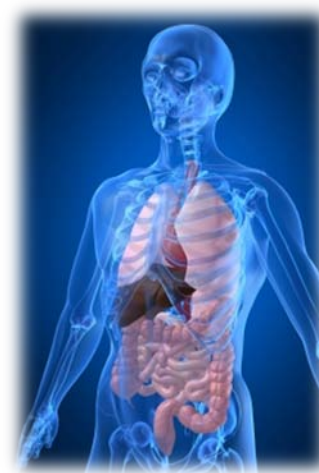




ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

6^η θεματική ενότητα: Αλκένια



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

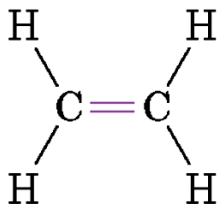


ΑΛΚΕΝΙΑ ΔΟΜΗ ΚΑΙ ΔΡΑΣΤΙΚΟΤΗΤΑ

Τα αλκένια (ολεφίνες) είναι υδρογονάνθρακες που περιέχουν έναν διπλό δεσμό άνθρακα-άνθρακα (C=C) και γενικό μοριακό τύπο C_vH_{2v}

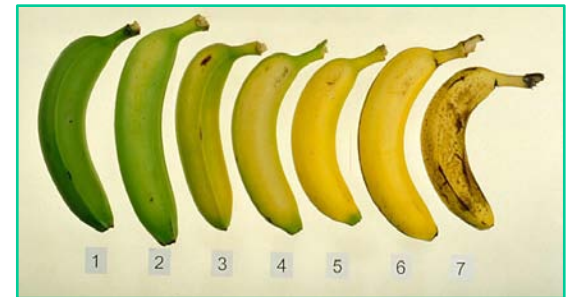
Τα αλκάνια αναφέρονται επίσης περιστασιακά και ως αλειφατικές ενώσεις, ονομασία που προέρχεται από την αρχαιοελληνική λέξη άλειφαρ, που σημαίνει λίπος.

Πολλά αλκένια παίζουν σπουδαίο βιολογικό ρόλο

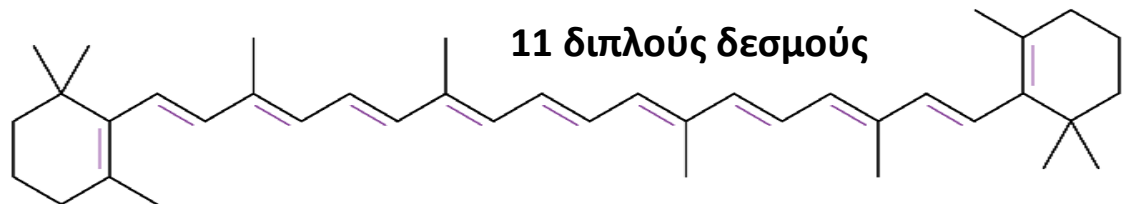


Αιθυλένιο

Το αιθυλένιο είναι μια φυτική ορμόνη που προξενεί την ωρίμανση των φρούτων



Το β-καροτένιο, που ευθύνεται για το πορτοκαλί χρώμα του καρότου, είναι μια ανεκτίμητη πηγή βιταμίνης A για τον ανθρώπινο οργανισμό, ενώ θεωρείται ότι παρέχει και κάποια προστασία έναντι ορισμένων μορφών καρκίνου.

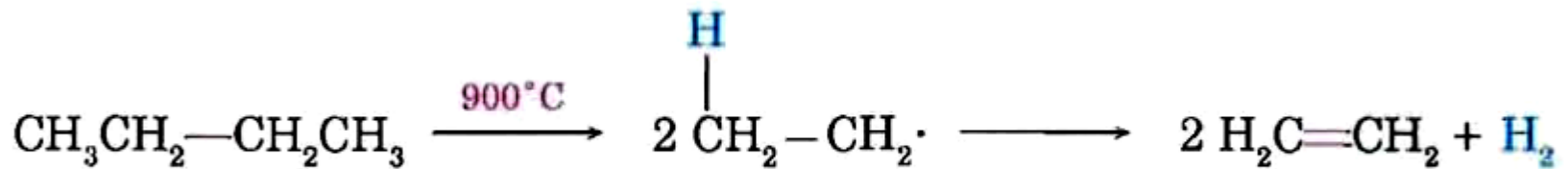


β-Καροτένιο

(πορτοκαλόχρωμη πρόδρομη ουσία της βιταμίνης A)

ΑΛΚΕΝΙΑ ΣΤΗ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑ ΠΛΑΣΤΙΚΩΝ –ΥΛΙΚΑ ΣΥΣΚΕΥΑΣΙΑΣ

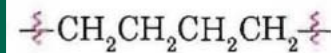
Παραγωγή αθυλενίου (αιθενίου) με πυρόλυση



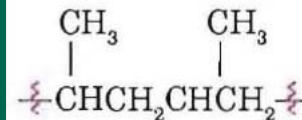
Αλκάνια φυσικού αερίου

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$$

$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$ Αιθυλένιο (ετήσια παραγωγή 24 δισεκατομμύρια kg)	{	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$	Αιθανόλη
		CH_3CHO	Ακεταλδεϋδη
		CH_3COOH	Οξικό οξύ
		$\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagdown \quad / \\ \text{CH}_2\text{CH}_2 \end{array}$	Αιθυλενοξειδίο
		$\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	Αιθυλενογλυκόλη
		$\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$	Αιθυλενοδιχλωρίδιο
		$\text{H}_2\text{C}=\text{CHCl}$	Βινυλοχλωρίδιο
		$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{O}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}\text{CH}_3$	Οξικό βινύλιο
	{	$\text{—CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{—}$	Πολυαιθυλένιο



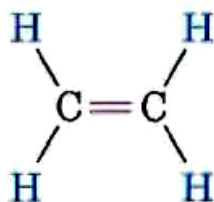
Πολυαιθυλένιο



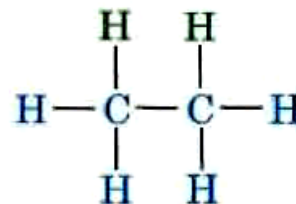
Πολυπροπυλένιο

ΑΚΟΡΕΣΤΟΤΗΤΑ

Λόγω του διπλού δεσμού ένα αλκένιο (C_nH_{2n}) αναφέρεται ως ακόρεστο καθώς διαθέτει λιγότερα υδρογόνα από ένα αλκάνιο (C_nH_{2n+2}) που έχει ισάριθμους άνθρακες και καλείται κορεσμένο



Αιθυλένιο: C_2H_4



Αιθάνιο: C_2H_6

(λιγότερα υδρογόνα - ακόρεστο) (περισσότερα υδρογόνα - κορεσμένο)

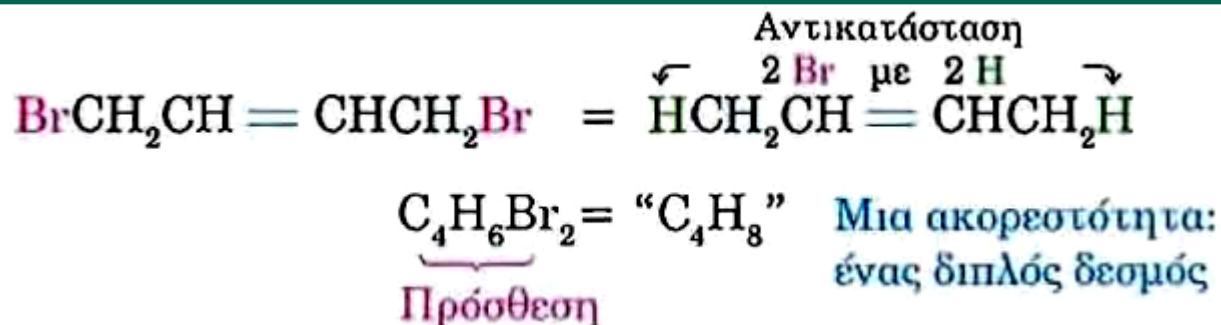
Κάθε δακτύλιος σε ένα μόριο αντιστοιχεί όπως και ο διπλός δεσμός σε απώλεια δύο υδρογόνων από τον γενικό τύπο των αλκανίων C_nH_{2n+2}

Η ύπαρξη πολλαπλών δεσμών και δακτυλίων καθορίζει το βαθμό ακορεστότητας ενός μορίου

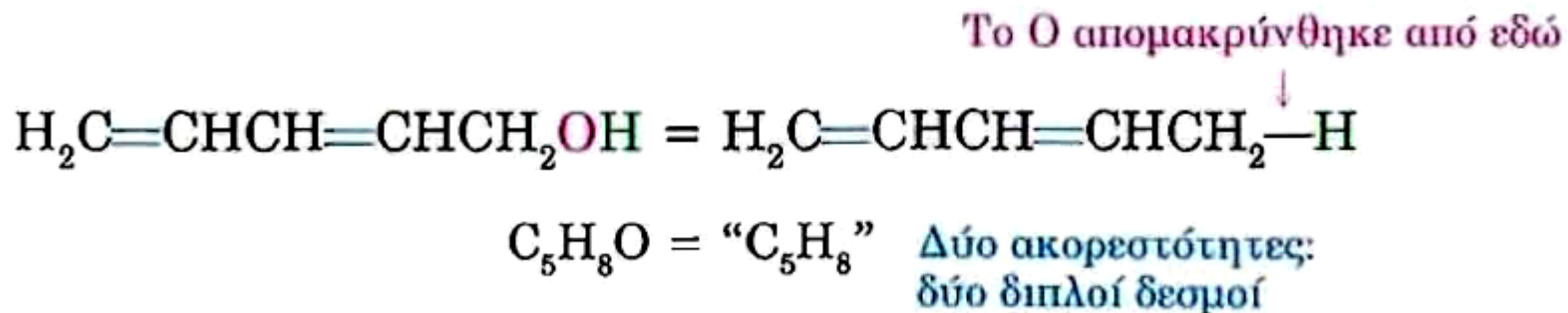
ΑΚΟΡΕΣΤΟΤΗΤΑ

Ενώσεων που περιέχουν και άλλα στοιχεία εκτός C, H

Οργανοαλογονούχες ενώσεις:
Περιέχουν C, H, X, όπου X = F, Cl, Br, ή I.
Τα αλογόνα προσμετρούνται ως υδροδόνα (μονοσθενή)



Οργανοοξυγονούχες ενώσεις:
Περιέχουν C, H, O.
Τα οξυγόνα αγνοούνται (δισθενές)

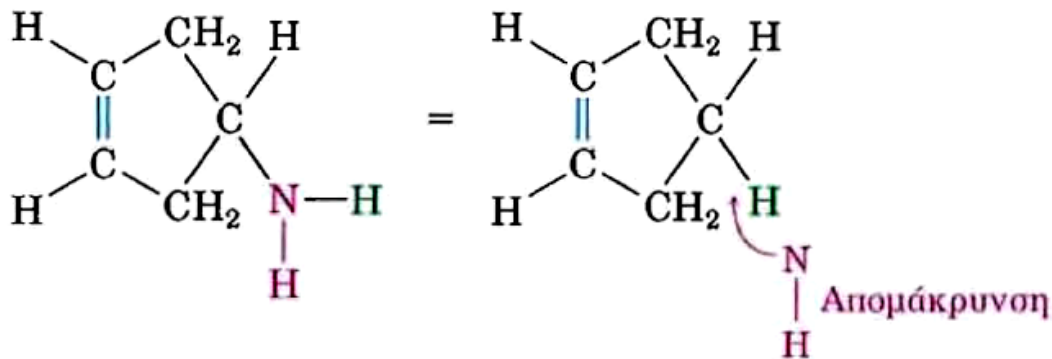


ΑΚΟΡΕΣΤΟΤΗΤΑ

Ενώσεων που περιέχουν και άλλα στοιχεία εκτός C, H

Οργανοαζωτούχες ενώσεις:
Περιέχουν C, H, N.

Αφαιρούμε τον αριθμό των αζώτων από τον αριθμό των υδρογόνων.
Μια οργανική ένωση που περιέχει άζωτο διαθέτει ένα υδρογόνο
περισσότερο από τον αντίστοιχο υδρογονάνθρακα (τρισθενές)



$C_5H_9N = "C_5H_8"$ Δύο ακορεστότητες: ένας δακτύλιος
και ένας διπλός δεσμός

ΑΚΟΡΕΣΤΟΤΗΤΑ

Ενώσεων που περιέχουν και άλλα στοιχεία εκτός C, H

Προσθέτουμε τον αριθμό των αλογόνων στον αριθμό των υδρογόνων.

Αγνοούμε τον αριθμό των οξυγόνων.

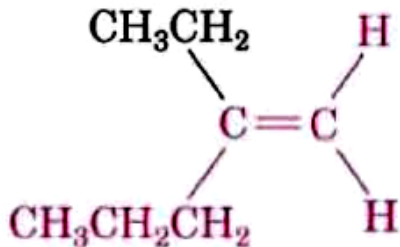
Αφαιρούμε τον αριθμό των αζώτων από τον αριθμό των υδρογόνων.

ΟΝΟΜΑΤΟΛΟΓΙΑ ΑΛΚΕΝΙΩΝ

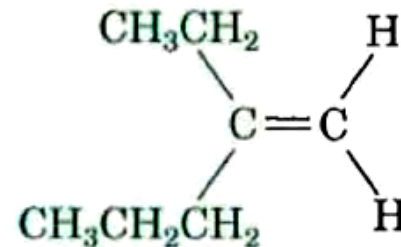
Τα αλκένια ονοματίζονται με βάση μια σειρά κανόνων παρόμοιων με εκείνους που αναπτύχθηκαν για τα αλκάνια

Για τον προσδιορισμό της ομόλογης σειράς χρησιμοποιείται η κατάληξη: **-ένιο**

1) Ονοματίζουμε τον βασικό υδρογονάνθρακα. Βρίσκουμε τη μακρύτερη ανθρακική αλυσίδα που περιέχει τον διπλό δεσμό και ονοματίζουμε την ένωση, χρησιμοποιώντας την κατάληξη **-ένιο** :



Ονοματίζεται ως πεντένιο

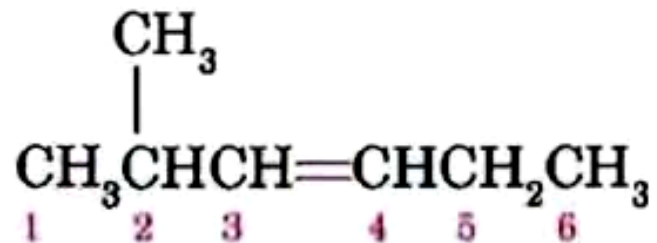
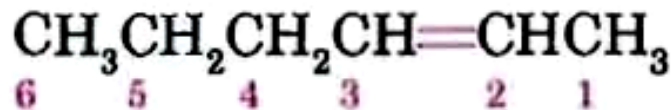


ΟΧΙ ως εξένιο, δεδομένου ότι ο διπλός δεσμός δεν περιλαμβάνεται στην αλυσίδα των έξι ανθράκων

ΟΝΟΜΑΤΟΛΟΓΙΑ ΑΛΚΕΝΙΩΝ

2. Αριθμούμε τα άτομα του άνθρακα στην αλυσίδα, αρχίζοντας από το πλησιέστερο άκρο προς τον διπλό δεσμό.

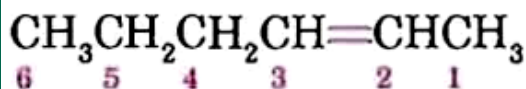
Εάν ο διπλός δεσμός απέχει εξίσου από τα δύο άκρα, αρχίζουμε από το άκρο που είναι πλησιέστερα στο πρώτο σημείο διακλάδωσης. Αυτός ο κανόνας εξασφαλίζει ότι οι άνθρακες του διπλού δεσμού αποκτούν τους μικρότερους δυνατούς αριθμούς



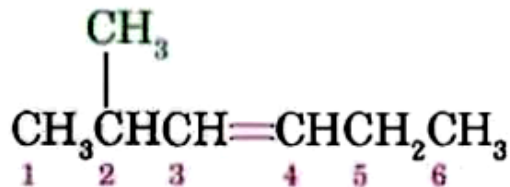
ΟΝΟΜΑΤΟΛΟΓΙΑ ΑΛΚΕΝΙΩΝ

3. Γράφουμε την πλήρη ονομασία, αριθμώντας τους υποκαταστάτες ανάλογα με τη θέση τους στην αλυσίδα και την αλφαβητική τους προτεραιότητα.

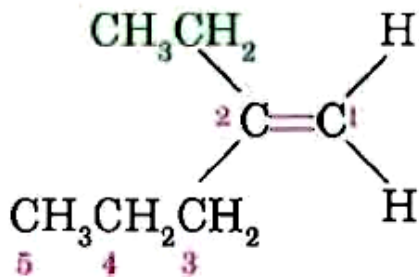
Υποδεικνύουμε τη θέση του διπλού δεσμού, δηλώνοντας τον αριθμό του πρώτου αλκενικού (ολεφινικού) άνθρακα. Εάν υπάρχουν περισσότεροι διπλοί δεσμοί, υποδεικνύουμε τη θέση του καθενός και χρησιμοποιούμε μια από τις καταλήξεις -διένιο, -τριένιο, και ούτω καθεξής.



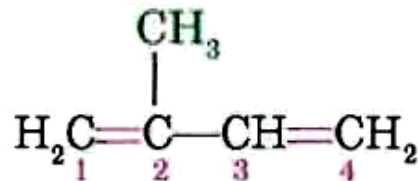
2-Εξένιο



2-Μεθυλο-3-εξένιο



2-Αιθυλο-1-πεντένιο



2-Μεθυλο-1,3-βουταδιένιο

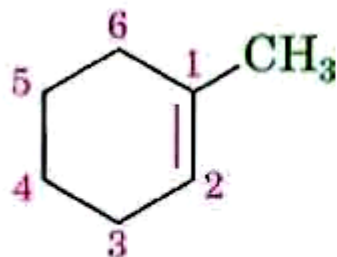
ΟΝΟΜΑΤΟΛΟΓΙΑ ΚΥΚΛΟΑΛΚΕΝΙΩΝ

Τα κυκλοαλκένια ονοματίζονται με παρόμοιο τρόπο. Επειδή δεν υπάρχει άκρο της αλυσίδας ώστε να αρχίσει η αρίθμηση, αριθμούμε το κυκλοαλκένιο έτσι ώστε:

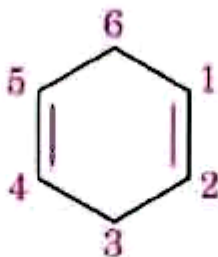
(α) ο διπλός δεσμός να βρίσκεται μεταξύ των C_1 και C_2 και

(β) ο πρώτος υποκαταστάτης να έχει όσο το δυνατόν μικρότερη αρίθμηση.

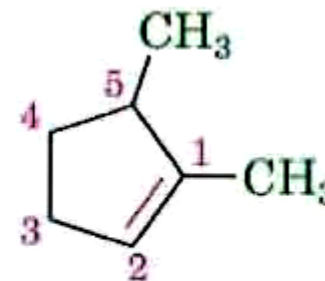
**Δεν είναι απαραίτητο να συμπεριληφθεί η θέση του διπλού δεσμού στην ονομασία, διότι βρίσκεται πάντοτε μεταξύ C_1 και C_2 .*



1-Μεθυλοκυκλοεξένιο



1,4-Κυκλοεξαδιένιο

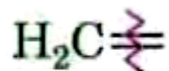


1,5-Διμεθυλοκυκλοπεντένιο

ΕΜΠΕΙΡΙΚΕΣ ΟΝΟΜΑΣΙΕΣ

<i>Ένωση</i>	<i>Συστηματική ονομασία</i>	<i>Εμπειρική ονομασία</i>
$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$	Αιθένιο	Αιθυλένιο
$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}_2$	Προπένιο	Προπυλένιο
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{C}=\text{CH}_2 \end{array}$	2-Μεθυλοπροπένιο	Ισοβουτυλένιο
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_2\text{C}=\text{C}-\text{CH}=\text{CH}_2 \end{array}$	2-Μεθυλο-1,3-βουταδιένιο	Ισοπρένιο
$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}=\text{CH}_2$	1,3-Πενταδιένιο	Πιπερυλένιο

* Τόσο οι εμπειρικές όσο και οι συστηματικές ονομασίες αναγνωρίζονται από την IUPAC.



Μεθυλενική ομάδα

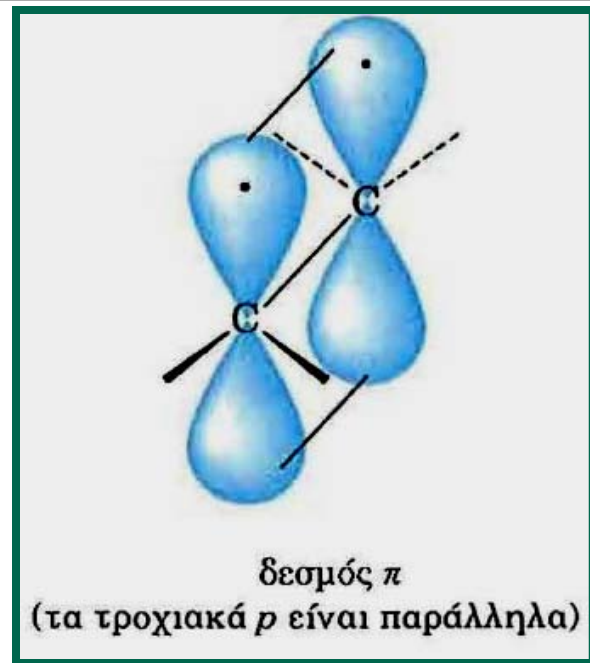
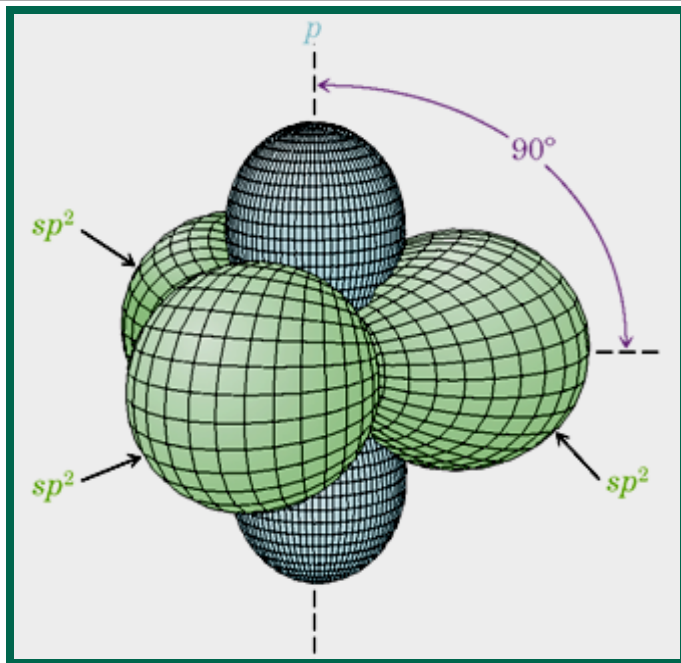


Βίνυλο ομάδα



Άλλυλο ομάδα

ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ ΑΛΚΕΝΙΩΝ

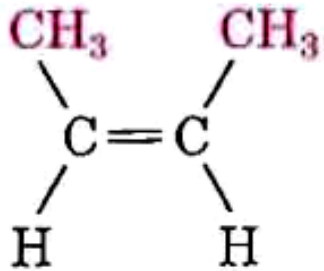


Ισχύς δεσμού $C=C$ στο αιθυλένιο ($\sigma + \pi$)	611 kJ/mol (146 kcal/mol)
Ισχύς δεσμού $C-C$ στο αιθάνιο (μόνον σ)	376 kJ/mol (90 kcal/mol)
Διαφορά (μόνον ο δεσμός π)	235 kJ/mol (56 kcal/mol)

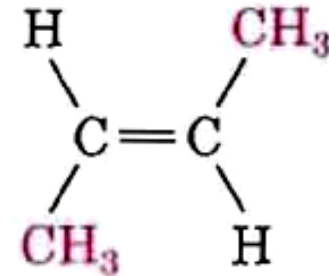
ΙΣΟΜΕΡΕΙΑ cis-trans

Διυποκατεστημένα αλκένια

Δύο υποκαταστάτες διαφορετικοί από υδρογόνα συνδέονται με του άνθρακες του διπλού δεσμού



***cis*-2-Βουτένιο**

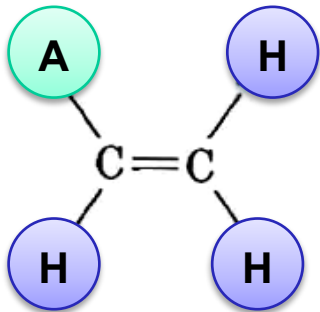


***trans*-2-Βουτένιο**

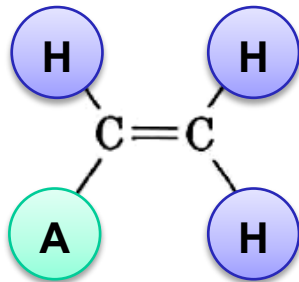
Δεν μπορεί να λάβει χώρα περιστροφή ⇒ δεν αλληλομετατρέπονται αυθόρμητα
Πρόκειται για διακριτές, απομονώσιμες ενώσεις: *cis-trans* στερεοϊσομερή

Η ισομέρεια *cis-trans* δεν περιορίζεται σε διυποκατεστημένα αλκένια.
Μπορεί να λάβει χώρα σε κάθε περίπτωση που οι δύο άνθρακες του διπλού δεσμού είναι συνδεδεμένοι με δύο διαφορετικές ομάδες.

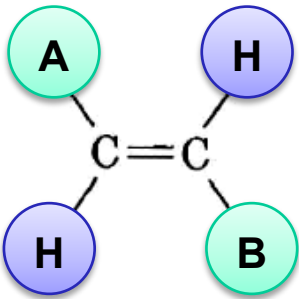
ΙΣΟΜΕΡΕΙΑ cis-trans



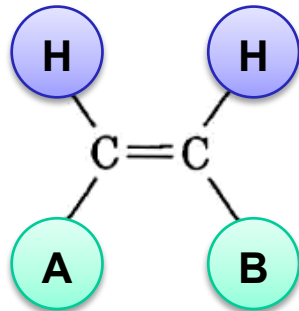
=



Αυτές οι δύο ενώσεις είναι ταυτόσημες.
Δεν αποτελούν cis-trans ισομερή.



≠



Αυτές οι δύο ενώσεις δεν είναι ταυτόσημες.
Πρόκειται για cis-trans ισομερή.

Ενώσεις που έχουν τον έναν από τους άνθρακες του διπλού δεσμού συνδεδεμένο με δύο ταυτόσημες ομάδες δεν μπορούν να υπάρξουν ως *cis-trans* ισομερή.

ΤΡΙ- ΚΑΙ ΤΕΤΡΑ-ΥΠΟΚΑΤΕΣΤΗΜΕΝΟΙ ΔΙΠΛΟΙ ΔΕΣΜΟΙ

Τριυποκατεστημένοι διπλοί δεσμοί:

τρεις υποκαταστάτες, διαφορετικοί από το υδρογόνο, συνδέονται με τους άνθρακες του διπλού δεσμού

Τετραϋποκατεστημένοι διπλοί δεσμοί: τέσσερις υποκαταστάτες, διαφορετικοί από το υδρογόνο, συνδέονται με τους άνθρακες του διπλού δεσμού



Συμβολισμός E, Z

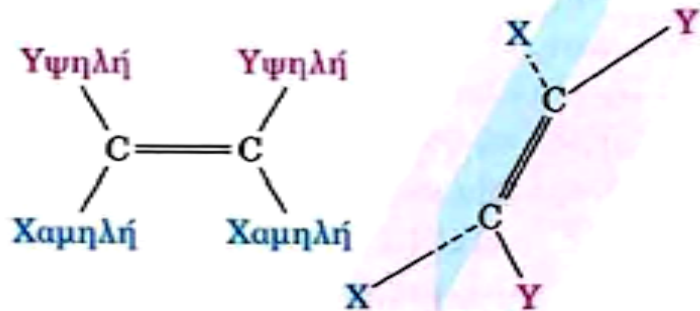


ΚΑΝΟΝΕΣ ΠΡΟΤΕΡΑΙΟΤΗΤΑΣ (C διπλού δεσμού)

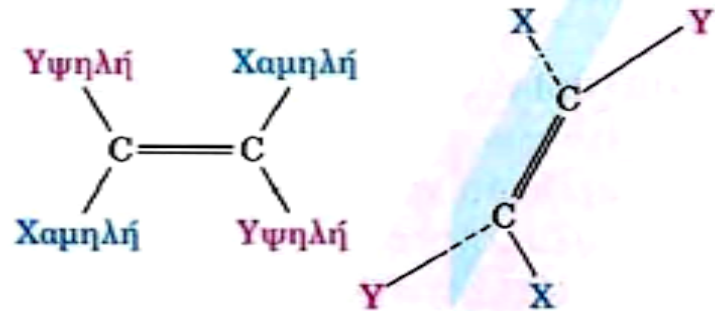
ΣΥΜΒΟΛΙΣΜΟΣ E,Z

Εάν οι ομάδες υψηλής προτεραιότητας του κάθε άνθρακα βρίσκονται προς την ίδια πλευρά του διπλού δεσμού, το αλκένιο ορίζεται ως **Z** (από τη γερμανική λέξη *Zusammen*, μαζί).

Εάν οι ομάδες υψηλής προτεραιότητας βρίσκονται σε αντίθετες πλευρές, το αλκένιο ορίζεται ως **E** (από τη γερμανική λέξη *entgegen*, αντίθετα).



Διπλός δεσμός Z

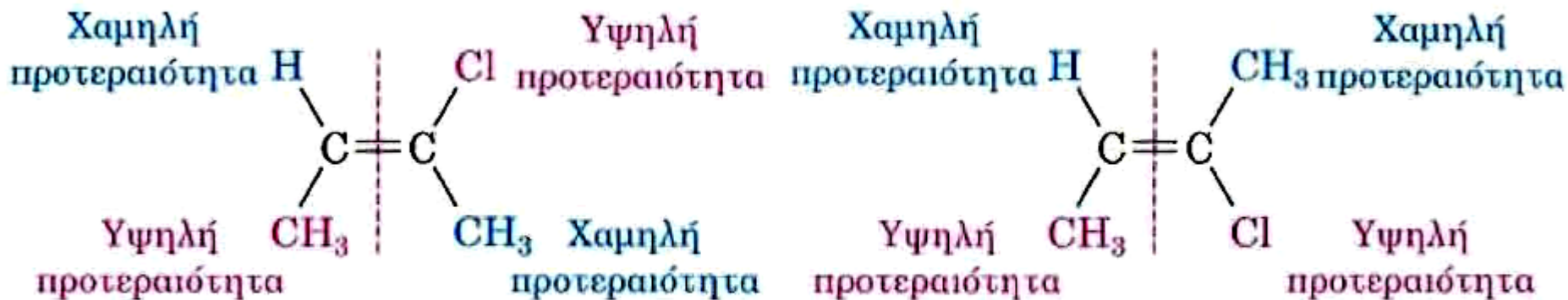
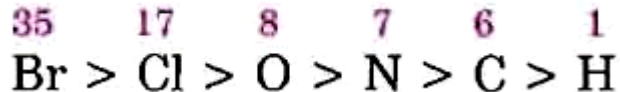


Διπλός δεσμός E

Κανόνες προτεραιότητας (Cahn Ingold - Prelog)

Κανόνας προτεραιότητας 1

Ένα άτομο με μεγαλύτερο ατομικό αριθμό έχει υψηλότερη προτεραιότητα από ένα άτομο με μικρότερο ατομικό αριθμό πάνω στον ίδιο άνθρακα



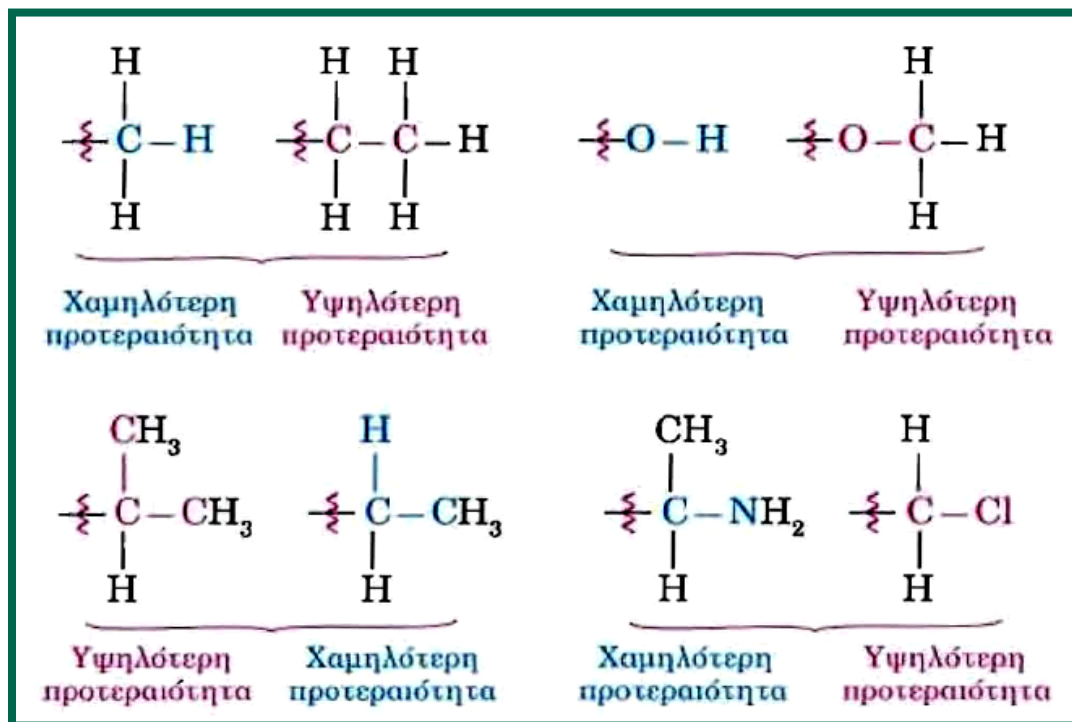
(α) (*E*)-2-Χλωρο-2-βουτένιο

(β) (*Z*)-2-Χλωρο-2-βουτένιο

Κανόνες προτεραιότητας (Cahn Ingold - Prelog)

Κανόνας προτεραιότητας 2

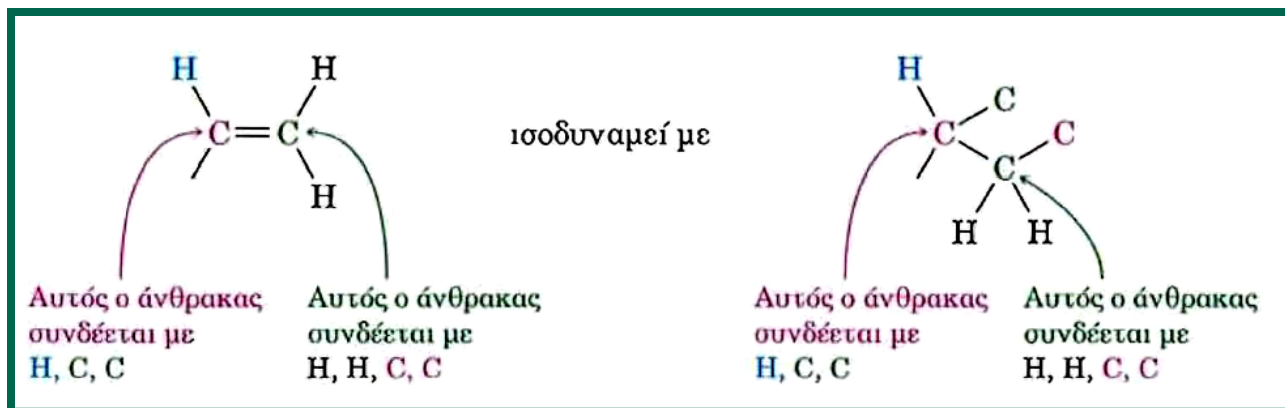
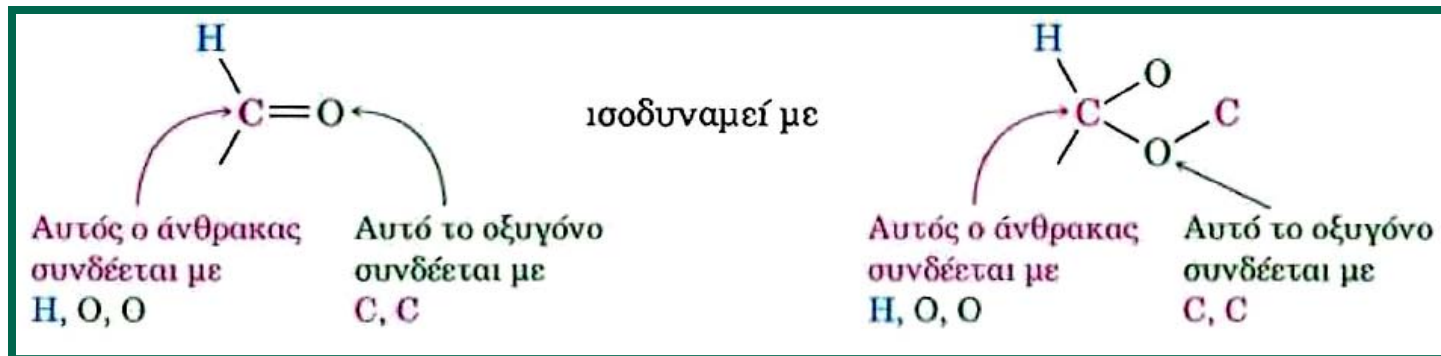
Εάν δεν μπορεί να ληφθεί απόφαση κατατάσσοντας τα πρώτα άτομα των υποκαταστατών, εξετάστε τα δεύτερα, τρίτα ή τέταρτα άτομα μακριά από τους άνθρακες του διπλού δεσμού, μέχρι να εντοπισθεί η πρώτη διαφορά



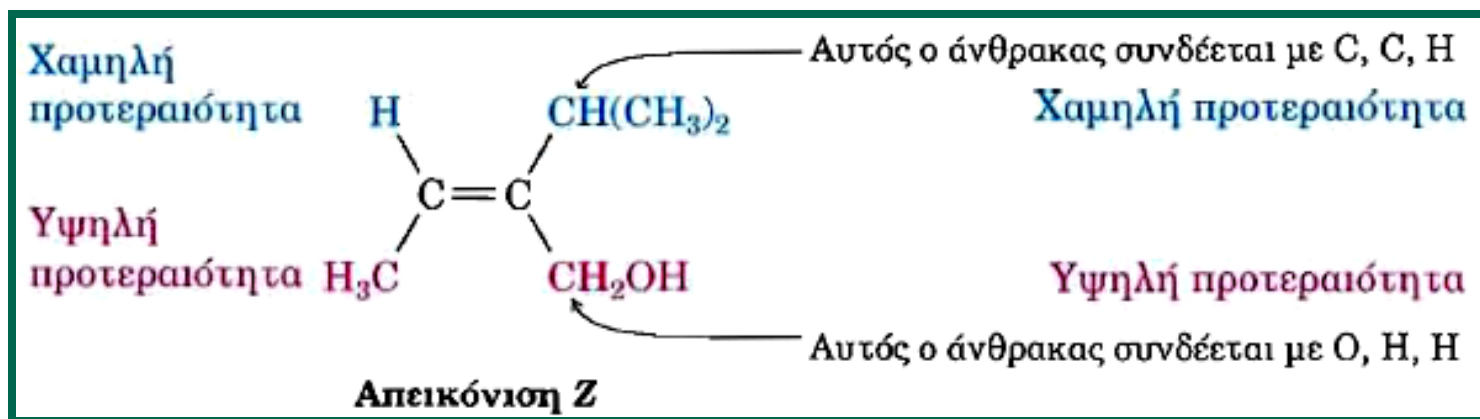
Κανόνες προτεραιότητας (Cahn Ingold - Prelog)

Κανόνας προτεραιότητας 3

Άτομα συνδεδεμένα με πολλαπλούς δεσμούς είναι ισοδύναμα με ίσο αριθμό ατόμων συνδεδεμένων με απλούς δεσμούς.



Προσδιορίστε την απεικόνιση του διπλού δεσμού ως E ή Z



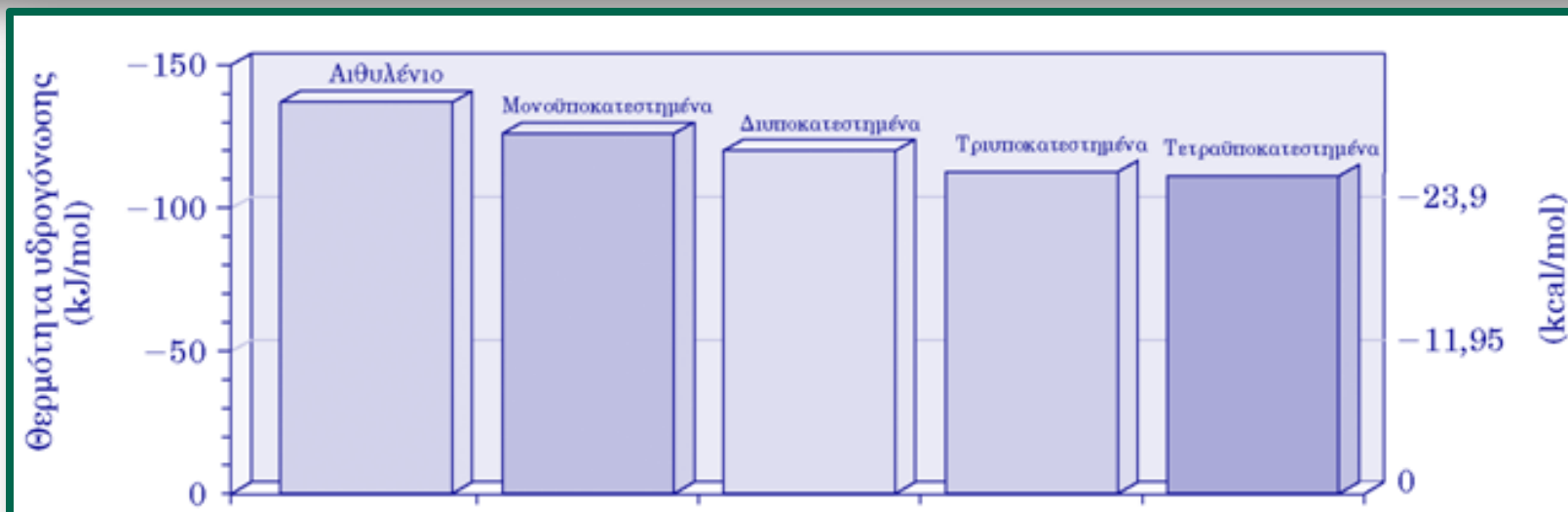
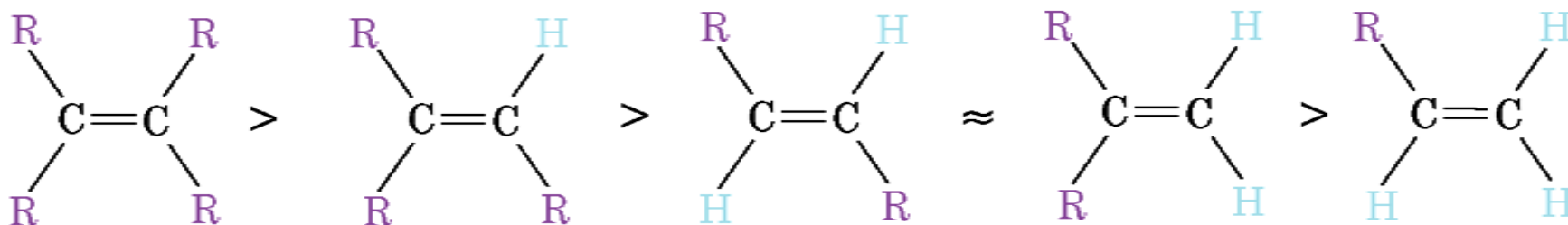
Εξετάστε τους άνθρακες του διπλού δεσμού χωριστά.

- 1) Ο αριστερός άνθρακας έχει δύο υποκαταστάτες, -H και -CH₃, από τους οποίους το -CH₃ έχει υψηλότερη προτεραιότητα σύμφωνα με τον κανόνα προτεραιότητας 1.
- 2) Ο άνθρακας που βρίσκεται στα δεξιά έχει επίσης δύο υποκαταστάτες, -CH(CH₃)₂ και -CHOH, οι οποίοι είναι ισοδύναμοι σύμφωνα με τον κανόνα προτεραιότητας 1. Με τον Κανόνα 2, όμως, ο -CHOH λαμβάνει υψηλότερη προτεραιότητα από τον -CH(CH₃)₂.

Οι δύο υψηλότερης προτεραιότητας ομάδες βρίσκονται στην ίδια πλευρά του διπλού δεσμού και επομένως προσδιορίζουμε την απεικόνιση ως Z .

ΣΤΑΘΕΡΟΤΗΤΑ ΠΟΛΥΠΟΚΑΤΕΣΤΗΜΕΝΩΝ ΑΛΚΕΝΙΩΝ

Τετραϋποκατεστημένα > Τριποκατεστημένα > Διποκατεστημένα > Μονοϋποκατεστημένα



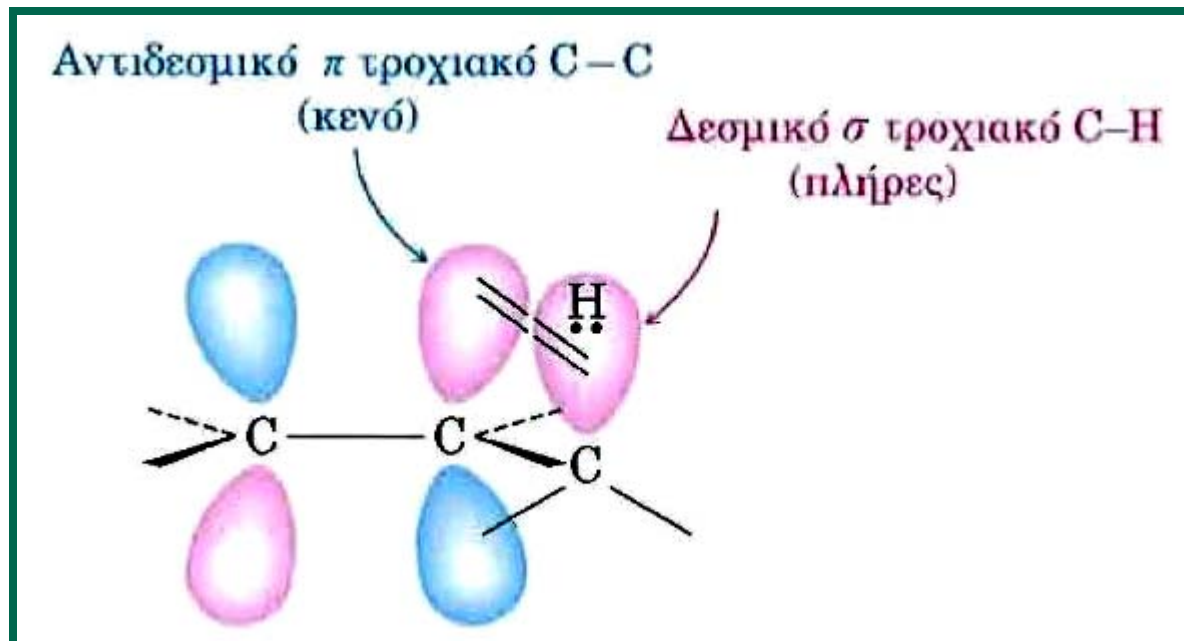
Η σταθερότητα των αλκενίων αυξάνεται αυξανόμενης της υποκατάστασης

ΥΠΕΡΣΥΖΙΓΙΑΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ

Σταθερότητα υποκατεστημένων αλκενίων

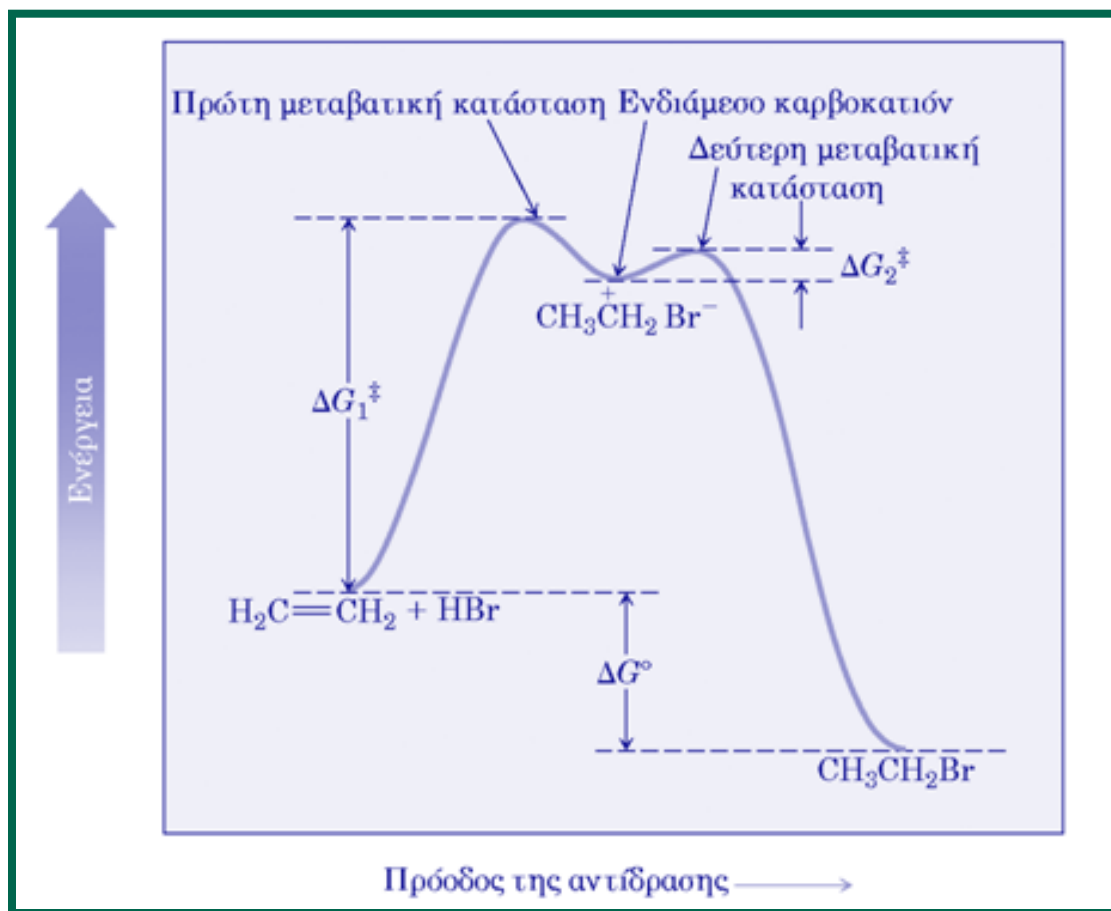
Υπερσυζυγιακό φαινόμενο

Ένα σταθεροποιητικό φαινόμενο που οφείλεται στην αλληλεπίδραση που ασκείται ανάμεσα στο κενό αντιδεσμικό τροχιακό του π δεσμού $C=C$ και σε ένα πλήρες τροχιακό του σ δεσμού $C-H$ ενός γειτονικού υποκαταστάτη.



ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΙΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΟΦΙΛΗΣ ΠΡΟΣΘΗΚΗΣ ΑΛΚΕΝΙΩΝ

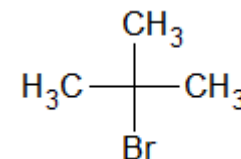
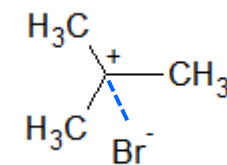
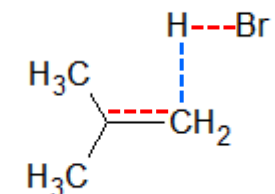
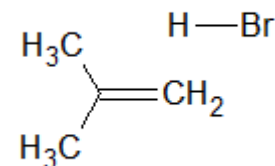
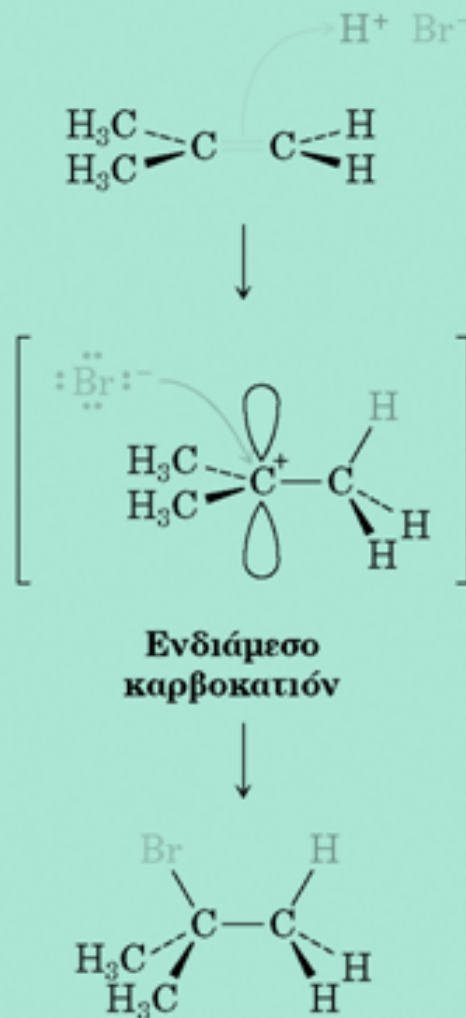
Τα αλκένια συμπεριφέρονται στις πολικές αντιδράσεις ως πυρηνόφιλα (βάσεις κατά Lewis)



ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΙΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΟΦΙΛΗΣ ΠΡΟΣΘΗΚΗΣ ΑΛΚΕΝΙΩΝ

Το ηλεκτρονιόφιλο H^+ προσβάλλεται από τα π ηλεκτρόνια του διπλού δεσμού, οπότε σχηματίζεται ένας νέος σ δεσμός $C-H$. Το γεγονός αυτό προσδίδει στο άλλο άτομο του άνθρακα ένα $+$ φορτίο και ένα κενό p τροχιακό.

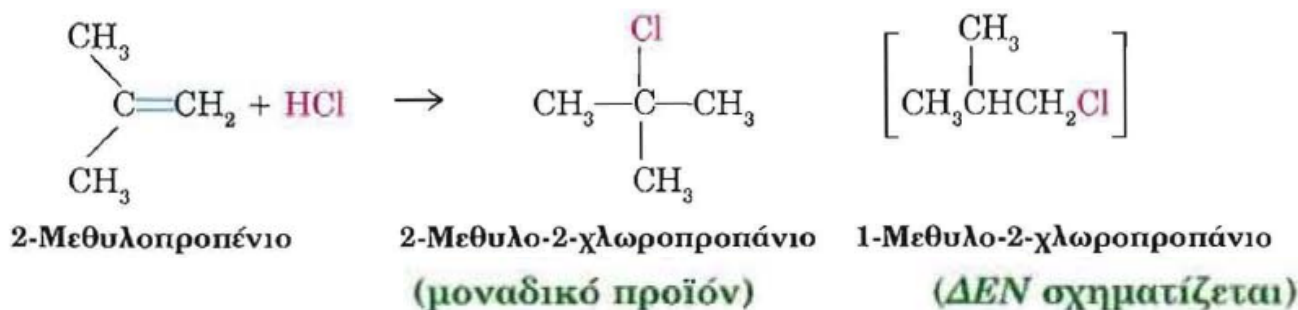
Το Br^- προσφέρει ένα ζεύγος ηλεκτρονίων στο θετικά φορτισμένο άτομο του άνθρακα, σχηματίζοντας έναν σ δεσμό $C-Br$ και ένα ουδέτερο προϊόν προσθήκης.



ΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΜΟΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΟΦΙΛΗΣ ΠΡΟΣΘΗΚΗΣ

Τοποειδικές (regiospecific) αντιδράσεις:

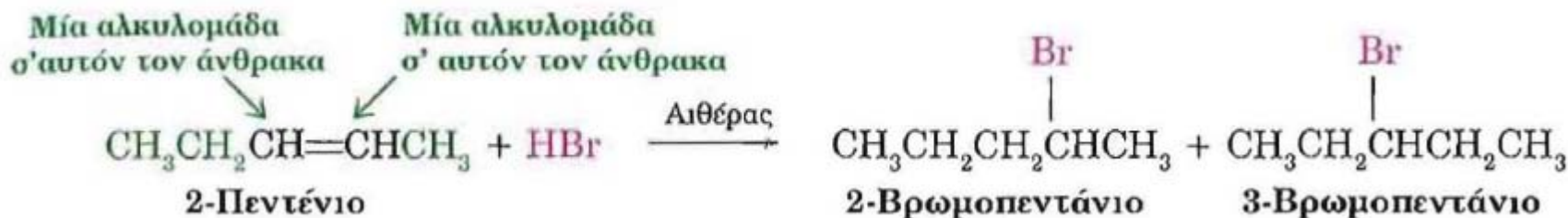
Αντιδράσεις προσθήκης στις οποίες ακολουθείται μόνον η μία από τις πιθανές κατευθύνσεις της προσθήκης



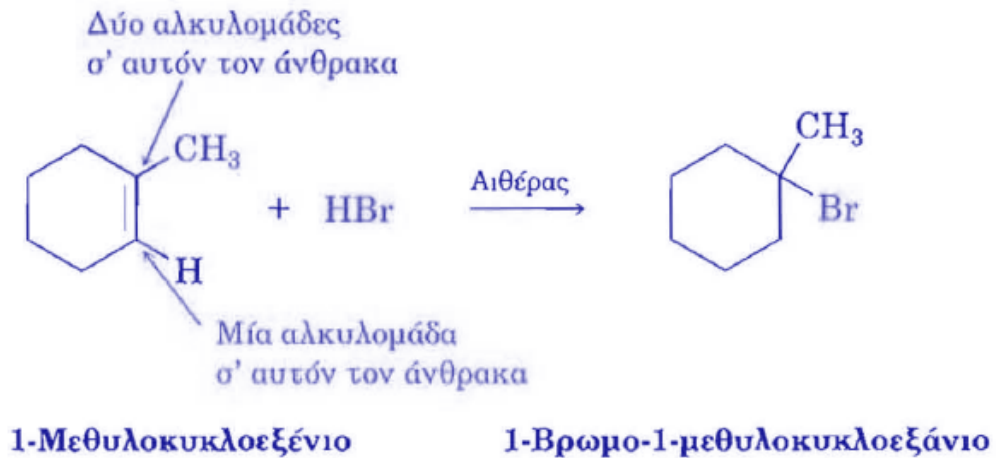
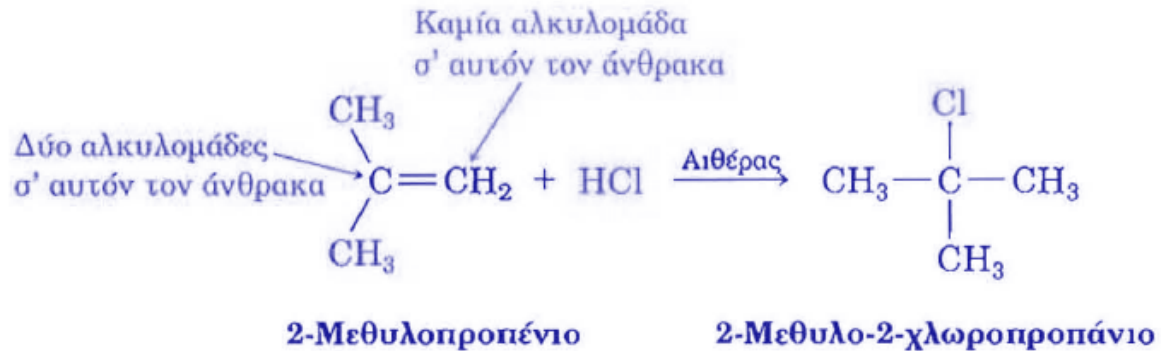
Κανόνας του Μαρκόβνικοβ:

Κατά την προσθήκη HX σε ένα αλκένιο, το H συνδέεται με τον λιγότερο αλκυλοποκατεστημένο άνθρακα, ενώ το X συνδέεται με τον περισσότερο αλκυλοποκατεστημένο άνθρακα.

Όταν και τα δύο άκρα του διπλού δεσμού έχουν τον ίδιο βαθμό υποκατάστασης, τότε σχηματίζεται μίγμα προϊόντων



ΚΑΝΟΝΑΣ ΤΟΥ Μαρκόβνικοβ



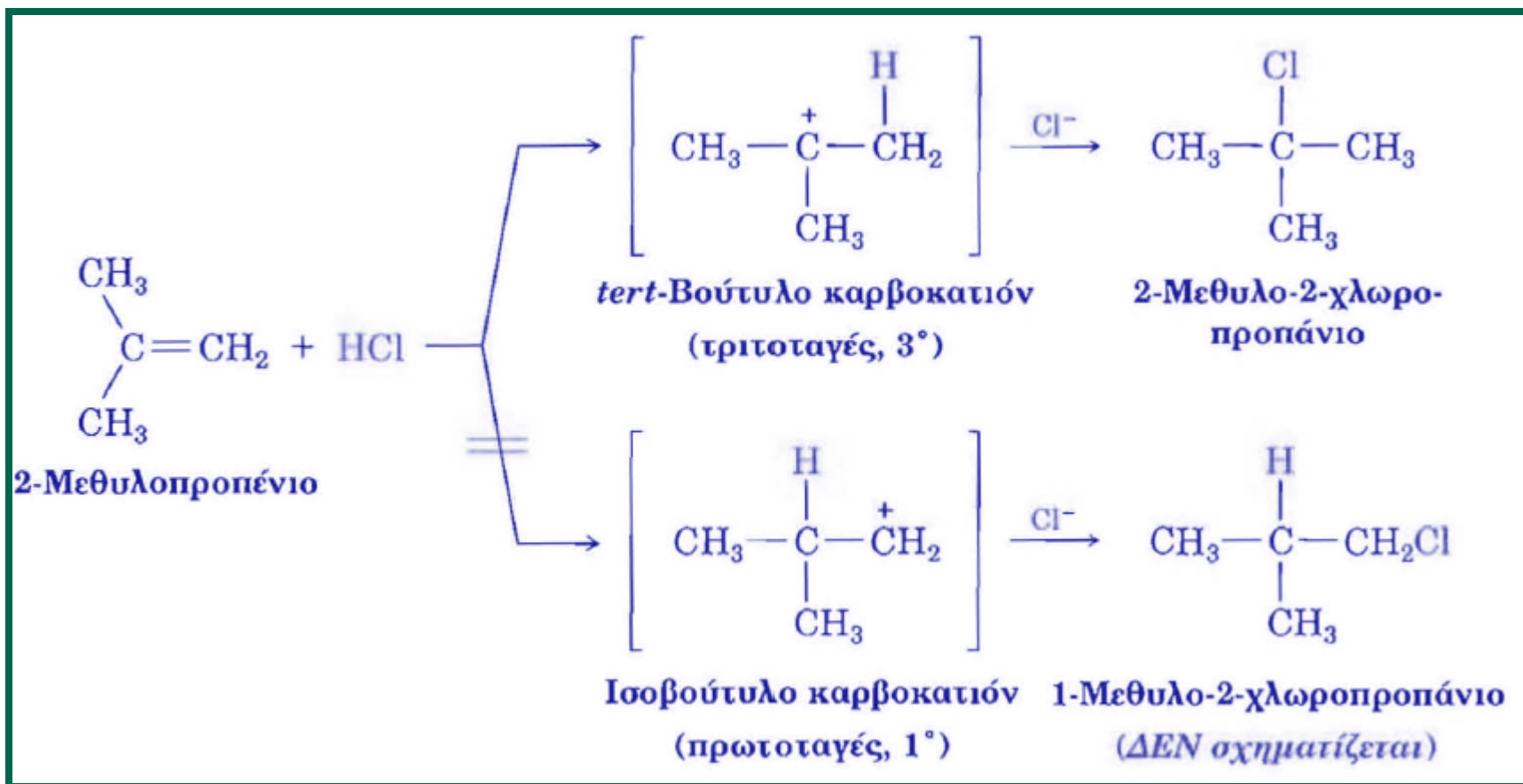
ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΟΦΙΛΗΣ ΠΡΟΣΘΗΚΗΣ

Κανόνας του Μαρκόβνικοβ

Κατά την προσθήκη ΗΧ σε ένα αλκένιο, σχηματίζεται ως ενδιάμεσο το περισσότερο υποκατεστημένο καρβοκατιόν, παρά το λιγότερο υποκατεστημένο

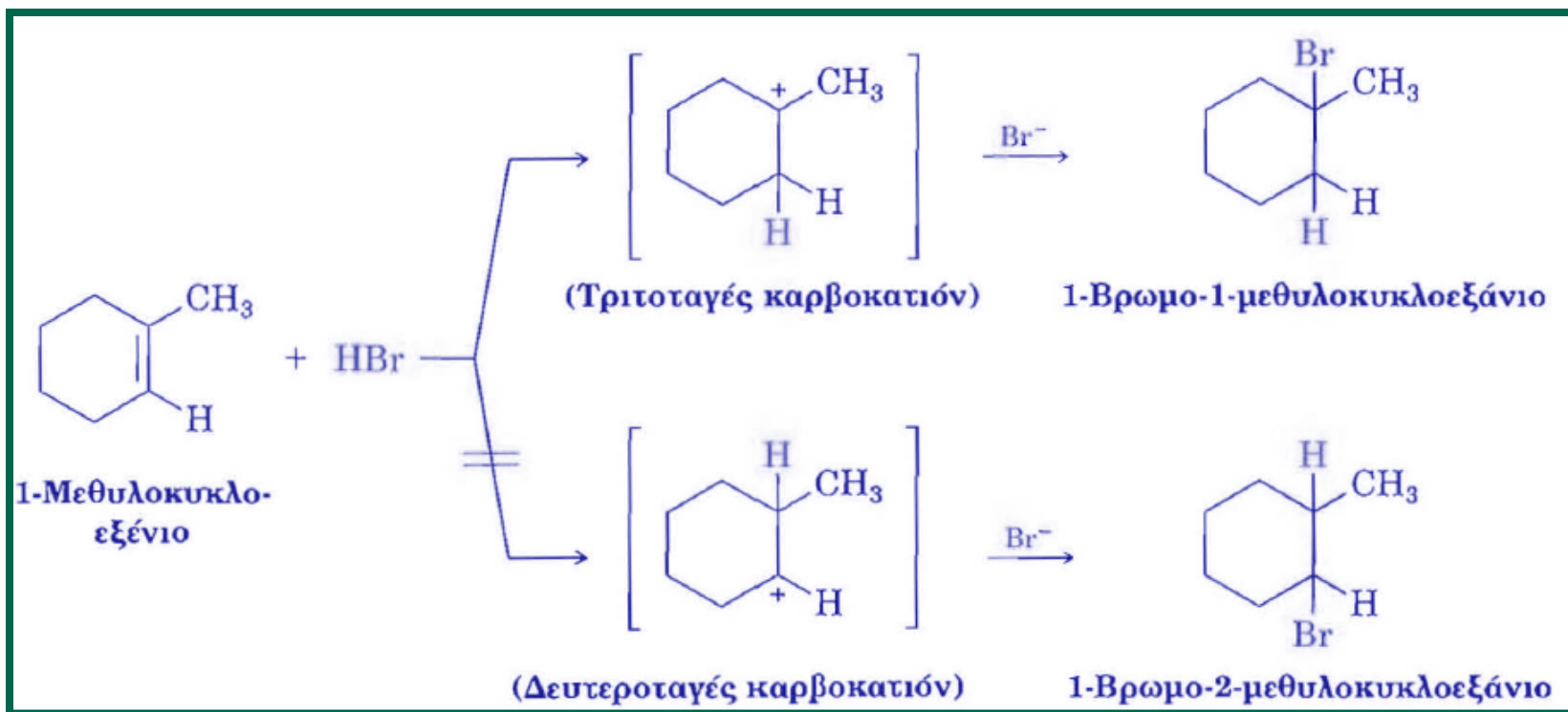
ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΟΦΙΛΗΣ ΠΡΟΣΘΗΚΗΣ

Κανόνας του Μαρκόβνικοβ



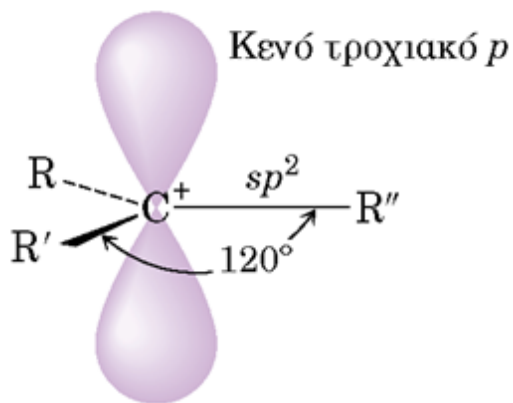
ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΟΦΙΛΗΣ ΠΡΟΣΘΗΚΗΣ

Κανόνας του Μαρκόβνικοβ

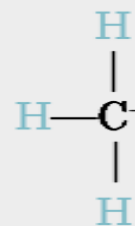
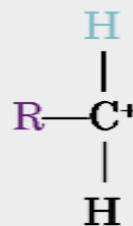
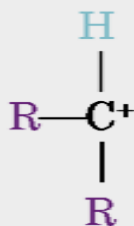
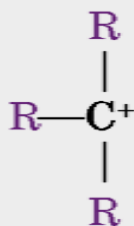


?

ΔΟΜΗ ΚΑΙ ΣΤΑΘΕΡΟΤΗΤΑ ΚΑΡΒΟΚΑΤΙΟΝΤΩΝ



Ηλεκτρονική δομή καρβοκατιόντος:
Ο τρισθενής άνθρακας είναι sp^2 υβριδισμένος (επίπεδος) και διαθέτει ένα κενό p τροχιακό.
Οι τρεις υποκαταστάτες κατευθύνονται προς τις γωνίες ενός ισόπλευρου τριγώνου



Τριτοταγή (3°) > Δευτεροταγή (2°) > Πρωτοταγή (1°) > Μέθυλο

Σταθερότερο



Ασταθέστερο

Θερμοδυναμικές μετρήσεις: Τα περισσότερο υποκατεστημένα καρβοκατιόντα είναι σταθερότερα από τα λιγότερο υποκατεστημένα

ΣΤΑΘΕΡΟΤΗΤΑ ΚΑΡΒΟΚΑΤΙΟΝΤΩΝ

Υπερσυζυγιακό φαινόμενο

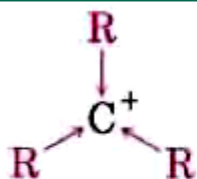
Αλληλεπίδραση ενός κενού τροχιακού p του καρβοκατιόντος και ενός γειτονικού σ μοριακού τροχιακού του δεσμού C-H

Όσο περισσότερες αλκυλομάδες υπάρχουν στο καρβοκατιόν τόσο περισσότερες είναι οι πιθανότητες για την εκδήλωση του υπερσυζυγιακού φαινομένου και τόσο σταθερότερο είναι το καρβοκατιόν.

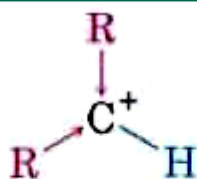
Επαγωγικά φαινόμενα

Μετατόπιση ηλεκτρονίων κατά μήκος ενός δεσμού, λόγω ηλεκτραρνητικότητας κάποιου γειτονικού ατόμου (επαγωγική σταθερότητα)

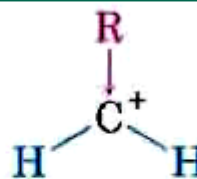
Ηλεκτρόνια από μια σχετικά μεγάλη και πολώσιμη αλκυλομάδα μπορούν να μετατοπισθούν προς ένα γειτονικό θετικό φορτίο ευκολότερα απ' ό,τι τα ηλεκτρόνια ενός υδρογόνου



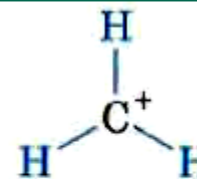
3° : Τρεις αλκυλομάδες που προσφέρουν ηλεκτρόνια



2° : Δύο αλκυλομάδες που προσφέρουν ηλεκτρόνια



1° : Μία αλκυλομάδα που προσφέρει ηλεκτρόνια

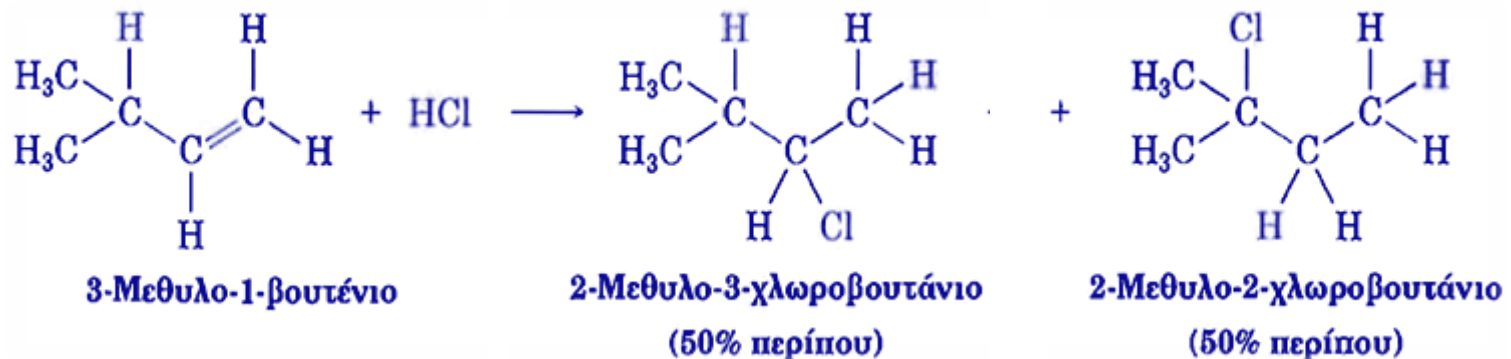


Μέθυλο: Καμία αλκυλομάδα δεν προσφέρει ηλεκτρόνια

ΜΕΤΑΘΕΣΕΙΣ ΣΤΑ ΚΑΡΒΟΚΑΤΙΟΝΤΑ

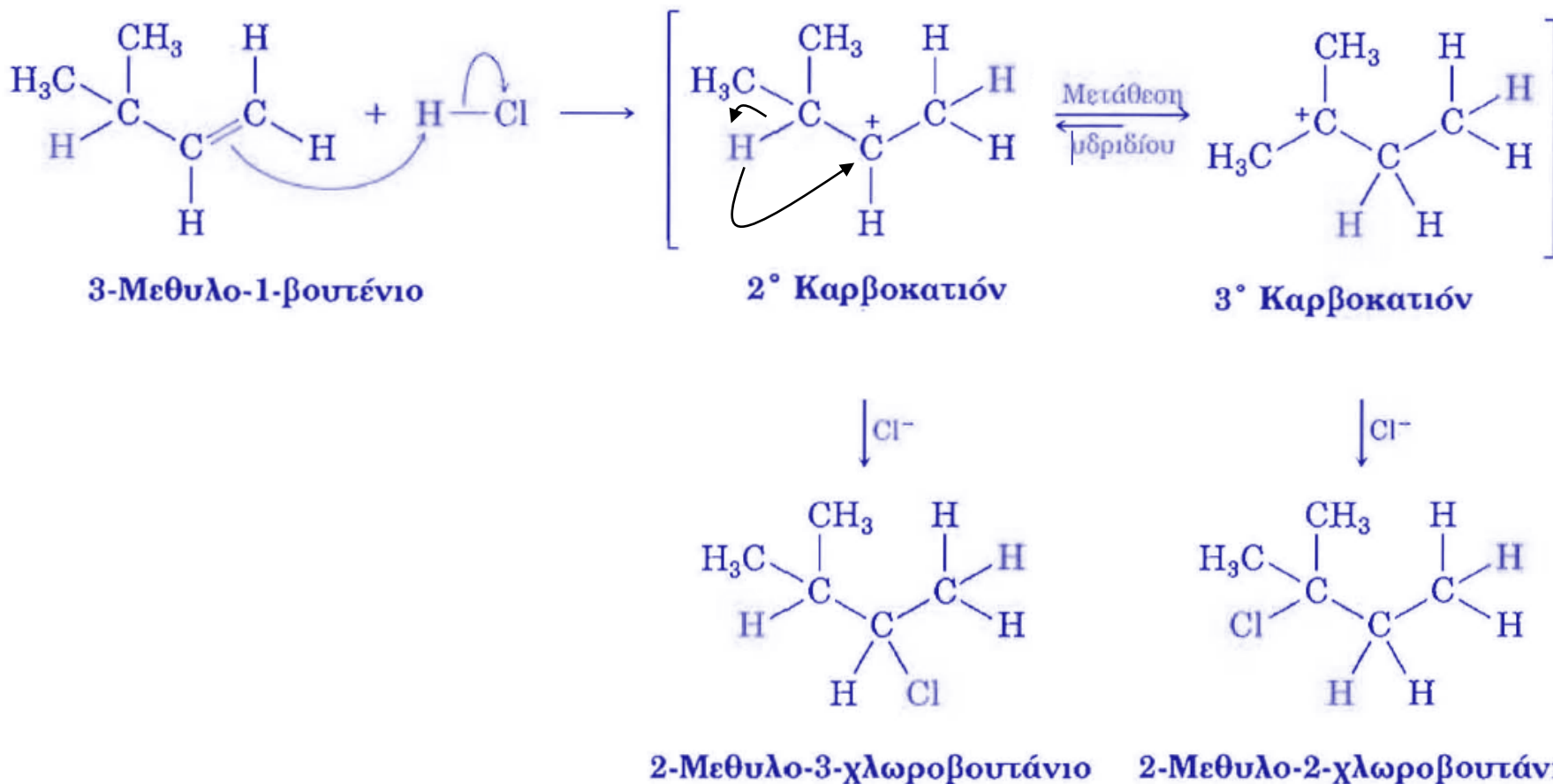
ΕΝΔΕΙΞΗ ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΥ ΔΥΟ ΣΤΑΔΙΩΝ

Μετατόπιση υδριδίου (H^-) ή αλκυλομάδας R^-



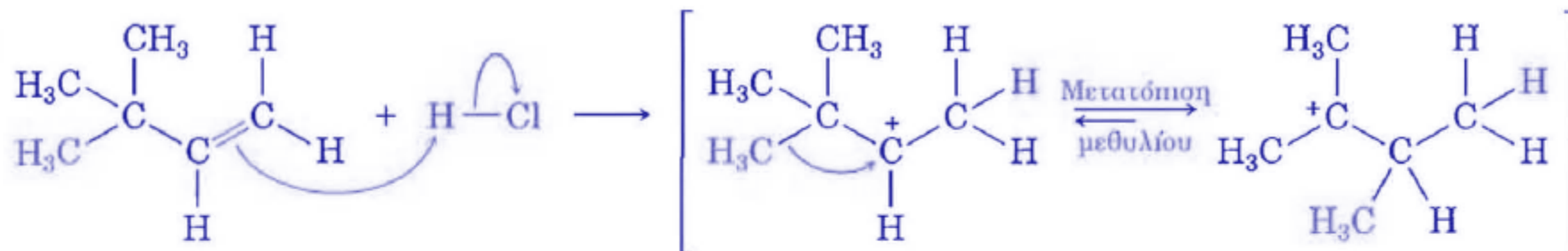
ΜΕΤΑΘΕΣΕΙΣ ΚΑΡΒΟΚΑΤΙΟΝΤΩΝ

Μετατόπιση υδριδίου (H^-)



ΜΕΤΑΘΕΣΕΙΣ ΚΑΡΒΟΚΑΤΙΟΝΤΩΝ

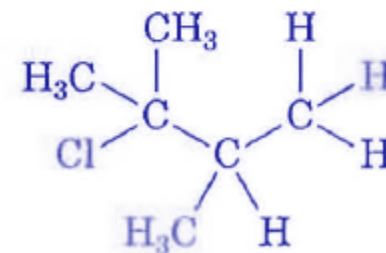
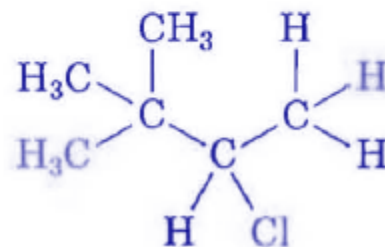
Μετατόπιση αλκυλομάδας R⁻



3,3-Διμεθυλο-1-βουτένιο

2° Καρβοκατιόν

3° Καρβοκατιόν



2,2-Διμεθυλο-3-χλωροβουτάνιο

2,3-Διμεθυλο-2-χλωροβουτάνιο