**.
- Οι τέσσερις δεσμοί του άνθρακα έχουν **συγκεκριμένη κατεύθυνση**.

Ο ΑΝΘΡΑΚΑΣ ΜΠΟΡΕΙ ΚΑΙ ΣΧΗΜΑΤΙΖΕΙ ΤΕΤΡΑΕΔΡΙΚΕΣ ΔΟΜΕΣ

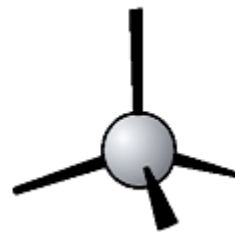
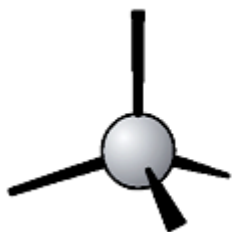
Τα τέσσερα άτομα με τα οποία είναι συνδεδεμένος ο άνθρακας τοποθετούνται στις γωνίες ενός κανονικού τετραέδρου, με τον άνθρακα στο κέντρο



τετραέδρο



Παράδειγμα
 CHCl_3
Τριχλωρομεθάνιο
(χλωροφόρμιο)



ΤΡΙΣΔΙΑΣΤΑΤΗ ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΗ

Γραμμές

- Συνεχείς
- Έντονες
- Διακεκομμένες

ΦΥΣΗ ΤΟΥ ΧΗΜΙΚΟΥ ΔΕΣΜΟΥ

Γιατί τα άτομα συνδέονται μεταξύ τους;

Τα άτομα συνδέονται μεταξύ τους, διότι η ένωση που προκύπτει είναι **σταθερότερη** (έχει λιγότερη ενέργεια) από τα ξεχωριστά άτομα.

Πολλά στοιχεία τείνουν να αποκτήσουν δομή ευγενούς αερίου κανόνας της οκτάδας

Ενέργεια ιοντισμού ατόμου (E_i): Το ποσό ενέργειας που απαιτείται για τη μετακίνηση ενός ηλεκτρονίου από ένα απομονωμένο άτομο στην αέρια φάση.

Ηλεκτρονική συγγένεια ατόμου (E_{ea}): Το μέτρο της τάσης ενός απομονωμένου ατόμου στην αέρια φάση να αποκτήσει ένα ηλεκτρόνιο.

ΦΥΣΗ ΤΟΥ ΧΗΜΙΚΟΥ ΔΕΣΜΟΥ

Ο κανόνας της οκτάδας

ΙΟΝΤΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

Δοσοληψία ηλεκτρονίων

Λήψη ή παραχώρηση ηλεκτρονίων προς σχηματισμό δεσμών και επίτευξη δομής ευγενών αερίων για τα συμμετέχοντα άτομα

ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

Συνεισφορά ηλεκτρονίων

Το άτομο του άνθρακα C ($1s^2 2s^2 2p^2$) συνδέεται με άλλα άτομα συνεισφέροντάς τα ηλεκτρονιά του προς δημιουργία ομοιοπολικών δεσμών.

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

<http://www.ktf-split.hr/periodni/en/>

PERIOD	GROUP I A		GROUP IIA		GROUP IIIA										GROUP IVA		GROUP VA		GROUP VIA		GROUP VIIA		GROUP VIIIA		
1	1 1.0079 H HYDROGEN		2 9.0122 He HELIUM																						
2	3 6.941 Li LITHIUM		4 9.0122 Be BERYLLIUM												5 10.811 B BORON		6 12.011 C CARBON		7 14.007 N NITROGEN		8 15.999 O OXYGEN		9 18.998 F FLUORINE		10 20.180 Ne NEON
3	11 22.990 Na SODIUM		12 24.305 Mg MAGNESIUM												13 26.982 Al ALUMINIUM		14 28.086 Si SILICON		15 30.974 P PHOSPHORUS		16 32.065 S SULPHUR		17 35.453 Cl CHLORINE		18 39.948 Ar ARGON
4	19 39.098 K POTASSIUM		20 40.078 Ca CALCIUM		21 44.956 Sc SCANDIUM	22 47.867 Ti TITANIUM	23 50.942 V VANADIUM	24 51.996 Cr CHROMIUM	25 54.938 Mn MANGANESE	26 55.845 Fe IRON	27 58.933 Co COBALT	28 58.693 Ni NICKEL	29 63.546 Cu COPPER	30 65.39 Zn ZINC	31 69.723 Ga GALLIUM	32 72.64 Ge GERMANIUM	33 74.922 As ARSENIC	34 78.96 Se SELENIUM	35 79.904 Br BROMINE	36 83.80 Kr KRYPTON					
5	37 85.468 Rb RUBIDIUM		38 87.62 Sr STRONTIUM		39 88.906 Y YTTRIUM	40 91.224 Zr ZIRCONIUM	41 92.906 Nb NIOBIUM	42 95.94 Mo MOLYBDENUM	43 (98) Tc TECHNETIUM	44 101.07 Ru RUTHENIUM	45 102.91 Rh RHODIUM	46 106.42 Pd PALLADIUM	47 107.87 Ag SILVER	48 112.41 Cd CADMIUM	49 114.82 In INDIUM	50 118.71 Sn TIN	51 121.76 Sb ANTIMONY	52 127.60 Te TELLURIUM	53 126.90 I IODINE	54 131.29 Xe XENON					
6	55 132.91 Cs CAESIUM		56 137.33 Ba BARIUM		57-71 La-Lu Lanthanide	72 178.49 Hf HAFNIUM	73 180.95 Ta TANTALUM	74 183.84 W TUNGSTEN	75 186.21 Re RHENIUM	76 190.23 Os OSMIUM	77 192.22 Ir IRIDIUM	78 195.08 Pt PLATINUM	79 196.97 Au GOLD	80 200.59 Hg MERCURY	81 204.38 Tl THALLIUM	82 207.2 Pb LEAD	83 208.98 Bi BISMUTH	84 (209) Po POLONIUM	85 (210) At ASTATINE	86 (222) Rn RADON					
7	87 (223) Fr FRANCIUM		88 (226) Ra RADIUM		89-103 Ac-Lr Actinide	104 (261) Rf RUTHERFORDIUM	105 (262) Db DUBNIUM	106 (266) Sg SEABORGIUM	107 (264) Bh BOHRIUM	108 (277) Hs HASSIUM	109 (268) Mt MEITNERIUM	110 (281) Uun UNUNNIUM	111 (272) Uuu UNUNUNIUM	112 (285) Uub UNUNBIUM	114 (289) Uuq UNUNQUADIUM										

RELATIVE ATOMIC MASS (1)

GROUP IUPAC

GROUP CAS

ATOMIC NUMBER

SYMBOL

ELEMENT NAME

- Metal
- Semimetal
- Nonmetal
- 1 Alkali metal
- 2 Alkaline earth metal
- Transition metals
- Lanthanide
- Actinide
- 16 Chalcogens element
- 17 Halogens element
- 18 Noble gas

STANDARD STATE (25 °C; 101 kPa)

Ne - gas Fe - solid
Ga - liquid Tc - synthetic

LANTHANIDE

57 138.91 La LANTHANUM	58 140.12 Ce CERIUM	59 140.91 Pr PRASEODYMIUM	60 144.24 Nd NEODYMIUM	61 (145) Pm PROMETHIUM	62 150.36 Sm SAMARIUM	63 151.96 Eu EUROPIUM	64 157.25 Gd GADOLINIUM	65 158.93 Tb TERBIUM	66 162.50 Dy DYSPROSIUM	67 164.93 Ho HOLMIUM	68 167.26 Er ERBIUM	69 168.93 Tm THULIUM	70 173.04 Yb YTTERIUM	71 174.97 Lu LUTETIUM
-------------------------------------	----------------------------------	--	-------------------------------------	-------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	------------------------------------	------------------------------------

ACTINIDE

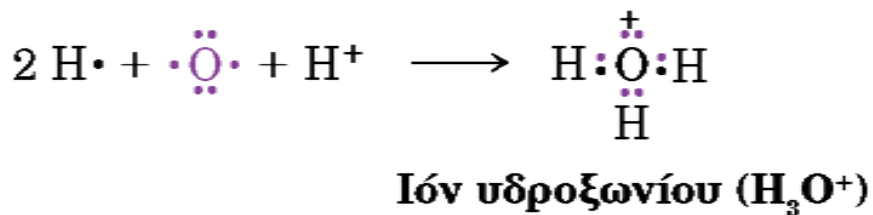
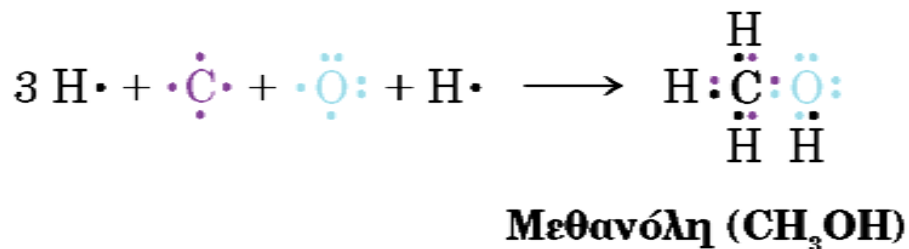
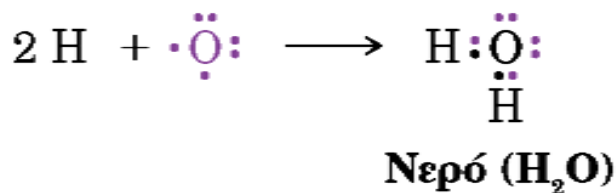
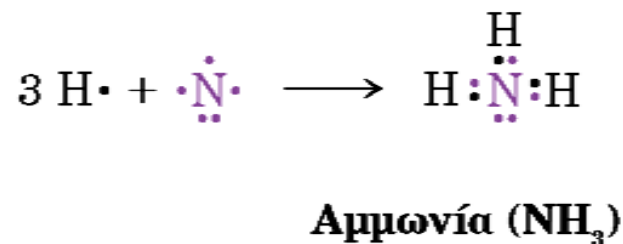
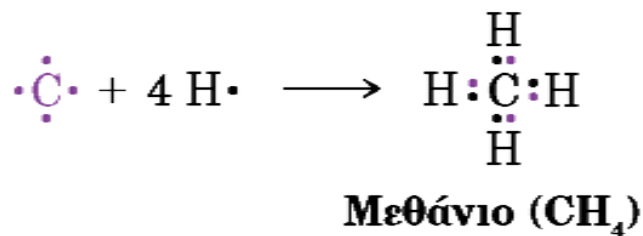
89 (227) Ac ACTINIUM	90 232.04 Th THORIUM	91 231.04 Pa PROTACTINIUM	92 238.03 U URANIUM	93 (237) Np NEPTUNIUM	94 (244) Pu PLUTONIUM	95 (243) Am AMERICIUM	96 (247) Cm CURIUM	97 (247) Bk BERKELIUM	98 (251) Cf CALIFORNIUM	99 (252) Es EINSTEINIUM	100 (257) Fm FERMIUM	101 (258) Md MENDELEVIUM	102 (259) No NOBELIUM	103 (262) Lr LAWRENCIUM
-----------------------------------	-----------------------------------	--	----------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	---------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	---------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------

(1) Pure Appl. Chem., 73, No. 4, 667-683 (2001)
Relative atomic mass is shown with five significant figures. For elements having no stable nuclides, the value enclosed in brackets indicates the mass number of the longest-lived isotope of the element.

However three such elements (Th, Pa, and U) do have a characteristic terrestrial isotopic composition, and for these an atomic weight is tabulated.

Ο C ΣΧΗΜΑΤΙΖΕΙ ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΥΣ ΔΕΣΜΟΥΣ ΔΟΜΕΣ ΚΑΤΑ LEWIS

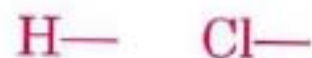
Τρόπος για να παρασταθούν οιομοιοπολικοί δεσμοί
Τα ηλεκτρόνια σθένους ενός ατόμου παριστάνονται με τελείες



Ένα σταθερό μόριο σχηματίζεται όταν τα άτομα που το αποτελούν έχουν αποκτήσει τη διάταξη ευγενούς αερίου με πλήρη τα τροχιακά σθένους s και p

Άτομα με ένα, δύο ή τρία ηλεκτρόνια σθένους σχηματίζουν έναν, δύο ή τρεις δεσμούς.

Άτομα με τέσσερα ή περισσότερα ηλεκτρόνια σθένους σχηματίζουν τόσους δεσμούς όσα και τα ηλεκτρόνια που απαιτούνται για την πλήρωση των s και p τροχιακών προς δομή ευγενούς αερίου.



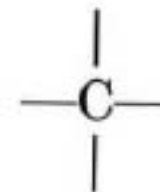
Ένας δεσμός



Δύο δεσμοί

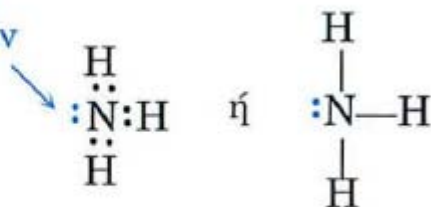


Τρεις δεσμοί



Τέσσερις δεσμοί

Αδεσμικά μονήρες
ζεύγος ηλεκτρονίων



Αμμωνία

Αδεσμικά ηλεκτρόνια ή αδεσμικά μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων:
Ηλεκτρόνια σθένους που δεν χρησιμοποιούνται για το σχηματισμό δεσμών.

ΔΟΜΕΣ ΚΕΚΟΥΛΕ

Δομές γραμμών-δεσμών

Ο ομοιοπολικός δεσμός δύο ηλεκτρονίων παριστάνεται με μια γραμμή που ενώνει δύο άτομα.

Όνομασία	Δομή Lewis	Δομή Kekulé
Νερό (H ₂ O)	$\text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$	$\text{H}-\text{O}-\text{H}$
Αμμωνία (NH ₃)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}:\ddot{\text{N}}:\text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \end{array}$

Όνομασία	Δομή Lewis	Δομή Kekulé
Μεθάνιο (CH ₄)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}:\ddot{\text{C}}:\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Μεθανόλη (CH ₃ OH)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}:\ddot{\text{C}}:\ddot{\text{O}}:\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$

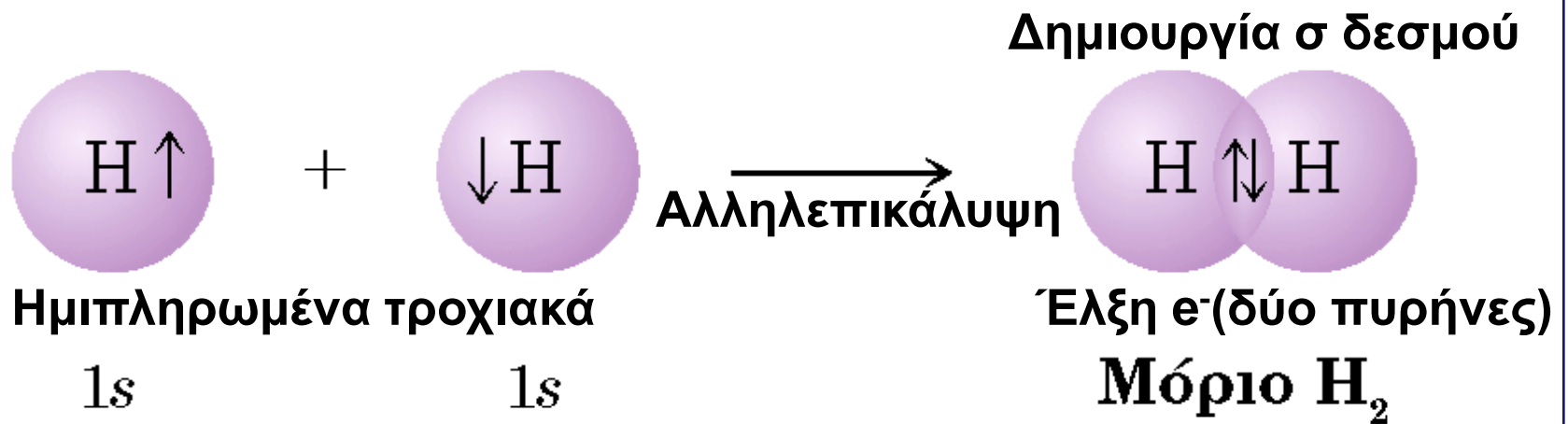
ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΩΝ ΔΕΣΜΩΝ

- **ΘΕΩΡΙΑ ΔΕΣΜΟΥ ΣΘΕΝΟΥΣ**

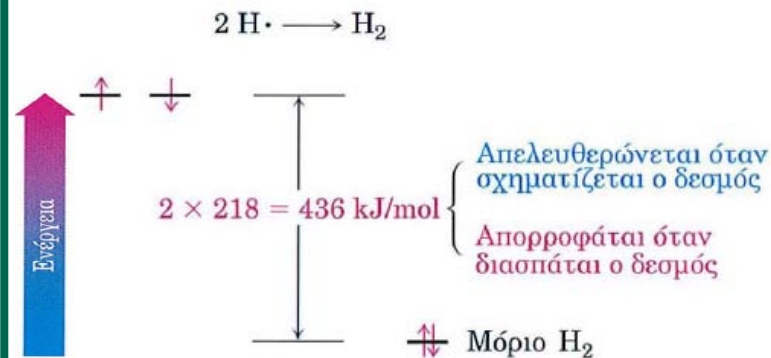
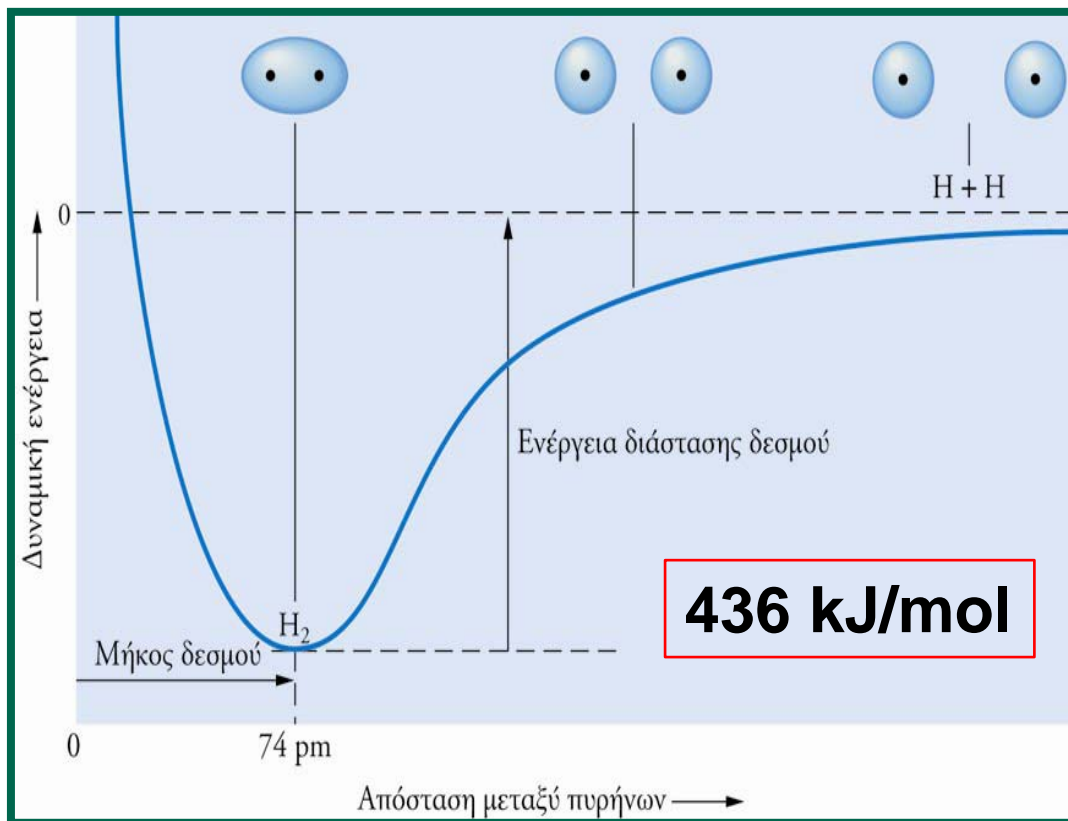
- **ΘΕΩΡΙΑ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ**

ΘΕΩΡΙΑ ΔΕΣΜΟΥ ΣΘΕΝΟΥΣ

- 1) Ομοιοπολικοί δεσμοί σχηματίζονται από αλληλεπικάλυση ατομικών τροχιακών, κάθε ένα από τα οποία περιέχει ένα ηλεκτρόνιο αντίθετου σπιν.
- 2) Κάθε ένα από τα συνδεδεμένα άτομα διατηρεί τα ατομικά του τροχιακά, αλλά το ζεύγος ηλεκτρονίων στα αλληλεπικαλυπτόμενα τροχιακά ανήκει και στα δύο άτομα
- 3) Όσο μεγαλύτερη η αλληλεπικάλυση τροχιακών τόσο ισχυρότερος ο δεσμός



ΙΣΧΥΣ ΚΑΙ ΜΗΚΟΣ ΔΕΣΜΟΥ



Βέλτιστη απόσταση = μήκος δεσμού

ΘΕΩΡΙΑ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ

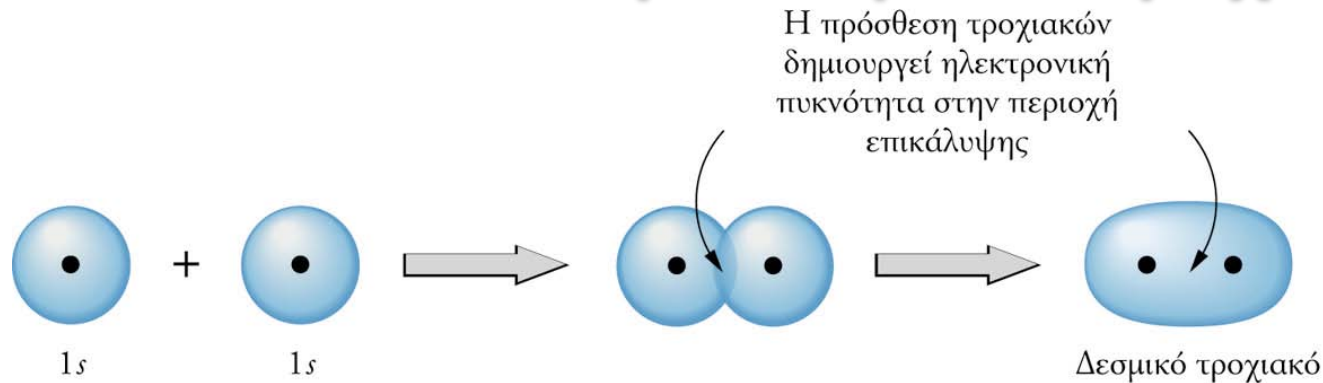
• Τα μοριακά τροχιακά (που είναι για τα μόρια ό,τι τα ατομικά τροχιακά για τα άτομα) περιγράφουν περιοχές του χώρου σε ένα μόριο όπου βρίσκονται τα ηλεκτρόνια κατά προτίμηση, και έχουν ειδικό μέγεθος, σχήμα και ενεργειακό επίπεδο

• Μοριακά τροχιακά (MO, molecular orbitals) σχηματίζονται από το συνδυασμό ατομικών τροχιακών και ο αριθμός των MO που σχηματίζονται είναι ίδιος με τον αριθμό των ατομικών τροχιακών που συνδυάστηκαν.

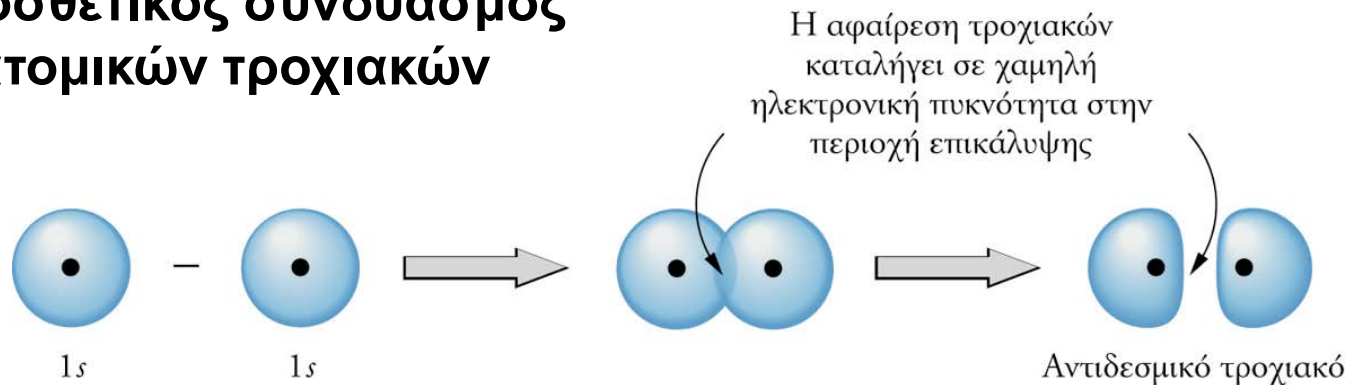
• Μοριακά τροχιακά που είναι χαμηλότερης ενέργειας από τα αρχικά ατομικά τροχιακά είναι δεσμικά . MO που είναι υψηλότερης ενέργειας από τα αρχικά ατομικά τροχιακά είναι αντιδεσμικά και MO με την ίδια ενέργεια όπως τα αρχικά ατομικά τροχιακά είναι αδεσμικά.

ΘΕΩΡΙΑ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ

- Τα μοριακά τροχιακά σχηματίζονται από το συνδυασμό ατομικών τροχιακών

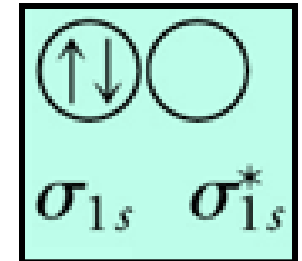


Προσθετικός συνδυασμός ατομικών τροχιακών

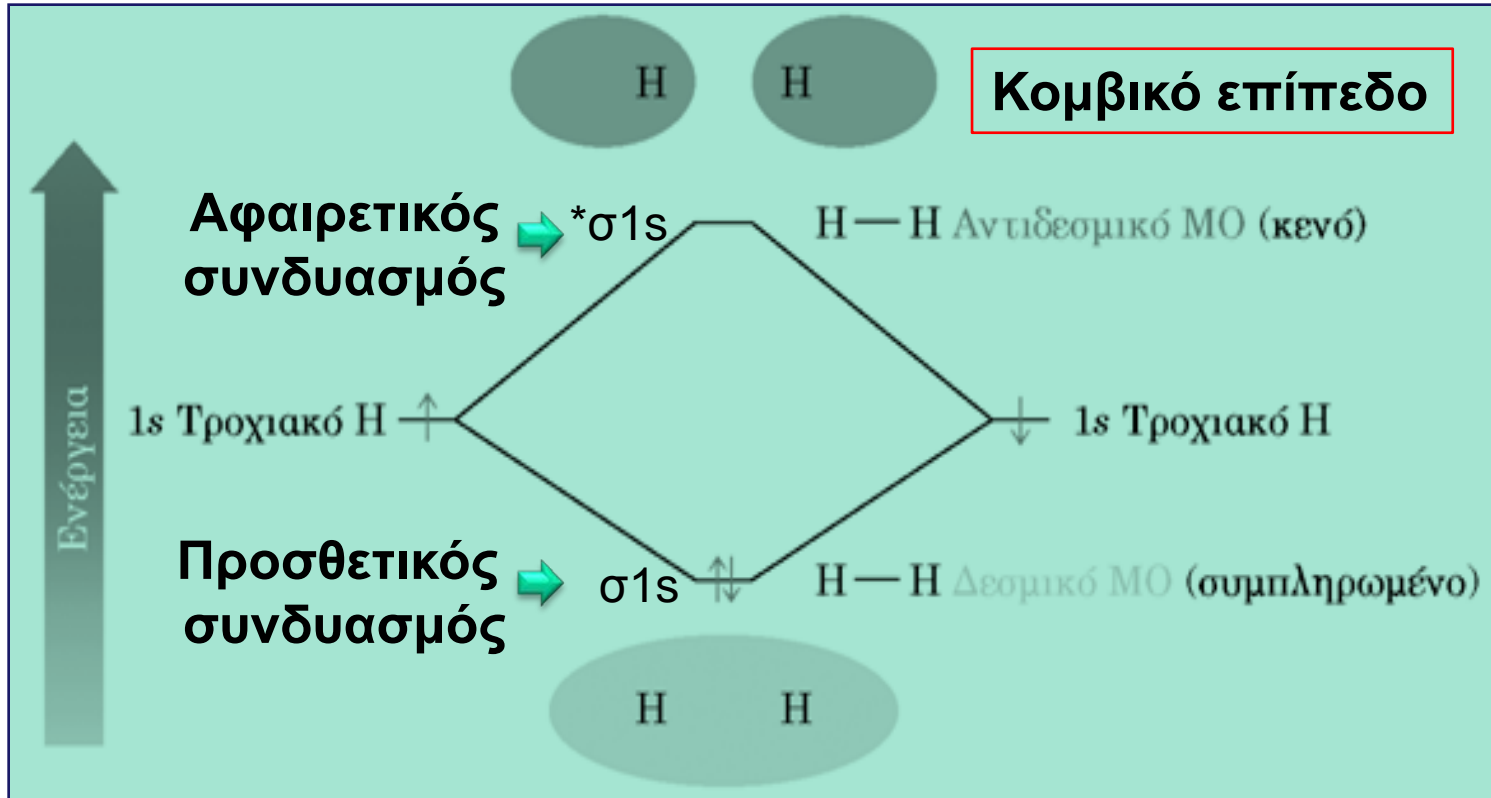


Αφαιρετικός συνδυασμός ατομικών τροχιακών

Κομβικό επίπεδο



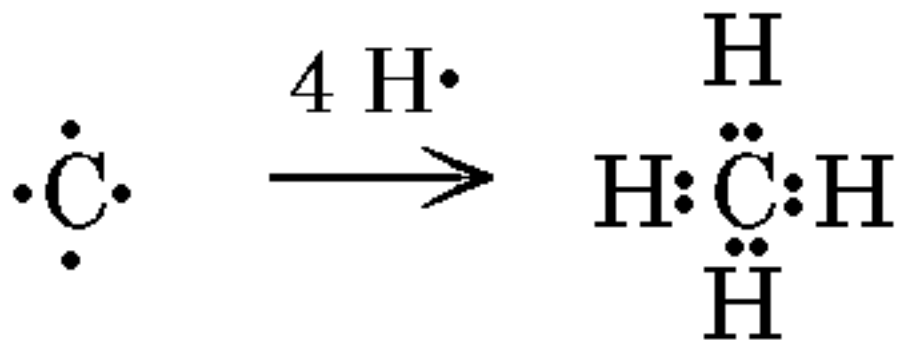
ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ H₂



$$\text{ΤΑΞΗ ΔΕΣΜΟΥ: } \frac{1}{2} (e_{\text{δεσμικά}} - e_{\text{αντιδεσμικά}})$$

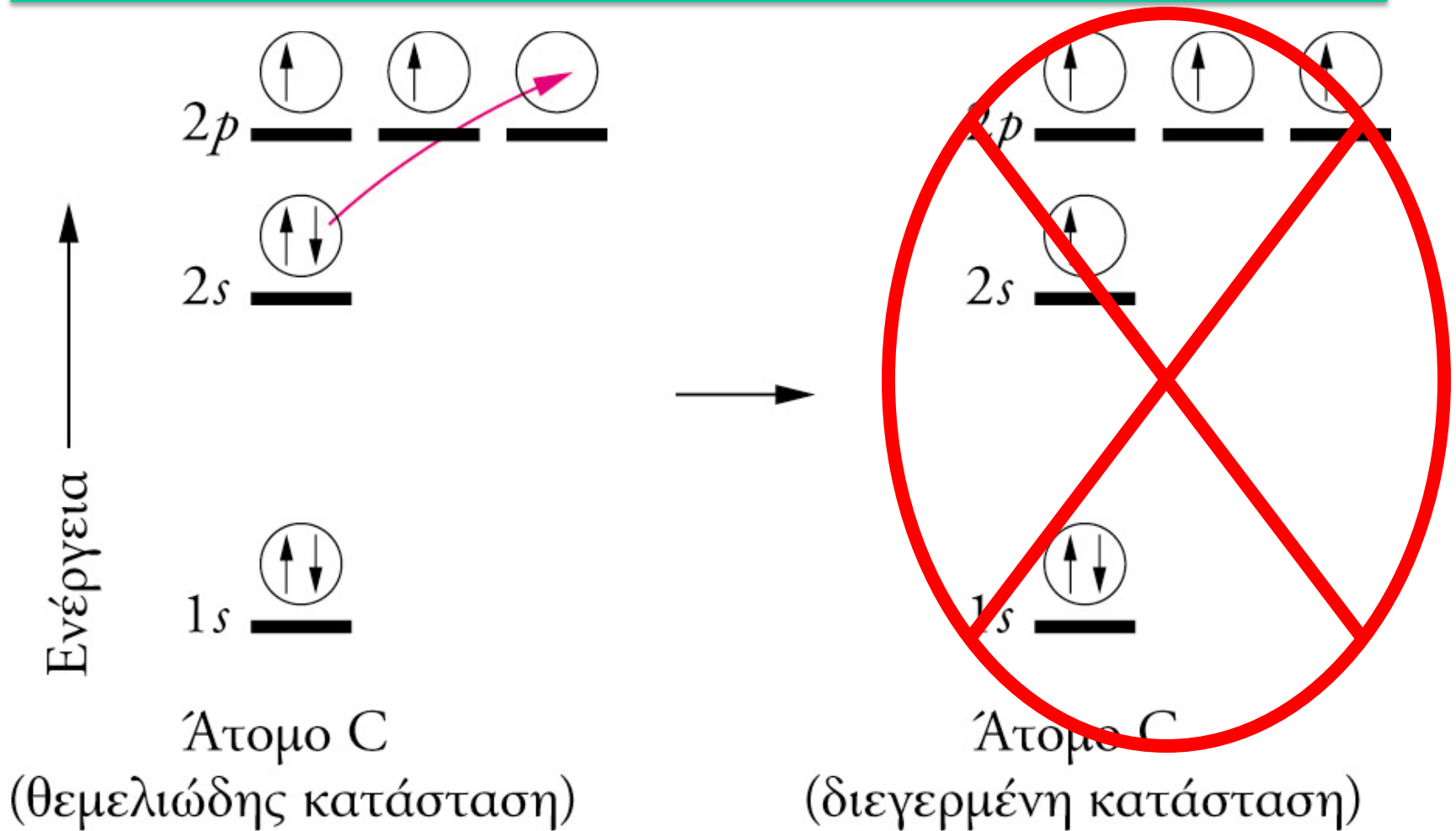
ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΣ ΔΕΣΜΩΝ ΣΕ ΟΡΓΑΝΙΚΑ ΜΟΡΙΑ

ΤΕΤΡΑΣΘΕΝΗΣ ΑΝΘΡΑΚΑΣ: ΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΟΥ CH₄

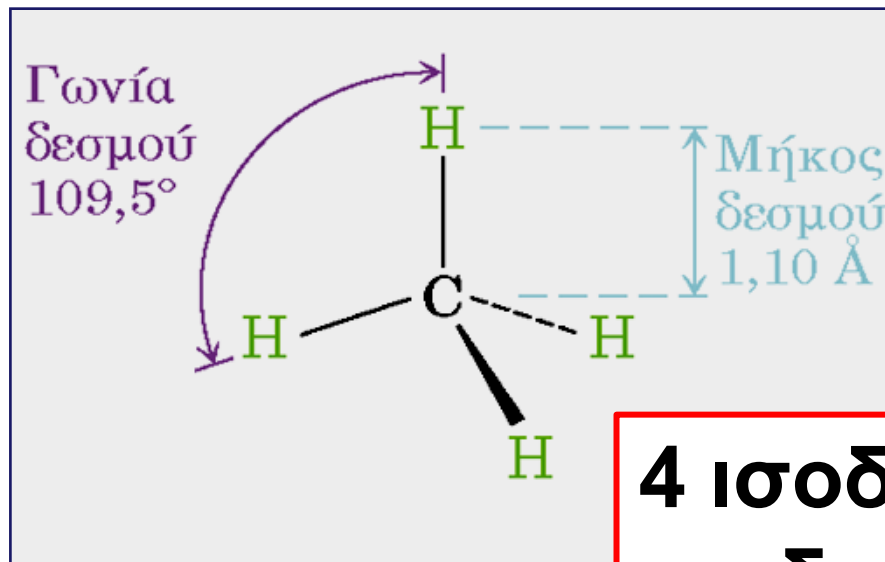
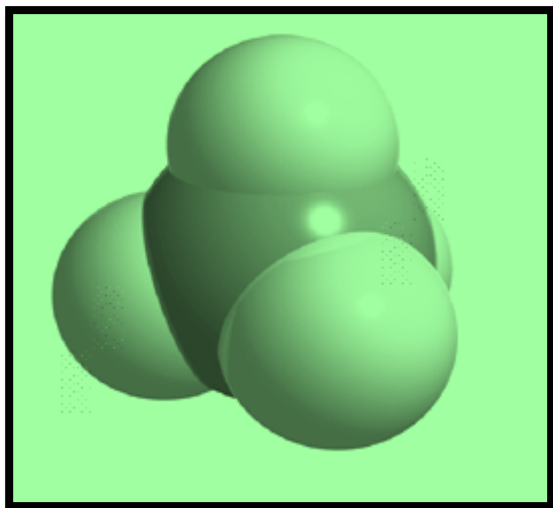


Σχηματισμός τεσσάρων δεσμών

ΑΝΑΚΑΤΑΤΑΞΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ ΚΑΤΑ ΤΗ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΤΩΝ ΔΕΣΜΩΝ



Η ΔΟΜΗ ΤΟ ΜΕΘΑΝΙΟΥ-ΜΙΑ ΤΕΤΡΑΕΔΡΙΚΗ ΔΟΜΗ (ΤΕΤΡΑΕΔΡΙΚΗ ΓΩΝΙΑ)

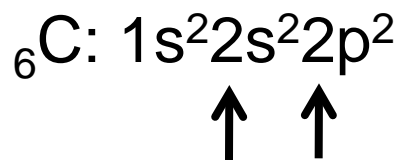


**4 ισοδύναμοι
δεσμοί**

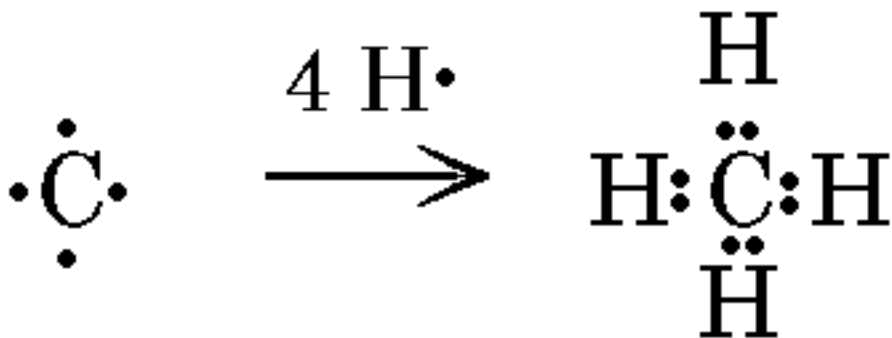


ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΣ ΔΕΣΜΩΝ ΣΕ ΟΡΓΑΝΙΚΑ ΜΟΡΙΑ

ΤΕΤΡΑΣΘΕΝΗΣ ΑΝΘΡΑΚΑΣ: ΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΟΥ CH_4 ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ sp^3

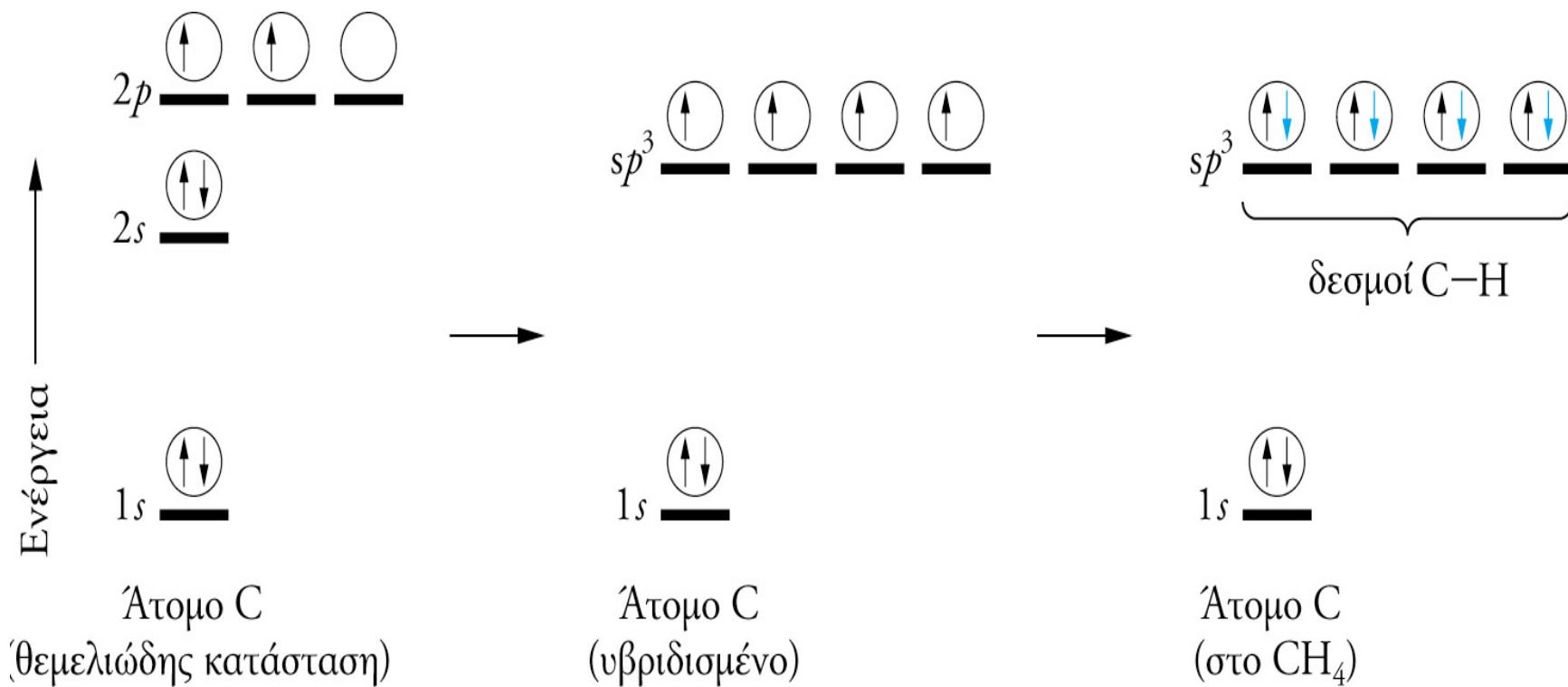


→ Υβριδισμός sp^3 → Ισοδυναμία δεσμών

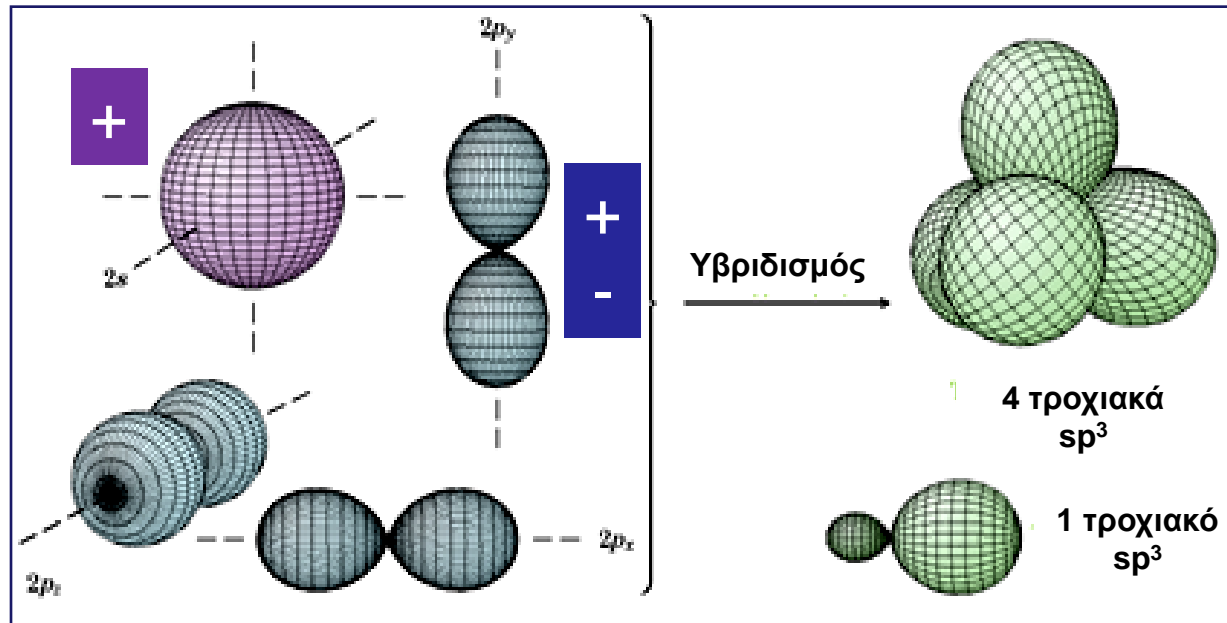


Η έννοια του υβριδισμού ερμηνεύει το **πώς** ο άνθρακας σχηματίζει τέσσερις ισοδύναμους τετραεδρικούς δεσμούς

ΑΠΟΚΟΝΙΣΗ ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΥ ΑΝΘΡΑΚΑ ΚΑΙ ΔΕΣΜΩΝ ΜΕ ΑΤΟΜΑ Η



ΓΙΑΤΙ τα ατομικά τροχιακά του άνθρακα υβριδοποιούνται;



Από το συνδυασμό ενός ατομικού τροχιακού s και τριών ατομικών τροχιακών p σχηματίζονται τέσσερα sp^3 υβριδικά τροχιακά που κατευθύνονται προς τις γωνίες ενός κανονικού τετραέδρου

Ο ένας από τους δύο λοβούς ενός τροχιακού sp^3 είναι πολύ μεγαλύτερος από τον άλλο, και αλληλεπικαλύπτεται καλύτερα με το τροχιακό ενός άλλου ατόμου, όταν σχηματίζει μαζί του δεσμό. Έτσι, τα υβριδικά sp^3 τροχιακά σχηματίζουν ισχυρότερους δεσμούς από τα μη υβριδισμένα τροχιακά s ή p

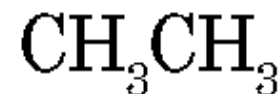
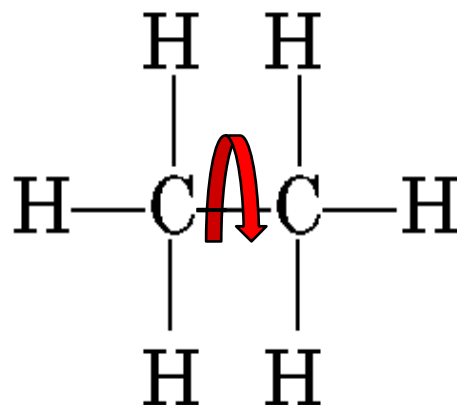
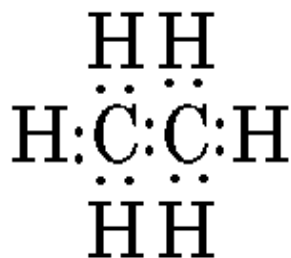
ΤΕΤΡΑΣΘΕΝΗΣ ΑΝΘΡΑΚΑΣ: ΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΟΥ C₂H₆

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ sp³- απλός δεσμός

Αιθάνιο: (CH₃CH₃)

το απλούστερο μόριο με έναν δεσμό άνθρακα-άνθρακα

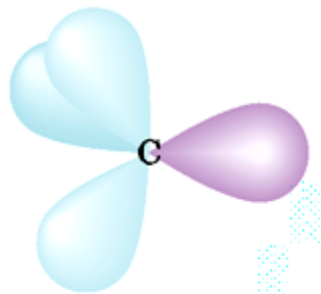
Ο υβριδισμός sp³ που ερμηνεύει τη δομή του μεθανίου ερμηνεύει και τη δημιουργία δεσμού μεταξύ δύο ατόμων άνθρακα που παρατηρείται σε αναρίθμητες οργανικές ενώσεις.



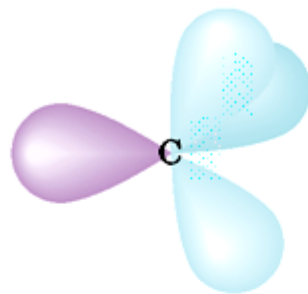
Ελεύθερη περιστροφή

Μερικοί τρόποι περιγραφής της δομής του αιθανίου

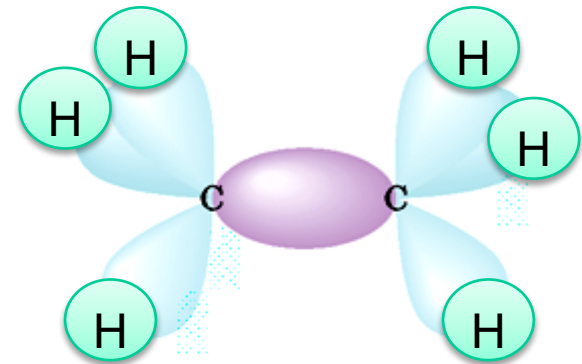
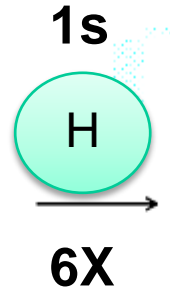
Η ΔΟΜΗ ΤΟΥ ΑΙΘΑΝΙΟΥ



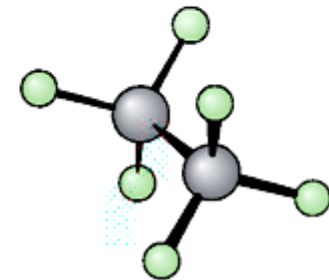
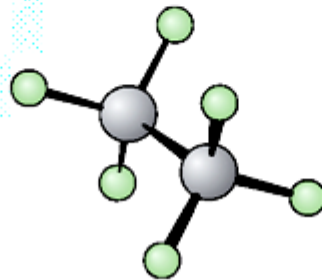
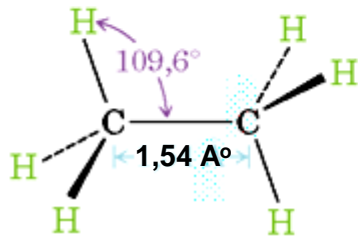
Άνθρακας sp^3



Άνθρακας sp^3

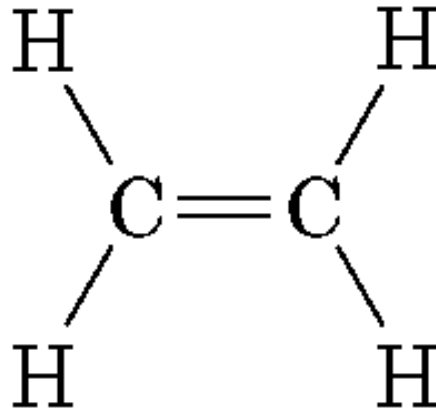
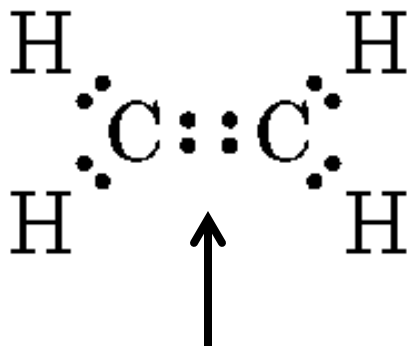


sp^3-sp^3 Δεσμός σίγμα

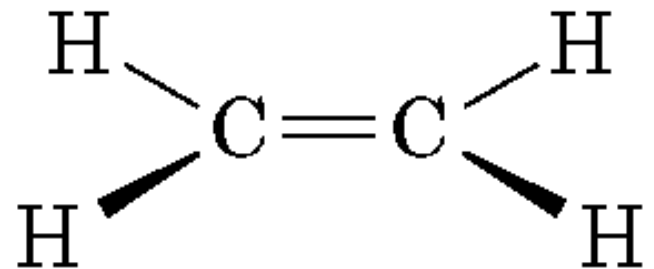


ΤΕΤΡΑΣΘΕΝΗΣ ΑΝΘΡΑΚΑΣ: ΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΟΥ CH_2CH_2

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ sp^2 – διπλός δεσμός



Μη Ελεύθερη περιστροφή



Άνθρακες τετρασθενείς:
Τέσσερα ηλεκτρόνια
Συνδεση με διπλό
δεσμό.

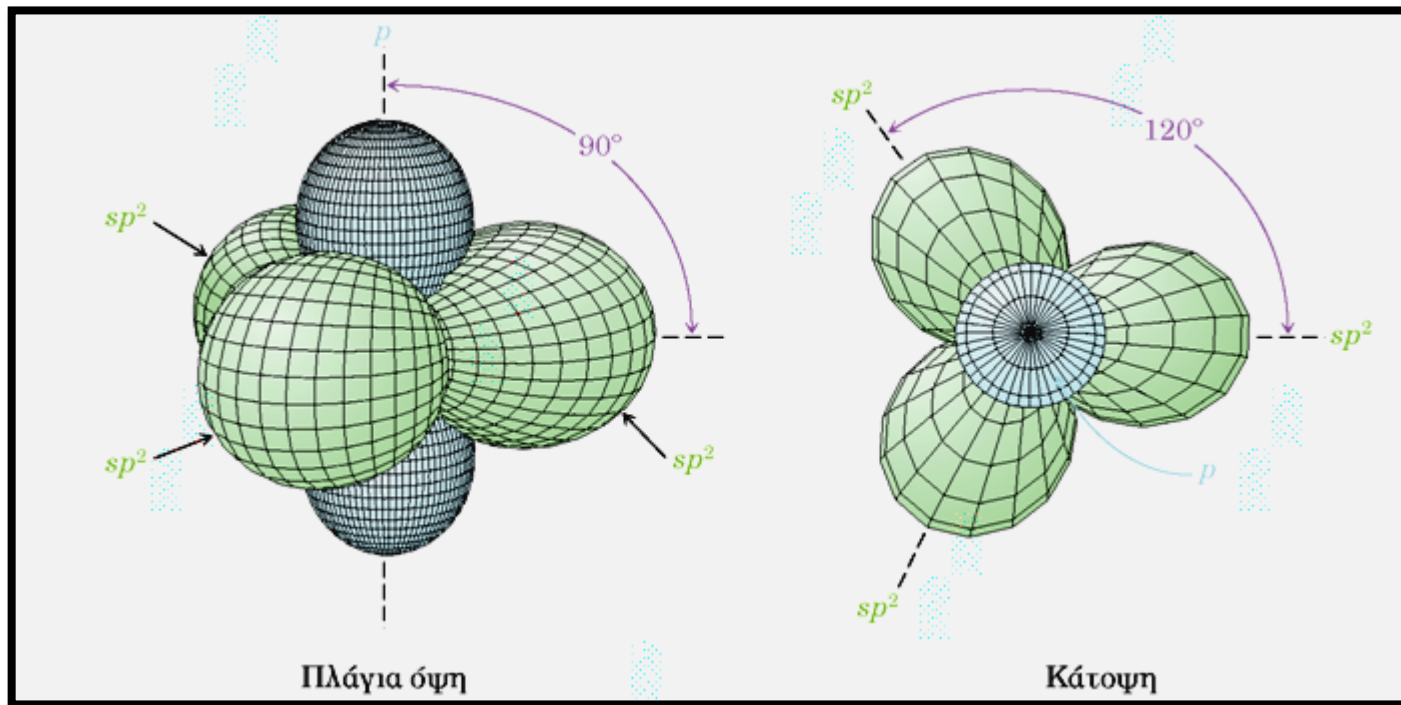
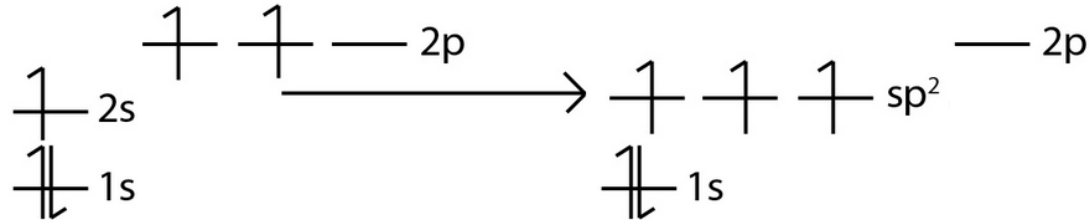
Κάτοψη

Αιθυλένιο

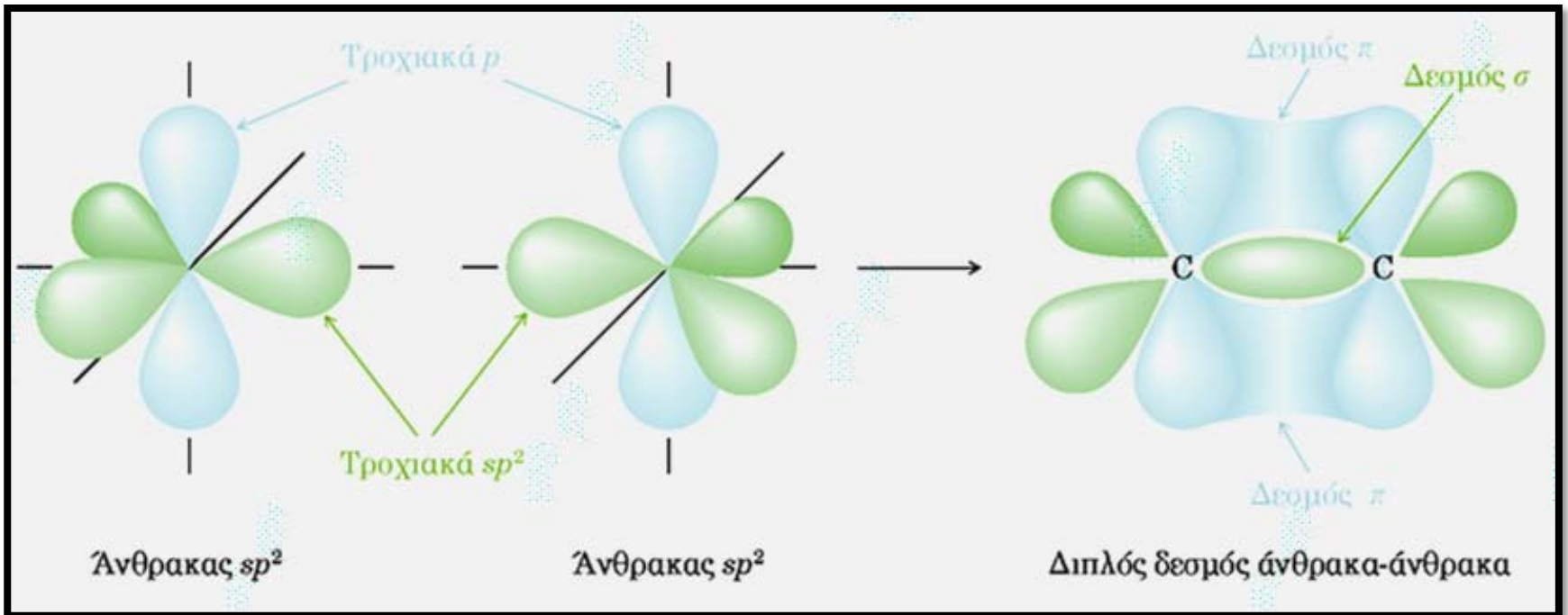
Πλάγια όψη

ΤΕΤΡΑΣΘΕΝΗΣ ΑΝΘΡΑΚΑΣ: ΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΟΥ C_2H_4

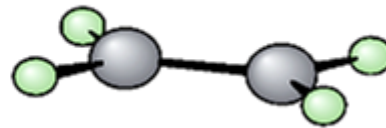
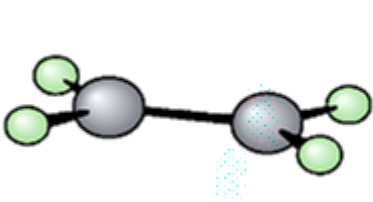
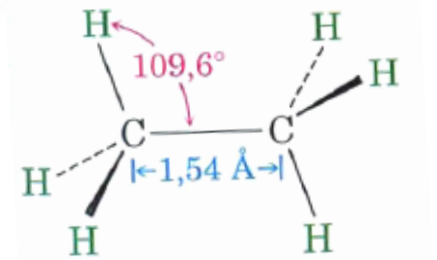
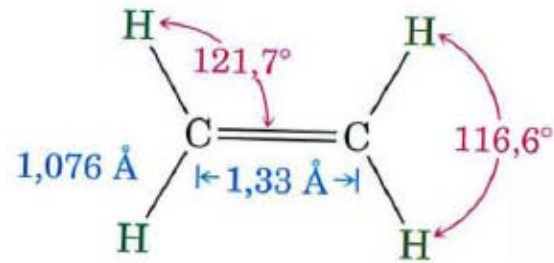
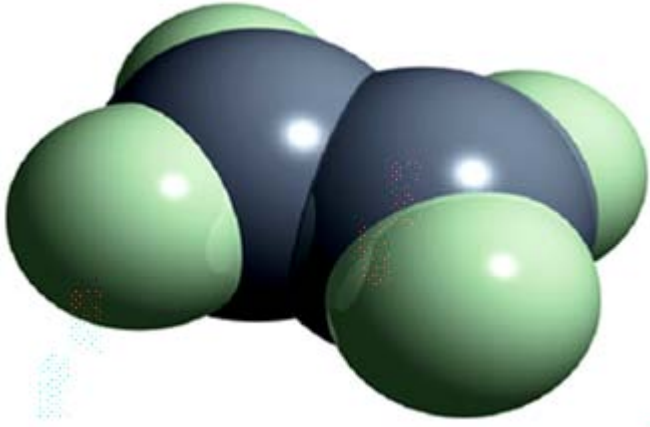
ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ sp^2 – διπλός δεσμός



ΑΛΛΗΛΕΠΙΚΑΛΥΨΗ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ ΣΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΟΥ ΑΙΘΥΛΕΝΙΟΥ



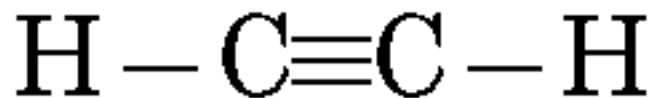
Η ΔΟΜΗ ΤΟ ΑΙΘΥΛΕΝΙΟΥ



sp^2
επίπεδο
μόριο

ΤΕΤΡΑΣΘΕΝΗΣ ΑΝΘΡΑΚΑΣ: ΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΟΥ C_2H_2

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ sp - τριπλός δεσμός

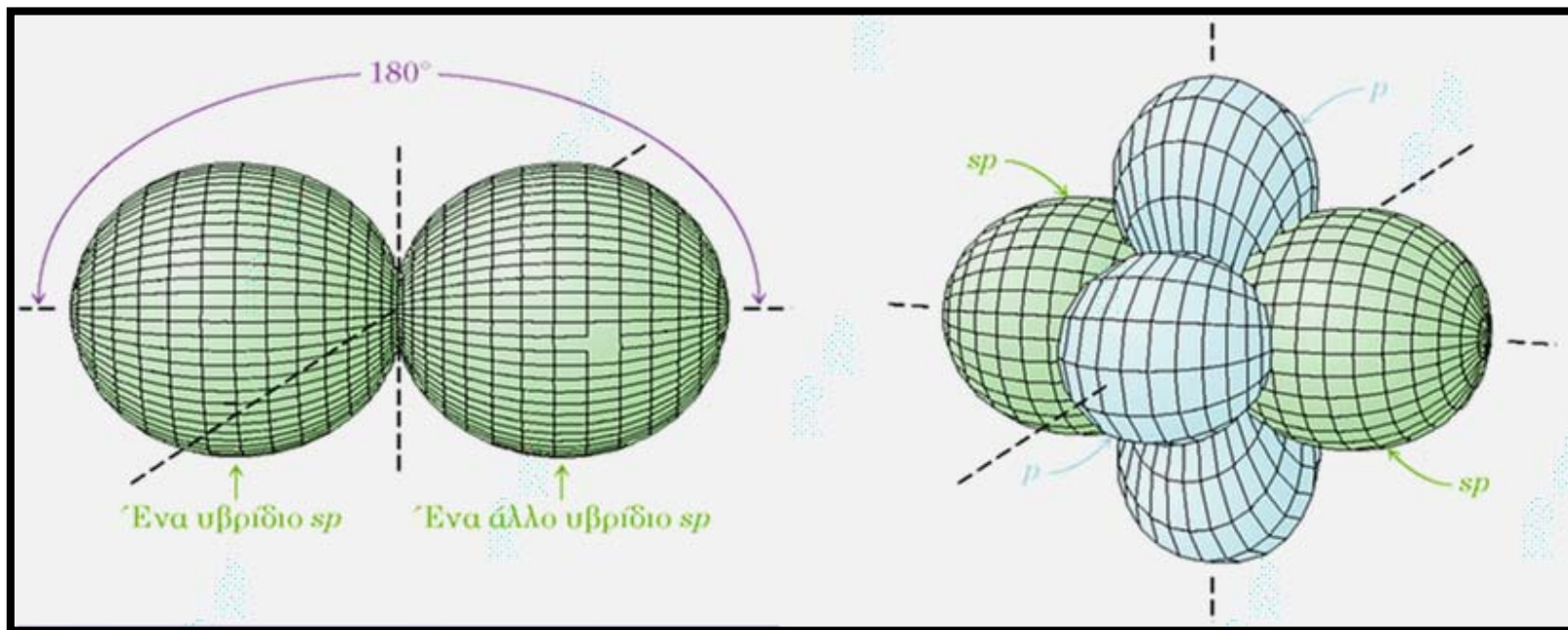
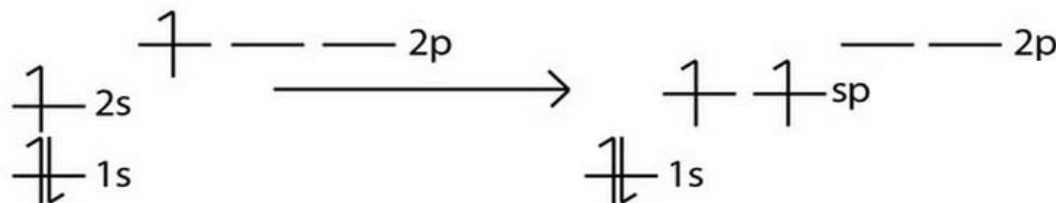


ΑΚΕΤΥΛΕΝΙΟ

Άνθρακες τετρασθενείς:
Έξι ηλεκτρόνια
Σύνδεση με τριπλό
δεσμό.

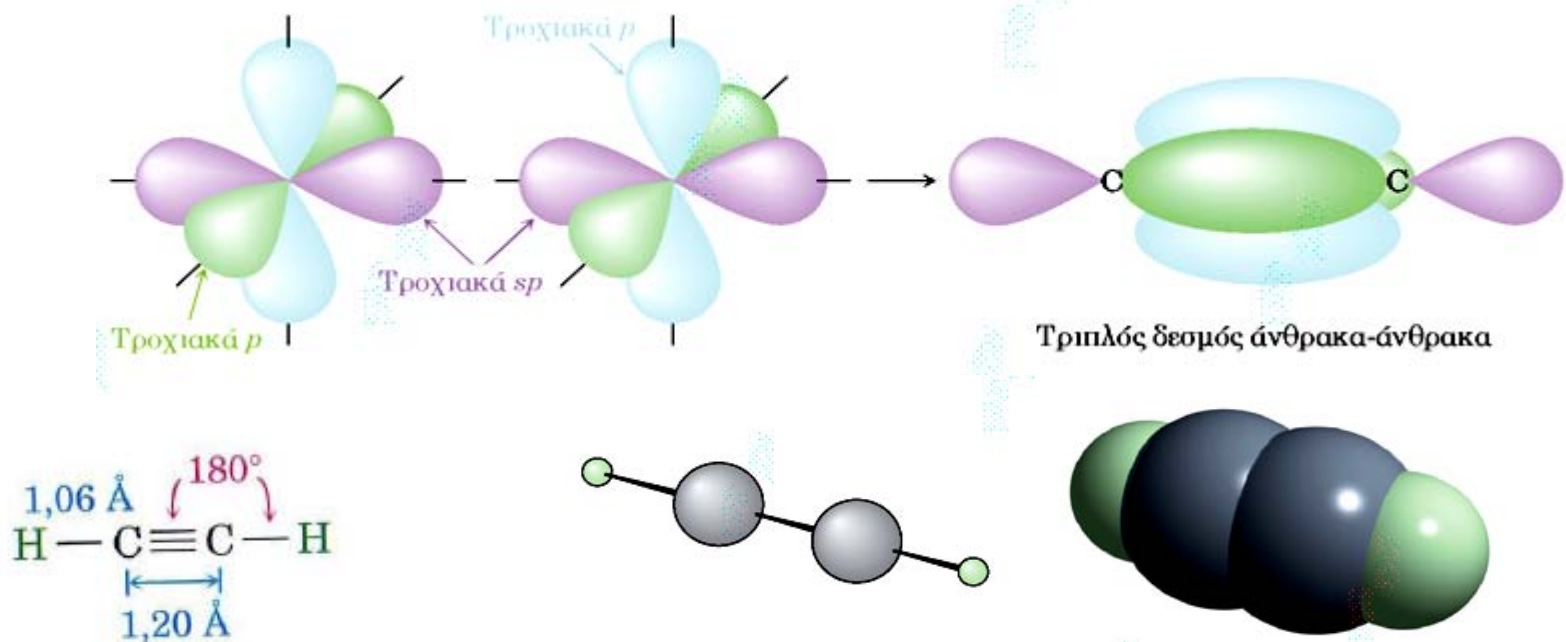
ΤΕΤΡΑΣΘΕΝΗΣ ΑΝΘΡΑΚΑΣ: ΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΟΥ C_2H_2

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ sp – τριπλός δεσμός



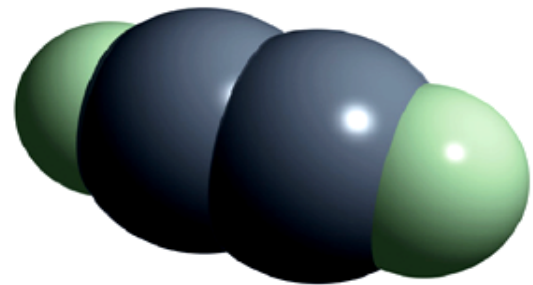
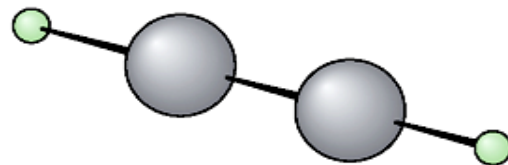
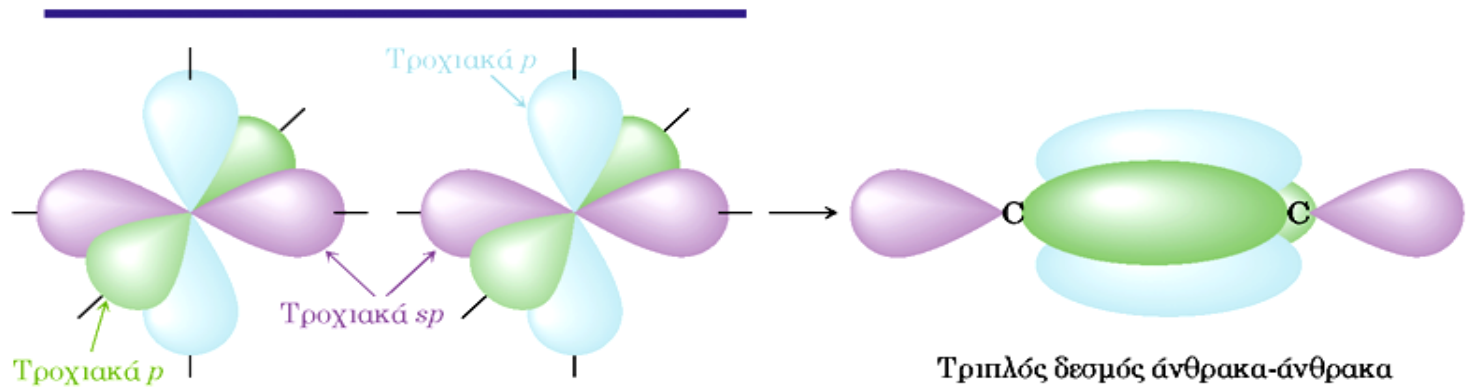
Ένα άτομο άνθρακα sp -υβριδισμένο. Τα δύο υβριδικά τροχιακά sp έχουν προσανατολισμό που διαφέρει κατά 180° , και είναι κάθετα διατεταγμένα στα δύο εναπομένοντα τροχιακά.

ΑΛΛΗΛΕΠΙΚΑΛΥΨΗ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ ΣΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΟΥ ΑΚΕΤΥΛΕΝΙΟΥ



Μη Ελεύθερη περιστροφή

Η δομή του ακετυλενίου. Τα δύο sp -υβριδισμένα άτομα άνθρακα συνδέονται με έναν σ δεσμό $sp-sp$ και δύο π δεσμούς από την αλληλεπικάλυψη $p-p$.



Σχήμα 1.21 Η δομή του ακετυλενίου. Τα δύο sp -υβριδισμένα άτομα άνθρακα συνδέονται με έναν σ δεσμό $sp-sp$ και δύο π δεσμούς από την αλληλεπικάλυψη $p-p$.

Μόριο	Δεσμός	Ισχύς δεσμού		Μήκος δεσμού (Å)
		(kJ/mol)	(kcal/mol)	
Μεθάνιο, CH ₄	C _{sp³} —H _{1s}	438	105	1,10
Αιθάνιο, CH ₃ CH ₃	C _{sp³} —C _{sp³}	376	90	1,54
	C _{sp³} —H _{1s}	420	100	1,10
Αιθυλένιο, H ₂ C=CH ₂	C _{sp²} =C _{sp²}	611	146	1,33
	C _{sp²} —H _{1s}	444	106	1,076
Ακετυλένιο, HC≡CH	C _{sp} ≡C _{sp}	835	200	1,20
	C _{sp} —H _{1s}	552	132	1,06

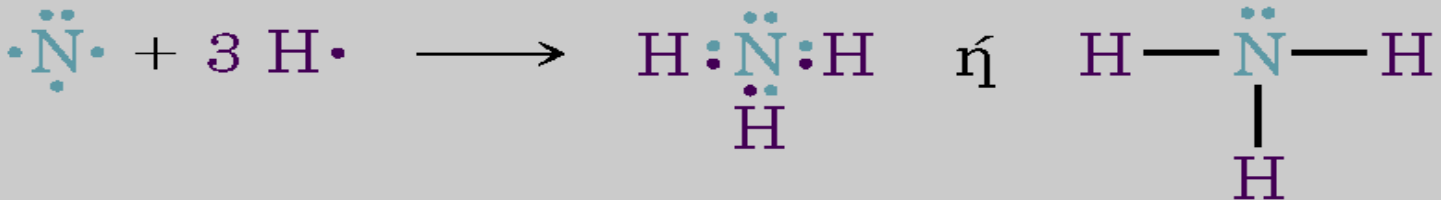
Η έννοια του υβριδισμού δεν περιορίζεται στις ενώσεις του άνθρακα

Ομοιοπολικοί δεσμοί που σχηματίζονται από άλλα στοιχεία του περιοδικού πίνακα μπορούν επίσης να περιγραφούν με υβριδικά τροχιακά

Το άτομο του αζώτου και το μόριο της αμμωνίας

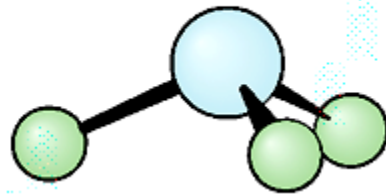
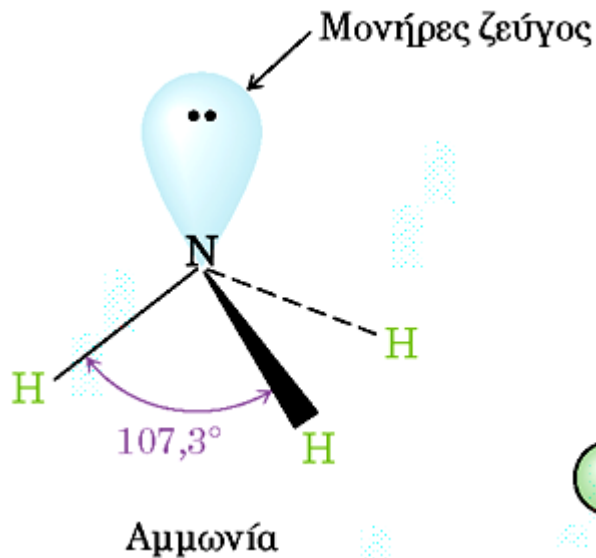
${}_{7}\text{N}: 1s^2 2s^2 2p^3$.

Ένα άτομο αζώτου έχει πέντε ηλεκτρόνια στην εξωτερική του στιβάδα. για να συμπληρώσει την οκτάδα των ηλεκτρονίων σθένους του, σχηματίζει τρεις ομοιοπολικούς δεσμούς



ΑΖΩΤΟ ΚΑΙ ΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΗΣ ΑΜΜΩΝΙΑΣ

Υβριδισμός sp^3



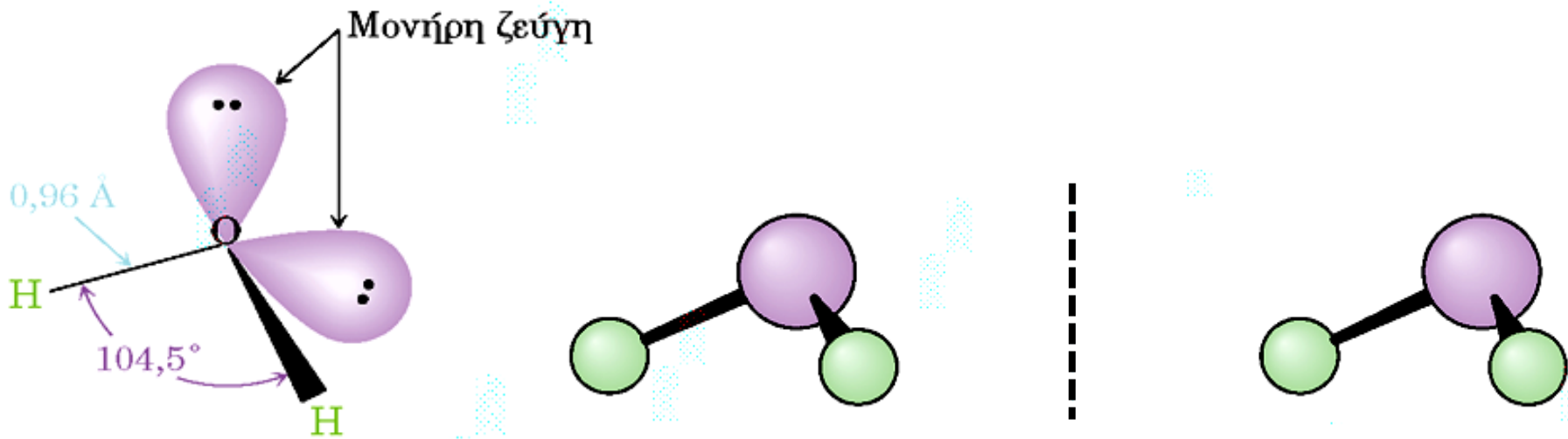
Υβριδισμός του αζώτου στην αμμωνία.

Το άτομο του αζώτου είναι sp^3 υβριδισμένο, με αποτέλεσμα οι γωνίες δεσμών H - N - H να είναι $107,3^\circ$

ΟΞΥΓΟΝΟ ΚΑΙ ΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΟΥ ΝΕΡΟΥ

Υβριδισμός sp^3

${}_8\text{O}:1s^22s^22p^4$. Το άτομο οξυγόνου στο νερό είναι sp^3 υβριδισμένο. Το άτομο του οξυγόνου έχει έξι ηλεκτρόνια στην εξωτερική του στιβάδα, σχηματίζει μόνον δύο ομοιοπολικούς δεσμούς και διαθέτει δύο μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων



Η δομή του νερού . Το άτομο του οξυγόνου είναι sp^3 υβριδισμένο και διαθέτει δύο μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων. Η γωνία δεσμού H-O-H είναι $104,5^\circ$.