

Γεωμετρία των μορίων στα οργανικά υλικά

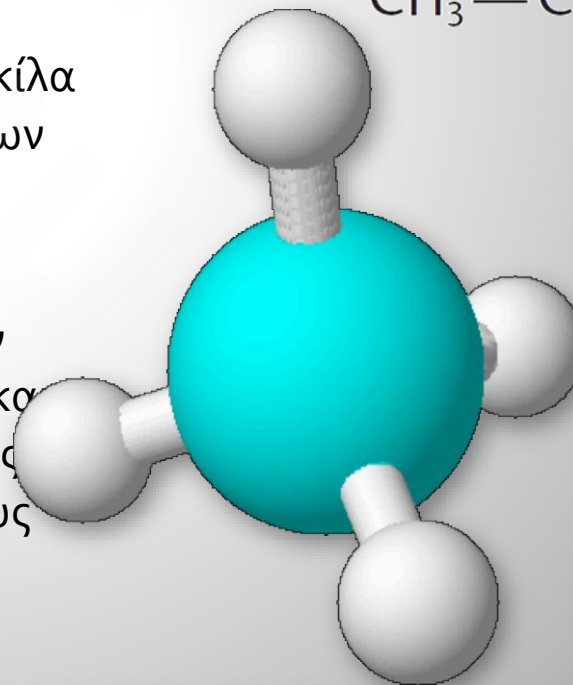
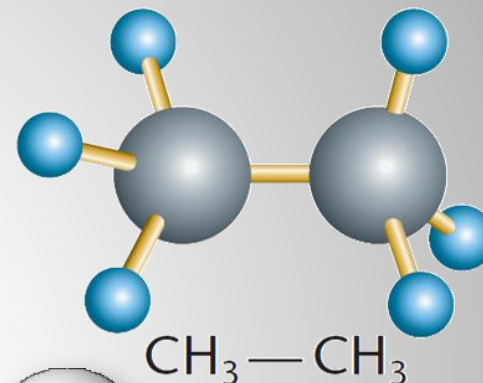
Στ. Μπογιατζής, επίκουρος καθηγητής ΤΕΙ Αθήνας

Βασικοί όροι

- Ομοιοπολικές χημικές ενώσεις
- Ενώσεις του άνθρακα
- Χαρακτηριστικές ομάδες
- Τετραεδρική μοριακή δομή
- Επίπεδη τριγωνική μοριακή δομή
- Ευθύγραμμη μοριακή δομή

Τα οργανικά μόρια

- Τα οργανικά μόρια μπορεί κάποιος να τα αντιληφθεί σαν μικροσκοπικές κατασκευές που περιέχουν άτομα άνθρακα (C) τα οποία συνδέονται μέσω δεσμών με άλλα άτομα άνθρακα ή άλλων στοιχείων.
- Οι κατασκευές αυτές μπορεί να έχουν ποικίλα μεγέθη, ανάλογα με τον αριθμό των ατόμων που τα απαρτίζουν και αποκτούν ένα συγκεκριμένο σχήμα (μορφή).
- Το σχήμα τους εξαρτάται από το είδος των ατόμων, τον αριθμό των ατόμων, τα είδη και την κατεύθυνση των δεσμών ανάμεσά τους και τέλος, τα φορτία και την κατανομή τους επάνω στην «κατασκευή» αυτή.

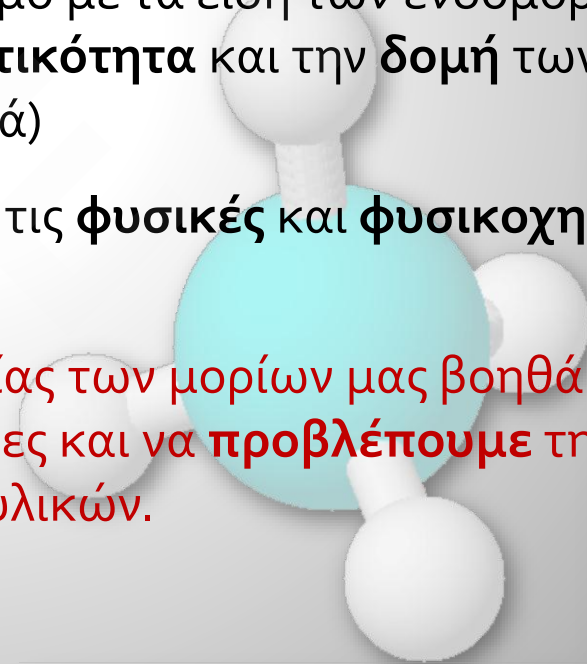


Πόσο διαφορετικά είναι τα οργανικά μόρια από τα ανόργανα;

- Τα **οργανικά** μόρια είναι περισσότερα σε πλήθος, αλλά φτωχότερα σε ποικιλία ατόμων σε σύγκριση με τα **ανόργανα**.
- Έχουν πάντα τον άνθρακα σαν κοινό στοιχείο, και συνεπώς μπορούν να συστηματοποιηθούν σε σχέση με τη δομή τους και τις ιδιότητές τους.
- Η συστηματοποίηση αυτή περιλαμβάνει κυρίως την κατηγοριοποίησή τους σε **ομόλογες σειρές** οι οποίες παίρνουν την ταυτότητά τους από την παρουσία **χαρακτηριστικών ομάδων**.

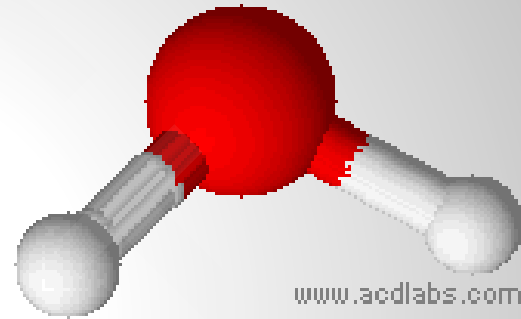
Γιατί μας ενδιαφέρει το σχήμα των μορίων;

- Η γεωμετρία των μορίων καθορίζεται από τη γειτνίαση των ατόμων μεταξύ τους και την ύπαρξη ηλεκτρικών φορτίων επάνω στα μόρια με άμεση επίδραση στις πολύ σημαντικές **διαμοριακές δυνάμεις**.
- Η γεωμετρία των μορίων σε συνδυασμό με τα είδη των ενδομοριακών δεσμών επηρεάζουν τη **χημική δραστηριότητα** και την **δομή** των υλικών (**άμορφα** ή **κρυσταλλικά υλικά**)
- Οι διαμοριακές δυνάμεις επηρεάζουν τις **φυσικές** και **φυσικοχημικές** ιδιότητες των υλικών
- Με άλλα λόγια, η γνώση της γεωμετρίας των μορίων μας βοηθά να **κατανοήσουμε** τις παραπάνω ιδιότητες και να **προβλέπουμε** τη σωστή αντιμετώπιση και χρήση των υλικών.



Το σχήμα των μορίων μερικών γνωστών (ανόργανων) ενώσεων

- Το σχήμα του μορίου του **νερού** είναι μια γωνία 104.5° και ευθύνεται για το ότι αυτό είναι **υγρό** στις συνήθεις θερμοκρασίες που επικρατούν σε όλα τα μήκη και πλάτη της γης στο μεγαλύτερο μέρος του έτους, και κατ' επέκταση σε αυτό οφείλεται η ύπαρξη της ζωής όπως τη γνωρίζουμε μέχρι σήμερα.



- Επίσης, λόγω του ευθύγραμμου σχήματος του μορίου του **διοξειδίου του άνθρακα**, δεν θα μπορούσε παρά να ήταν **αέριο** σε συνήθεις συνθήκες.



Χαρακτηριστικά των οργανικών μορίων

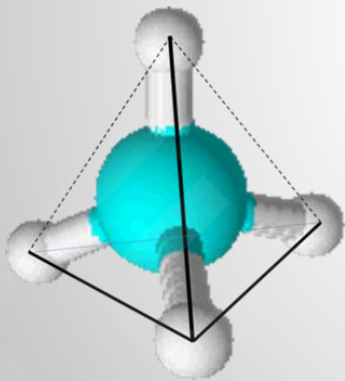
- Όλα τα οργανικά μόρια έχουν σαν κοινό στοιχείο τους τον **άνθρακα**, και σχεδόν όλα περιέχουν επίσης και **υδρογόνο**. Από αυτά τα δύο είδη ατόμων, είναι δυνατό να κατασκευαστεί (και η φύση πράγματι τα κατασκευάζει) τεράστιος αριθμός διαφορετικών μορίων τα οποία καλούνται **υδρογονάνθρακες**.
- Στην περίπτωση των υδρογονανθράκων, το σχήμα τους καθορίζεται κατά βάση από τα άτομα άνθρακα.
- Στην περίπτωση που στα μόρια συμμετέχουν και **ετεροάτομα**, όπως οξυγόνο, άζωτο, φώσφορος, αλογόνα, κλπ., έχουν και αυτά σημαντική συνεισφορά στο σχήμα των μορίων.

Κορεσμένες και ακόρεστες οργανικές ενώσεις

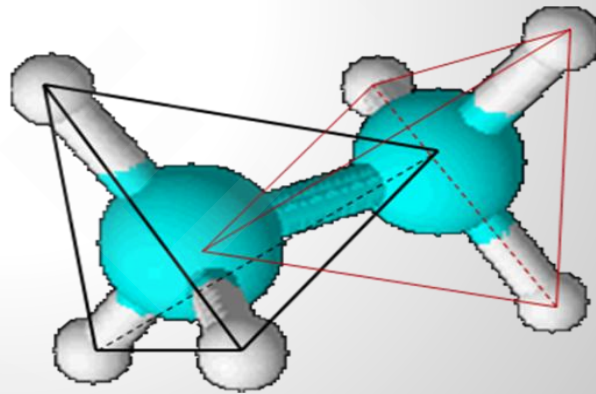
- Ανάλογα με τον τρόπο που συνδέονται οι άνθρακες στα μόρια των οργανικών ενώσεων, αυτές διακρίνονται σε
- Κορεσμένες (περιέχουν μόνο απλούς δεσμούς)
- Ακόρεστες με διπλό δεσμό/δεσμούς και
- Ακόρεστες με τριπλό δεσμό/δεσμούς

Κορεσμένες οργανικές ενώσεις

- Στις κορεσμένες ενώσεις όλοι οι άνθρακες είναι τετραεδρικοί, ή sp^3



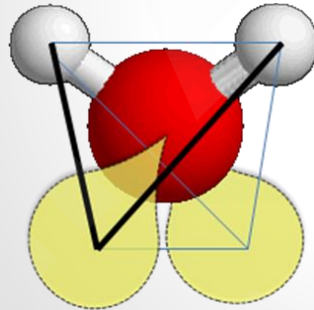
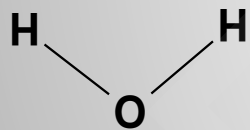
Μεθάνιο (ένας
τετραεδρικός άνθρακας
(sp^3))



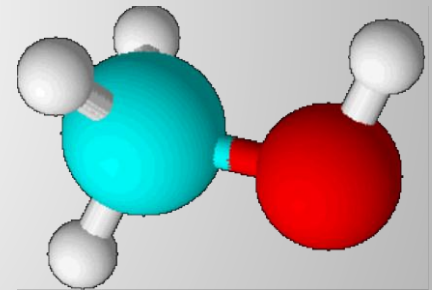
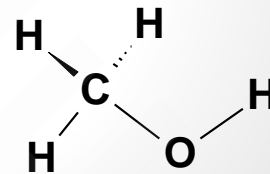
Αιθάνιο (δύο τετραεδρικοί άνθρακες, sp^3)

Κορεσμένες οργανικές ενώσεις

- Εκτός του άνθρακα, μπορούν και άλλα άτομα να έχουν γεωμετρία sp^3 , π.χ. το άτομο του οξυγόνου στο νερό και τις αλκοόλες.



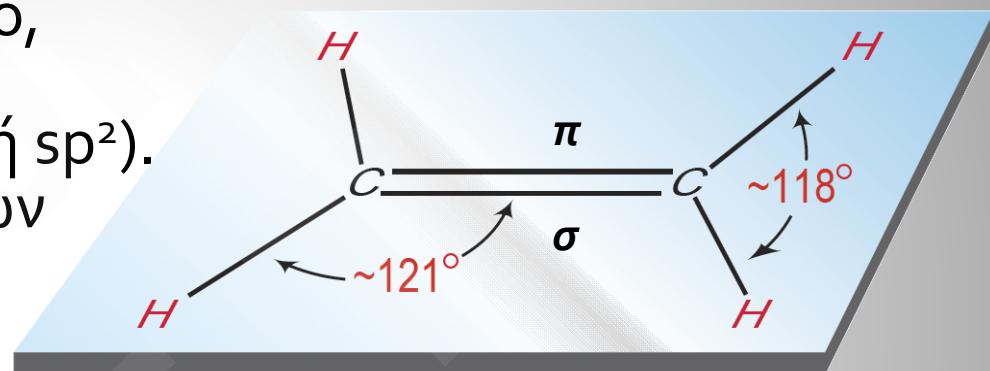
Το μόριο του νερού



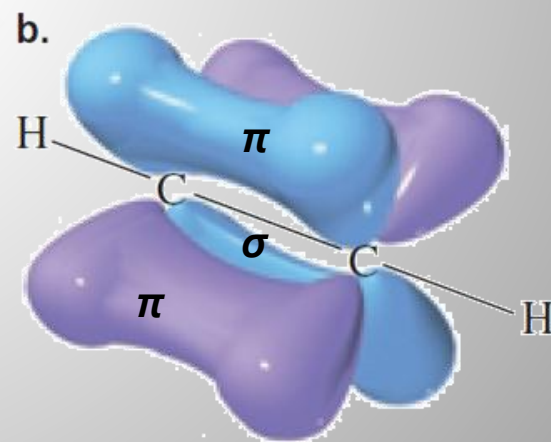
Το μόριο της μεθανόλης

Ακόρεστες οργανικές ενώσεις

- Ακόρεστες με διπλό δεσμό, όπου δυο τουλάχιστον άνθρακες είναι επίπεδοι, ή sp^2). Μεταξύ των δυο ανθράκων υπάρχει ένας σ και ένας π δεσμός



- Ακόρεστες με τριπλό δεσμό, όπου τουλάχιστον δυο άνθρακες είναι γραμμικοί, ή sp). Μεταξύ των δυο ανθράκων υπάρχει ένας σ και δύο π δεσμοί

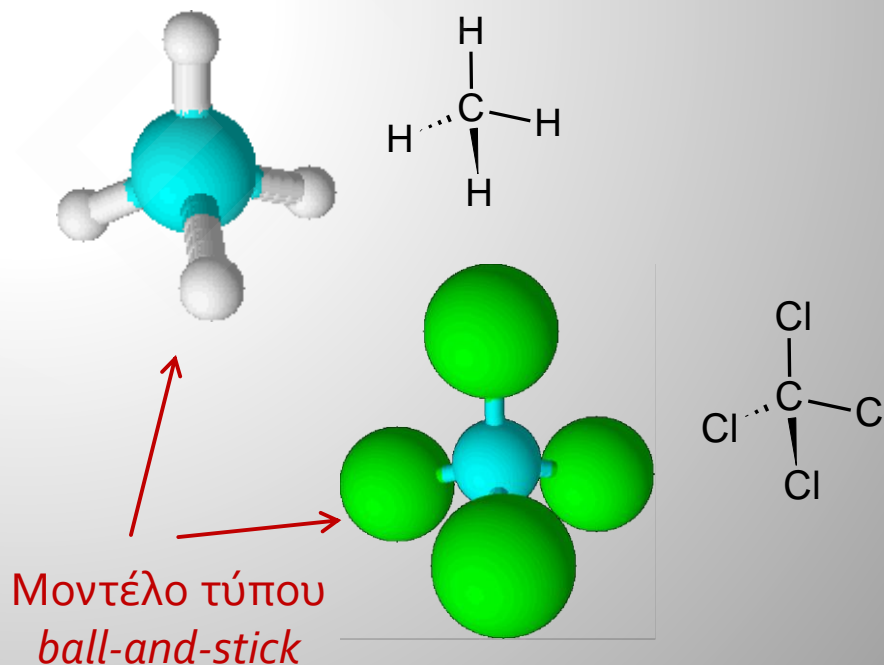


Χρήση μοριακών μοντέλων

- Οι σπουδαστές κατά τη διάρκεια της άσκησης **κατασκευάζουν** τα μόρια των χημικών ενώσεων που ακολουθούν, συνδυάζοντας τα **μοντέλα** των ατόμων (**σφαίρες**) με τους κατάλληλους **συνδέσμους** (εν είδει ομοιοπολικών δεσμών)
- Με τις υποδείξεις των διδασκόντων οι σπουδαστές προσπαθούν να στρέψουν τα διάφορα μέρη κάθε μορίου με σκοπό την **πιο ευνοϊκή** γεωμετρία.

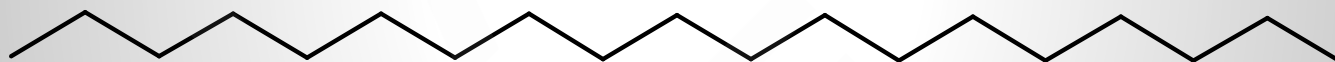
Κορεσμένοι υδρογονάνθρακες

- Όλοι οι άνθρακες είναι τετραεδρικής συμμετρίας (sp^3)
- Σε ένα τετραεδρικό άνθρακα οι γωνίες μεταξύ των δεσμών είναι 109.5° .
- Τα μόρια του μεθανίου και
- του **τετραχλωράνθρακα** έχουν αυστηρή τετραεδρική συμμετρία.

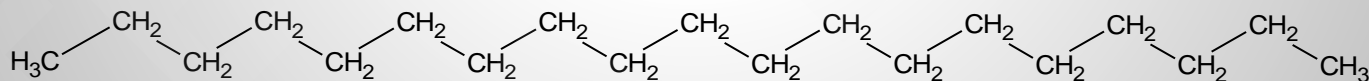


Κορεσμένοι υδρογονάνθρακες

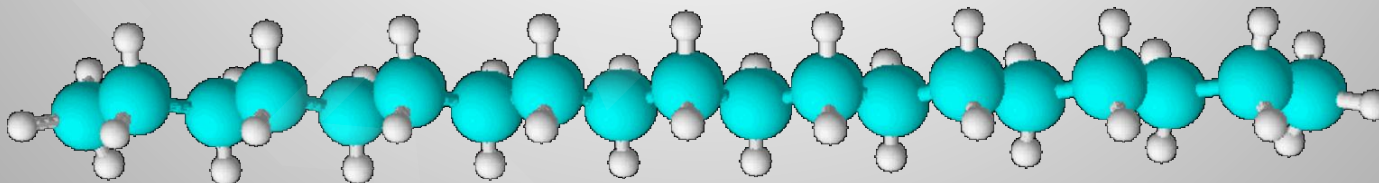
- η-Εικοσάνιο (και οι 20 άνθρακες είναι τετραεδρικοί, sp^3)



ή

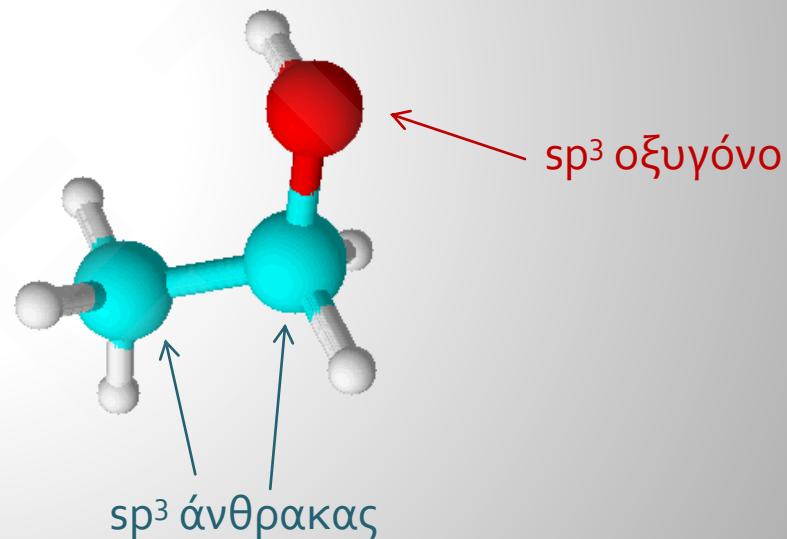
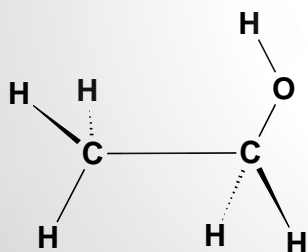


ή



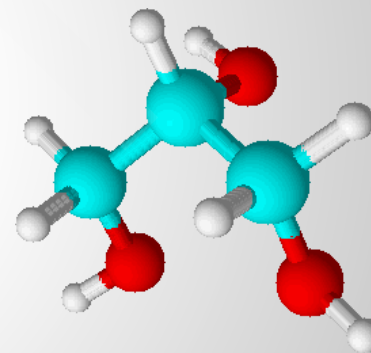
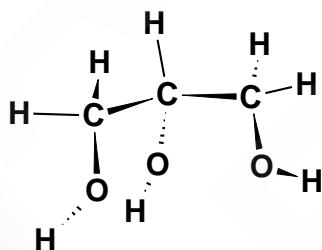
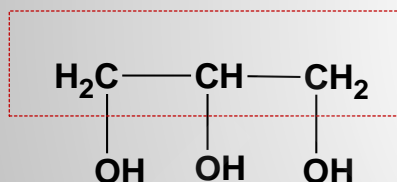
Άλλες κορεσμένες ενώσεις

- **Αιθανόλη:** δυο άνθρακες και ένα οξυγόνο, όλα τετραεδρικά (sp^3)



Άλλες κορεσμένες ενώσεις

- Γλυκερόλη (ή προπανοτριόλη-1,2,3) : τρεις άνθρακες και τρία οξυγόνα, όλα τετραεδρικά (sp^3)

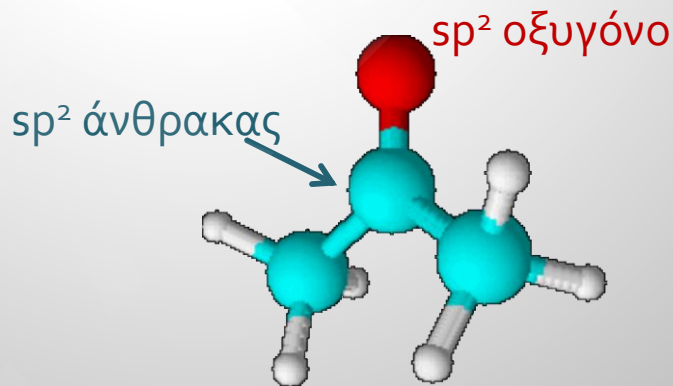
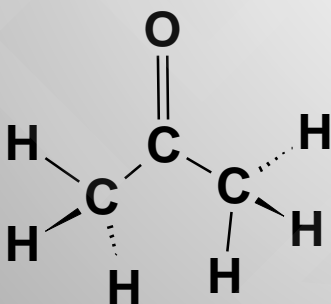


Το μόριό της μπορεί να σχεδιαστεί αν τη δούμε ως παράγωγο του **προπανίου**, στο οποίο ένα υδρογόνο σε κάθε άνθρακα αντικαθίσταται από μια ομάδα υδροξυλίου.

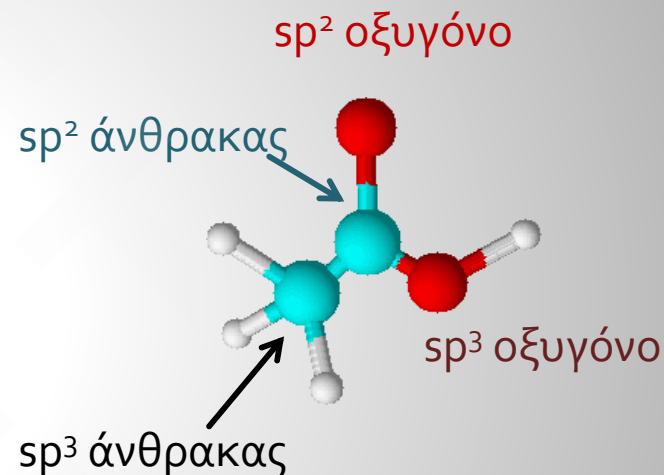
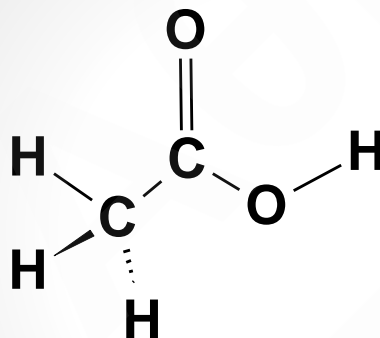
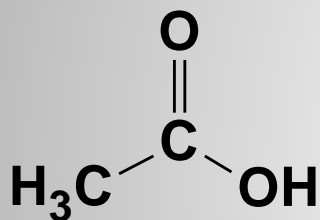
Για να πετύχουμε την πιο ευνοϊκή διαμόρφωση στο χώρο, πρέπει να ληφθεί υπ' όψη ότι οι υδροξυλομάδες (OH) τείνουν να βρίσκονται στη μεγαλύτερη δυνατή απόσταση μεταξύ τους λόγω άπωσης των φορτίων στο κάθε άτομο οξυγόνου

Καρβονυλικές ενώσεις

- Σε ενώσεις όπως οι αλδεΐδες, οι κετόνες, τα καρβοξυλικά οξέα, οι εστέρες και τα αμινοξέα, κοινή ομάδα αποτελεί το καρβονύλιο ($\text{C}=\text{O}$), στο οποίο υπάρχει ένας άνθρακας sp^2 και ένα οξυγόνο (επίσης sp^2).
- Η συγκρότηση του μορίου της **ακετόνης**: ο μεσαίος άνθρακας (sp^2) συγκρατεί ένα ομοίως sp^2 άτομο οξυγόνου. Αυτά τα δύο άτομα αποτελούν το καρβονύλιο ($\text{C}=\text{O}$), το οποίο έχει επίπεδο γεωμετρία και είναι επί πλέον, διαθέσιμο να συγκρατήσει δύο άτομα ή ομάδες (εδώ δύο μεθυλομάδες).

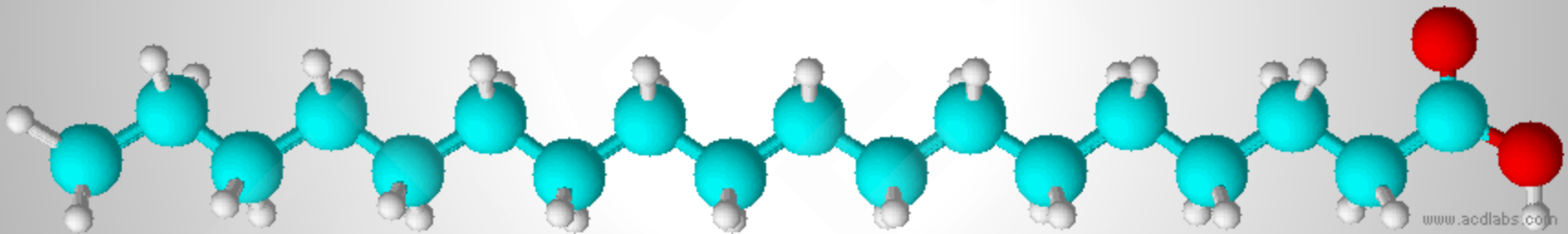
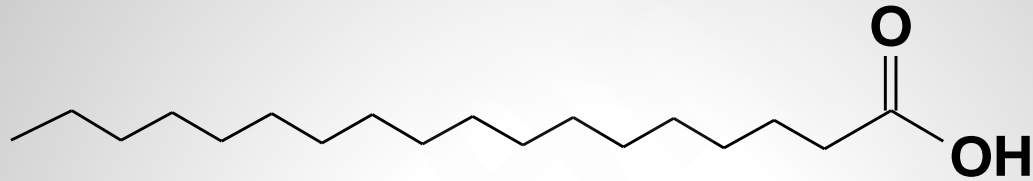


Καρβοξυλικά οξέα



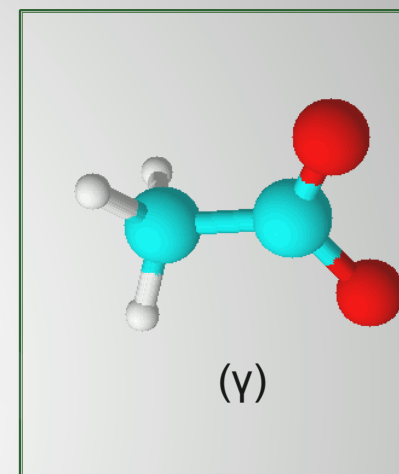
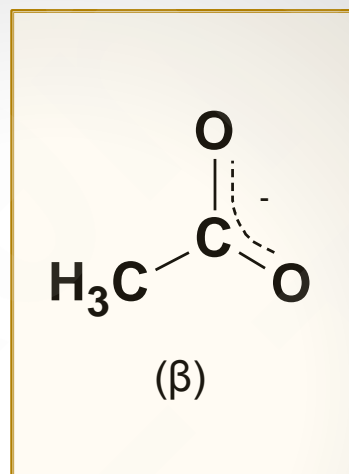
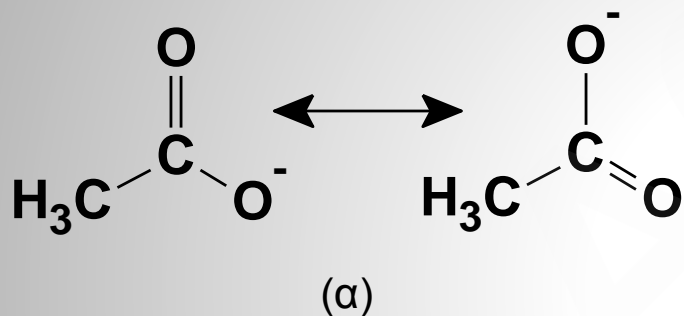
- Η συγκρότηση του μορίου του οξικού οξέος: στη μέση βρίσκεται και εδώ το καρβονύλιο ($\text{C}=\text{O}$), το οποίο είναι επί πλέον διαθέσιμο να συγκρατήσει δύο άτομα ή ομάδες: στο ένα άκρο μια ομάδα υδροξυλίου και στο άλλο άκρο μια μεθυλομάδα).

Λιπαρά οξέα



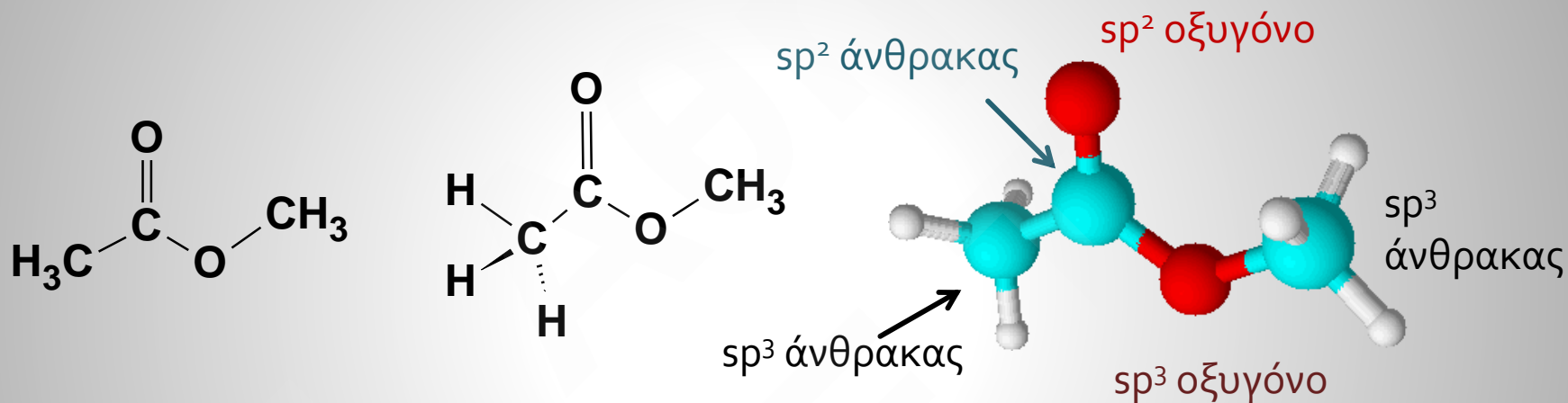
- Το μόριο του *στεατικού οξέος* (ή *δεκαοκτανοϊκού οξέος*): η ομάδα του καρβοξυλίου εδώ συνδέεται με μια μακριά αλκυλική ομάδα δεκαεπτά ανθράκων (ή *δεκαεπτυλική ομάδα*).

Καρβοξυλικό ανιόν



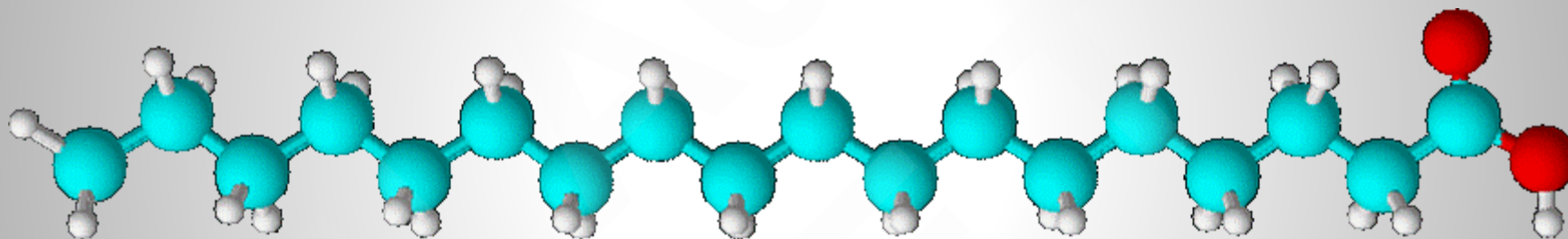
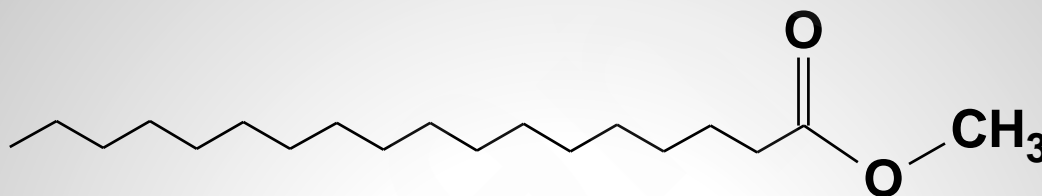
- Η συγκρότηση του *οξικού ανιόντος*:
- Το *καρβοξυλικό ανιόν* διαφέρει σημαντικότερα από την αντίστοιχη όξινη καρβοξυλομάδα επειδή έχει χάσει το ιόν υδρογόνου (H⁺), και συνεπώς φέρει αρνητικό φορτίο, το οποίο μοιράζεται στις 2 δομές συντονισμού που φαίνονται με το διπλό βέλος, βλ. δομές (α).
- Εναλλακτικά, μπορούμε να απεικονίσουμε αυτή τη σύνθετη κατάσταση με **μη εντοπισμένο** αρνητικό φορτίο (σημειώνεται με την εστιγμένη καμπύλη γραμμή στο μέσον), βλ. **δομή (β)**.
- Παρατηρούμε ότι το ιόν αυτό διαθέτει υψηλότερη συμμετρία σε σχέση με το αντίστοιχο οξύ γιατί τα δυο **οξυγόνα** είναι **ισοδύναμα**, βλ. **δομή (γ)**.

Εστέρες καρβοξυλικών οξέων



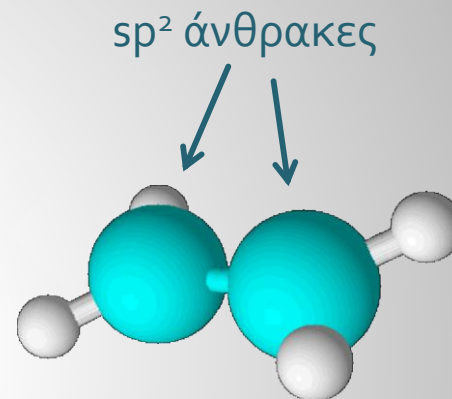
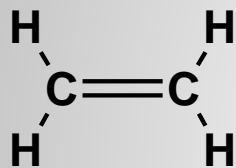
- Η συγκρότηση του μορίου του *οξικού μεθυλεστέρα*: στη μέση βρίσκεται το **καρβονύλιο** ($\text{C}=\text{O}$), το οποίο είναι επί πλέον διαθέσιμο να συγκρατήσει δύο άτομα ή ομάδες: στο ένα άκρο μια ομάδα υδροξυλίου και στο άλλο άκρο μια μεθυλομάδα).

Εστέρες λιπαρών οξέων



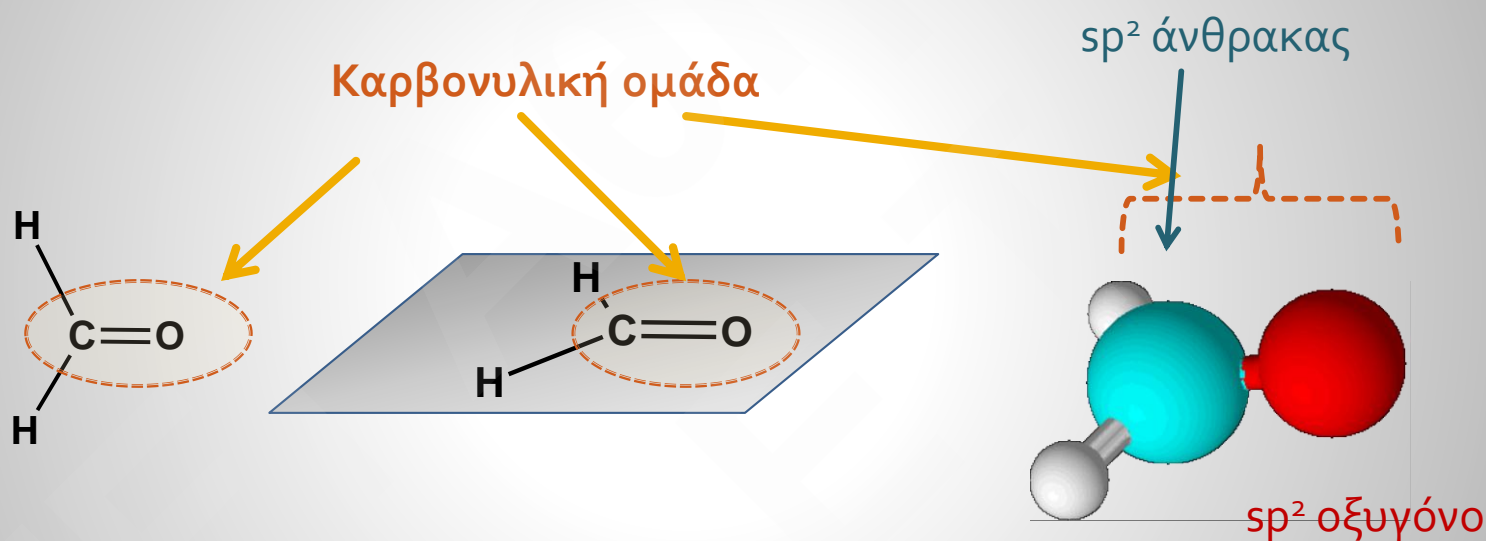
- Η συγκρότηση του μορίου του δεκαοκτανοϊκού μεθυλεστέρα (ή μεθυλεστέρα του δεκαοκτανοϊκού οξέος).

Ακόρεστες ενώσεις με διπλούς δεσμούς μεταξύ ανθράκων



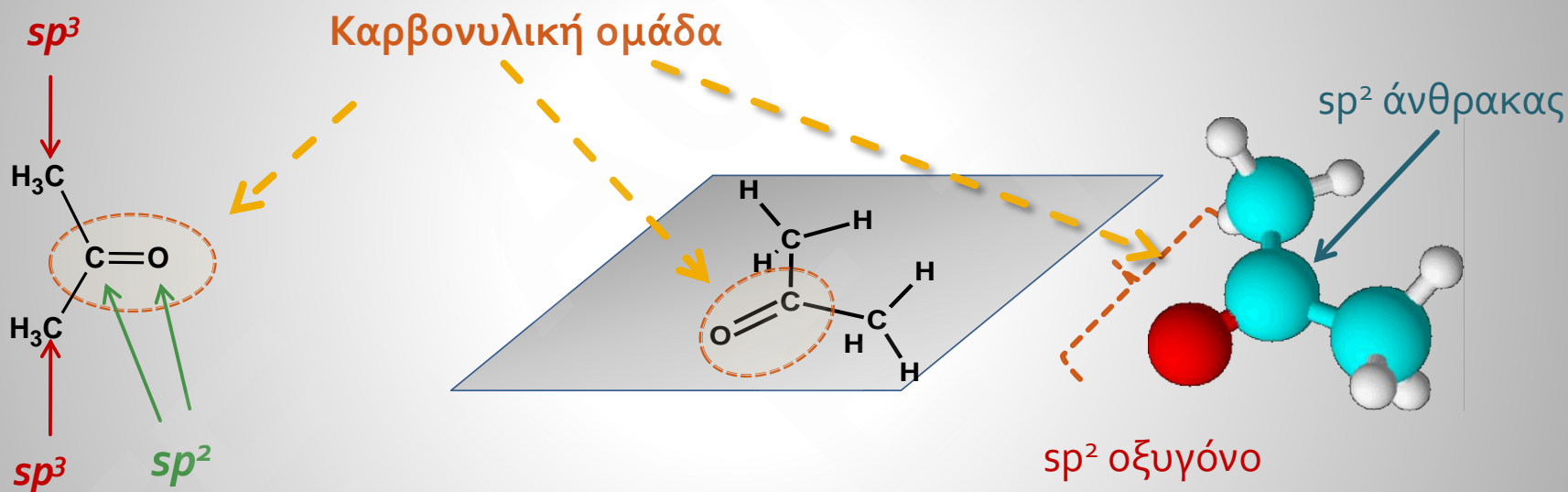
- Αιθυλένιο (δύο επίπεδοι τριγωνικοί άνθρακες, ή sp²).
- Όλα τα άτομα του μορίου βρίσκονται επάνω στο ίδιο επίπεδο.

Ακόρεστες ενώσεις με διπλούς δεσμούς μεταξύ άνθρακα και οξυγόνου: αλδεΐδες



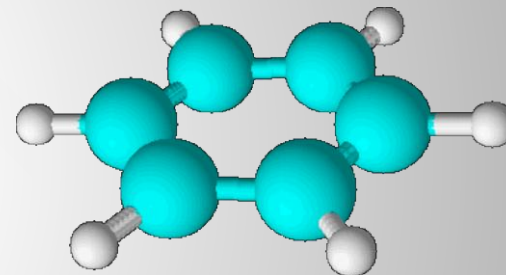
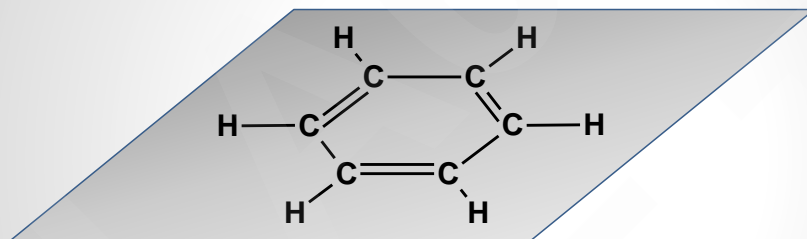
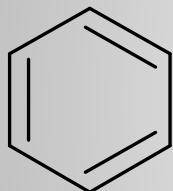
- **Φορμαλδεΐδη** [ένας άνθρακας sp^2 και ένα οξυγόνο sp^2 συνδέονται με διπλό δεσμό: σχηματισμός καρβονυλικής ομάδας]
- Όλο το μόριο σε ένα επίπεδο.

Ακόρεστες ενώσεις με διπλούς δεσμούς μεταξύ άνθρακα και οξυγόνου: κετόνες



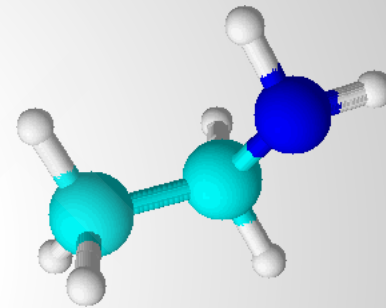
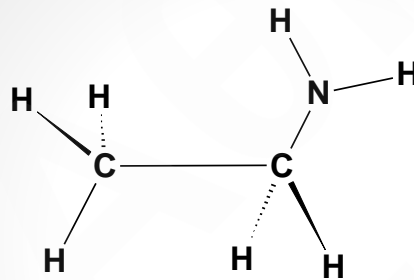
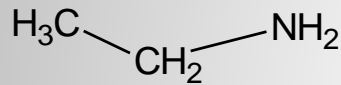
- **Ακετόνη** [δύο άνθρακες sp^3 , ένας άνθρακας sp^2 και ένα οξυγόνο sp^2],
- Οι τρεις άνθρακες και το οξυγόνο σε ένα επίπεδο,
- Τα υδρογόνα διατάσσονται στο χώρο σε θέσεις κορυφών τετραέδρου.

Αρωματικές ενώσεις: Βενζόλιο



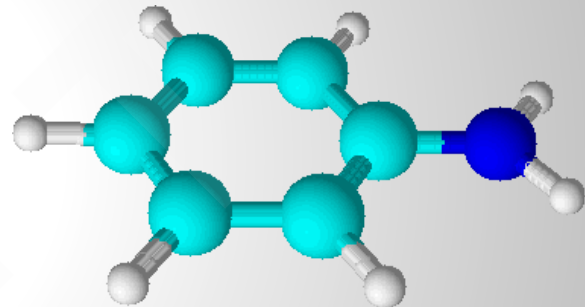
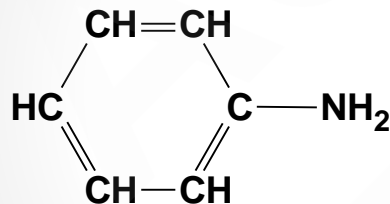
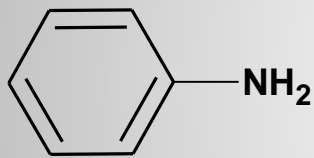
- Βενζόλιο [έξη άνθρακες sp^2], όλο το μόριο σε ένα επίπεδο.

Αζωτούχες οργανικές ενώσεις: αμίνες



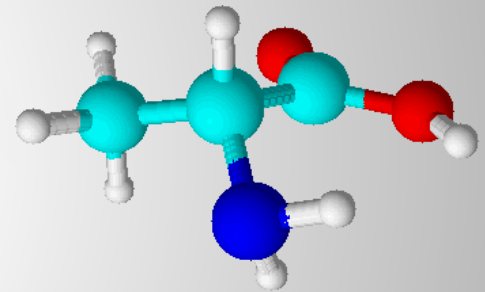
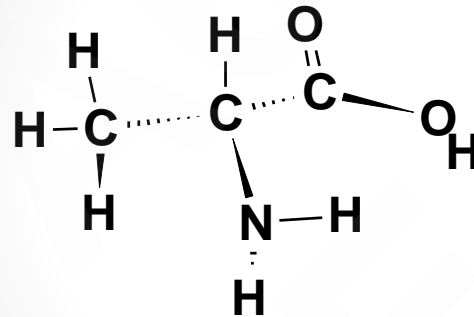
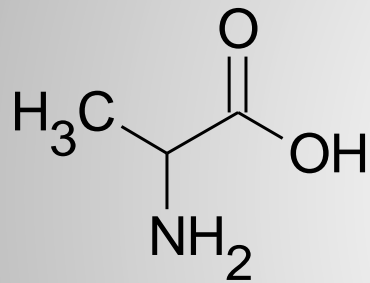
- Η συγκρότηση του μορίου της αιθυλαμίνης.

Αζωτούχες αρωματικές ενώσεις: ανιλίνες



- Η συγκρότηση του μορίου της ανιλίνης (της πιο απλής αρωματικής αμίνης).
- Έξι άτομα άνθρακα, πέντε υδρογόνα και η αμινομάδα ως ενιαίο σύνολο βρίσκονται επάνω στο ίδιο επίπεδο

Αζωτούχες οργανικές ενώσεις: αμινοξέα



- Η συγκρότηση του μορίου της αλανίνης.

ΦΥΛΛΟ ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗΣ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

Όνομασία	Συντακτικός τύπος	Στερεοχημική αποτύπωση με μοντέλα σφαίρας και ράβδου (<i>ball-and-stick</i>). Να σημειώσετε τους τετραεδρικούς άνθρακες (sp^3) και τους επίπεδους τριγωνικούς (sp^2).
1. μεθάνιο		
2. αιθάνιο		
3. νερό		
4. αιθανόλη		
5. γλυκερόλη		
6. διαιθυλαιθέρας		
7. οξικό οξύ		
8. οξικό ανιόν		
9. οξικός αιθυλεστέρας		
10. αλανίνη		
11. τολουόλιο		
12. ανιλίνη		

Ερωτήσεις

- Ανάλογα με όσα διαπιστώσατε για το μόριο του νερού και του μεθανίου, τι μπορείτε να συνάγετε για τη γεωμετρία του μορίου της αμμωνίας;
- Τα καρβοξυλικά οξέα, τα καρβοξυλικά ανιόντα και οι εστέρες είναι όλα καρβονυλικές ενώσεις. Ποιο είναι το κοινό τους γνώρισμα; Πόσα «είδη» οξυγόνου υπάρχουν στην κάθε κατηγορία;
- Το ελαϊκό οξύ είναι συστατικό του ελαιόλαδου, του λινέλαιου του καρυδέλαιου. Αποτελείται από 18 άνθρακες εκ των οποίων οι δεκαεπτά ανήκουν σε ανθρακική αλυσίδα με ένα διπλό δεσμό στη θέση 9. Ο διπλός δεσμός μπορεί να έχει γεωμετρία *cis*- ή *trans*-. Σχηματίστε το μόριο του *cis*-ελαϊκού οξέος και να δείξετε ποιοι άνθρακες είναι τετραεδρικοί (sp^3) και ποιοι επίπεδοι τριγωνικοί (sp^2).
- *Τριεστέρες της γλυκερίνης*: κατ' αναλογία με το μόριο του οξικού αιθυλεστέρα που είδατε προηγουμένως, σχεδιάστε το μόριο του αντίστοιχου τρι-εστέρα της γλυκερίνης με οξικό οξύ (δηλαδή του *οξικού τριεστέρα της γλυκερίνης*).

Βιβλιογραφία

- Σπηλιόπουλος Ιωακείμ, Βασική Οργανική Χημεία, 2008, Εκδ. Σταμούλη ΑΕ,
- Βάρβογλης Αναστάσιος, Επίτομη Οργανική Χημεία, 2005, Ζήτη Πελαγία & Σια Ο.Ε.
- McMurry, John, Οργανική Χημεία, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2012 (ενιαίος τόμος) Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης
- Klein, David, Organic Chemistry, 2012, Wiley, Hoboken, NJ