

Οργανική Χημεία της συντήρησης (ή γενική οργανική χημεία για συντηρητές)

Ενότητα 2 - Ο σχηματισμός των δεσμών στις
οργανικές χημικές ενώσεις

Βιβλίο McMurry: σελ. 3 - 22

Διδάσκων: Στ. Μπογιατζής
Επίκουρος καθηγητής ΤΕΙ Αθήνας

Βιβλιογραφία

- **A. Βάρβογλη. ΕΠΙΤΟΜΗ ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ**

Εκδόσεις Ζήτη, 2005.

Εύδοξος: Βιβλίο [10998]

- **J. McMurry, Οργανική Χημεία**

Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (σε ένα τόμο), 2014.

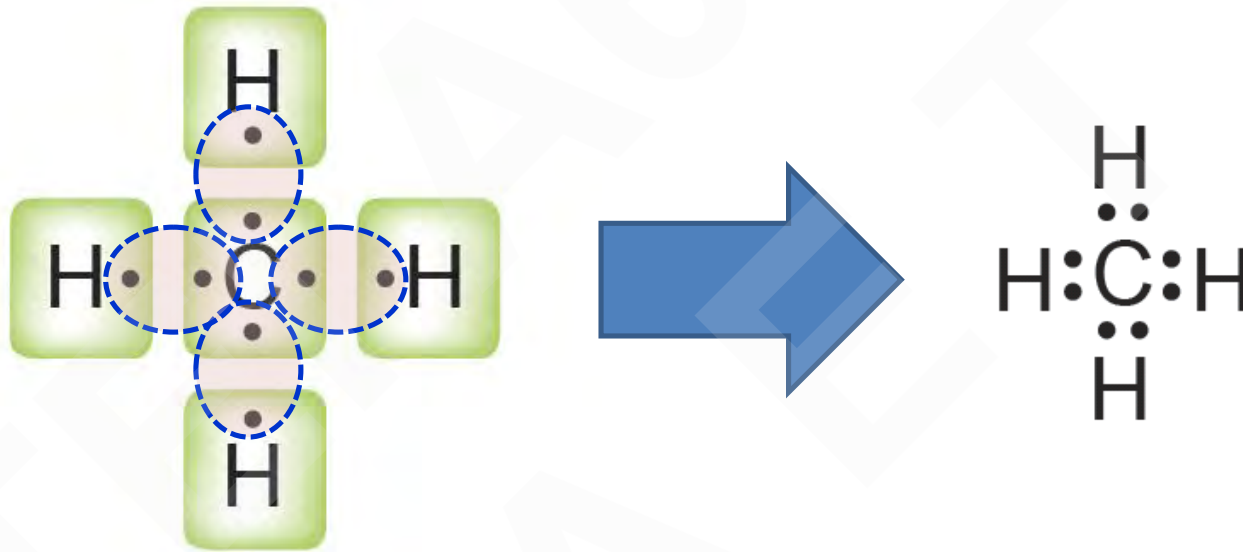
Εύδοξος: Βιβλίο [22689357]

Χημικοί τύποι (δομές) Lewis

- Είναι εξαιρετικά χρήσιμοι στην πρόβλεψη της **δομής** των μορίων
- Είναι το «απόλυτο» εργαλείο στην πρόβλεψη των **χημικών αντιδράσεων**
- Λαμβάνεται υπόψη η **ηλεκτρονιακή δομή** των ατόμων στα μόρια όπου ανήκουν

Δομές (χημικοί τύποι) κατά Lewis

- μεθάνιο



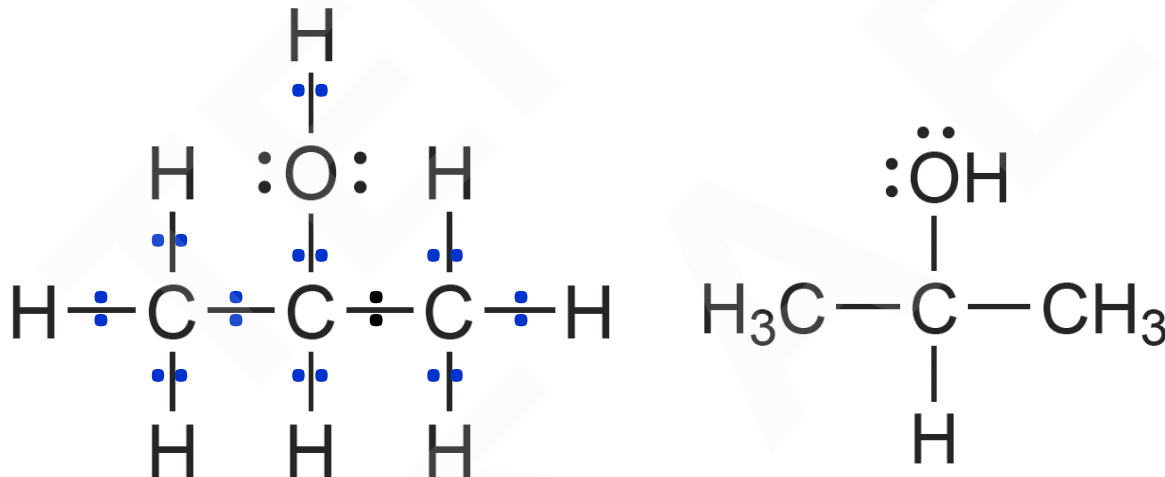
Δομές (χημικοί τύποι) κατά Lewis

Φορμαλδεΐδη: ένα άτομο **C**, δύο άτομα **H** και ένα **O**



Δομές (χημικοί τύποι) κατά Lewis

Προπανόλη-2, **ισοπροπυλική** αλκοόλη, ή **ισοπροπανόλη**

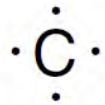


- Κάθε δεσμός αναπαριστάται ως **ζεύγος ηλεκτρονίων** (••) που μοιράζεται μεταξύ 2 ατόμων
- Ηλεκτρόνια εξωτερικών στιβάδων που **δεν συμμετέχουν σε δεσμούς** αναπαριστώνται ως **ασύζευκτο ζεύγος ηλεκτρονίων** (••), εντοπισμένο σε ένα άτομο.

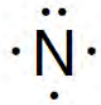
Ηλεκτρονιακή δομή (Lewis)



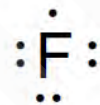
υδρογόνο



άνθρακας



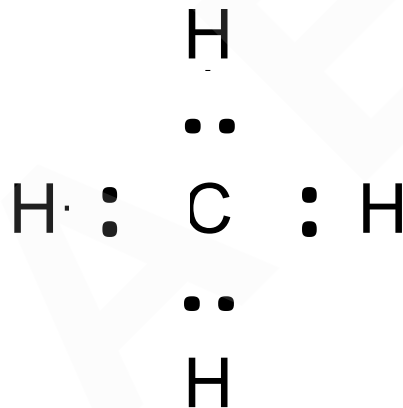
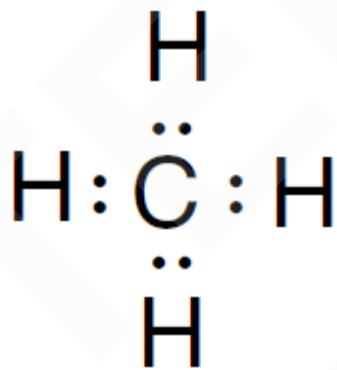
άζωτο



φθόριο

Κανόνες για τη γραφή των δομών Lewis

1. Αθροίζουμε τα ηλεκτρόνια σθένους όλων των ατόμων του μορίου



Ενέργεια δεσμού

Δεσμός	Μήκος, (pm)	Ενέργεια, (kJ/mol)
H — Υδρογόνο		
H-H	74	436
H-O	96	366
H-F	92	568
H-Cl	127	432
C — Άνθρακας		
C-H	109	413
→ C-C	154	348
C-C=	151	
=C-C≡	147	
=C-C=	148	
→ C=C	134	614
→ C≡C	120	839
C-N	147	308
C-O	143	360
C-F	134	488
C-Cl	177	330
N — Άζωτο		
N-H	101	391
N-N	145	170
N≡N	110	945
O — Οξυγόνο		
O-O	148	145
O=O	121	498
F, Cl, Br, I — Αλογόντα		
F-F	142	158
Cl-Cl	199	243
Br-H	141	366
Br-Br	228	193
I-H	161	298
I-I	267	151

Τυπικό φορτίο στα άτομα: νερό

- Το **τυπικό φορτίο** ενός ατόμου σε μια ένωση εξαρτάται από τη φύση του στοιχείου και το είδος των δεσμών που συμμετέχει

Τυπικό
φορτίο
ατόμου

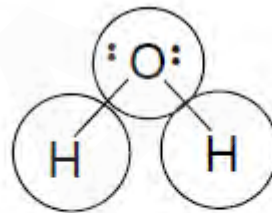
= [ηλεκτρόνια
σθένους]

-

[αριθμός
ασύζευκτων
ηλεκτρονίων]

+

$\frac{1}{2}$ [ηλεκτρονίων
που συμμετέχουν
σε κάθε δεσμό]



Τυπικό φορτίο στο H: $1 - [0 + 1] = 0$

Τυπικό φορτίο στο O: $6 - [4 + 2] = 0$

Τυπικό φορτίο στα άτομα: φορμαλδεΐδη

Τυπικό
φορτίο
ατόμου

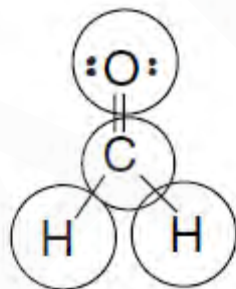
= [ηλεκτρόνια
σθένους]

-

[αριθμός
ασύζευκτων
ηλεκτρονίων]

+

$\frac{1}{2}$ [ηλεκτρονίων
που συμμετέχουν
σε κάθε δεσμό]



Τυπικό φορτίο στο H: $1 - [0 + 1] = 0$

Τυπικό φορτίο στο O: $6 - [4 + 2] = 0$

Τυπικό φορτίο στο C: $4 - [0 + 4] = 0$

Τυπικό φορτίο στα άτομα:

Τυπικό
φορτίο
ατόμου

=

[ηλεκτρόνια
σθένους]

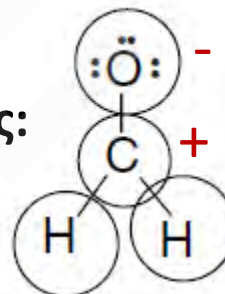
-

[αριθμός
ασύζευκτων
ηλεκτρονίων]

+

$\frac{1}{2}$ [ηλεκτρονίων
που συμμετέχουν
σε κάθε δεσμό]

να βρεθούν τα τυπικά φορτία της δομής:

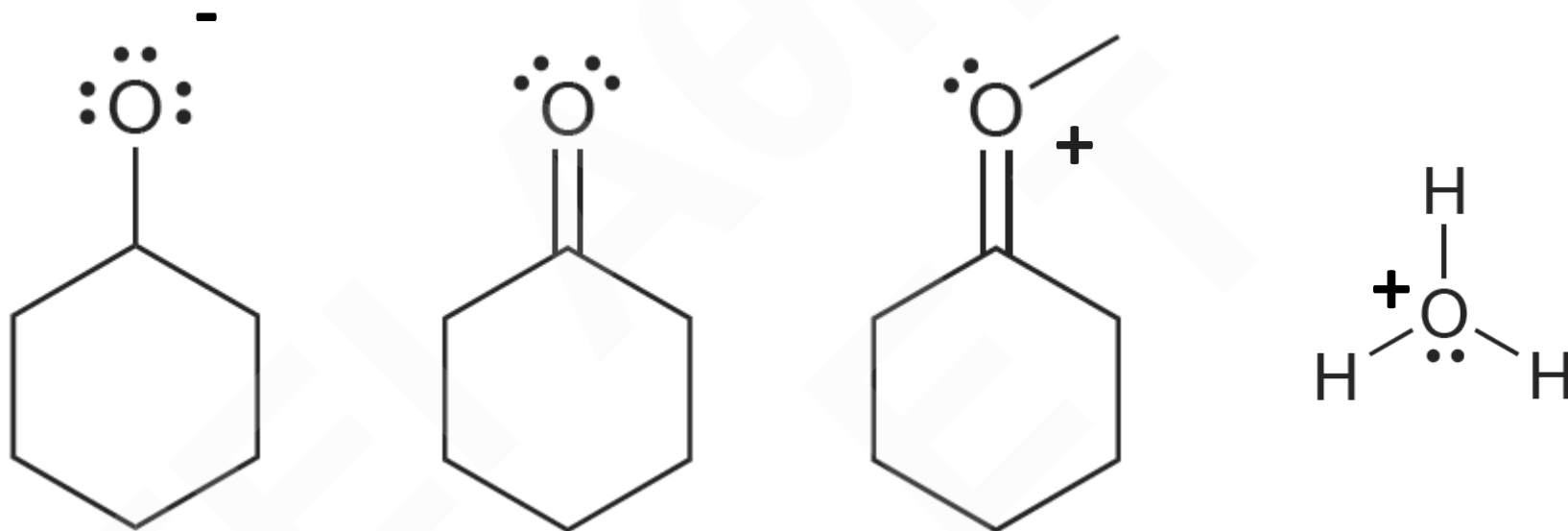


Τυπικό φορτίο στο H: $1 - [0 + 1] = 0$

Τυπικό φορτίο στο O: $6 - [6 + 1] = -1$

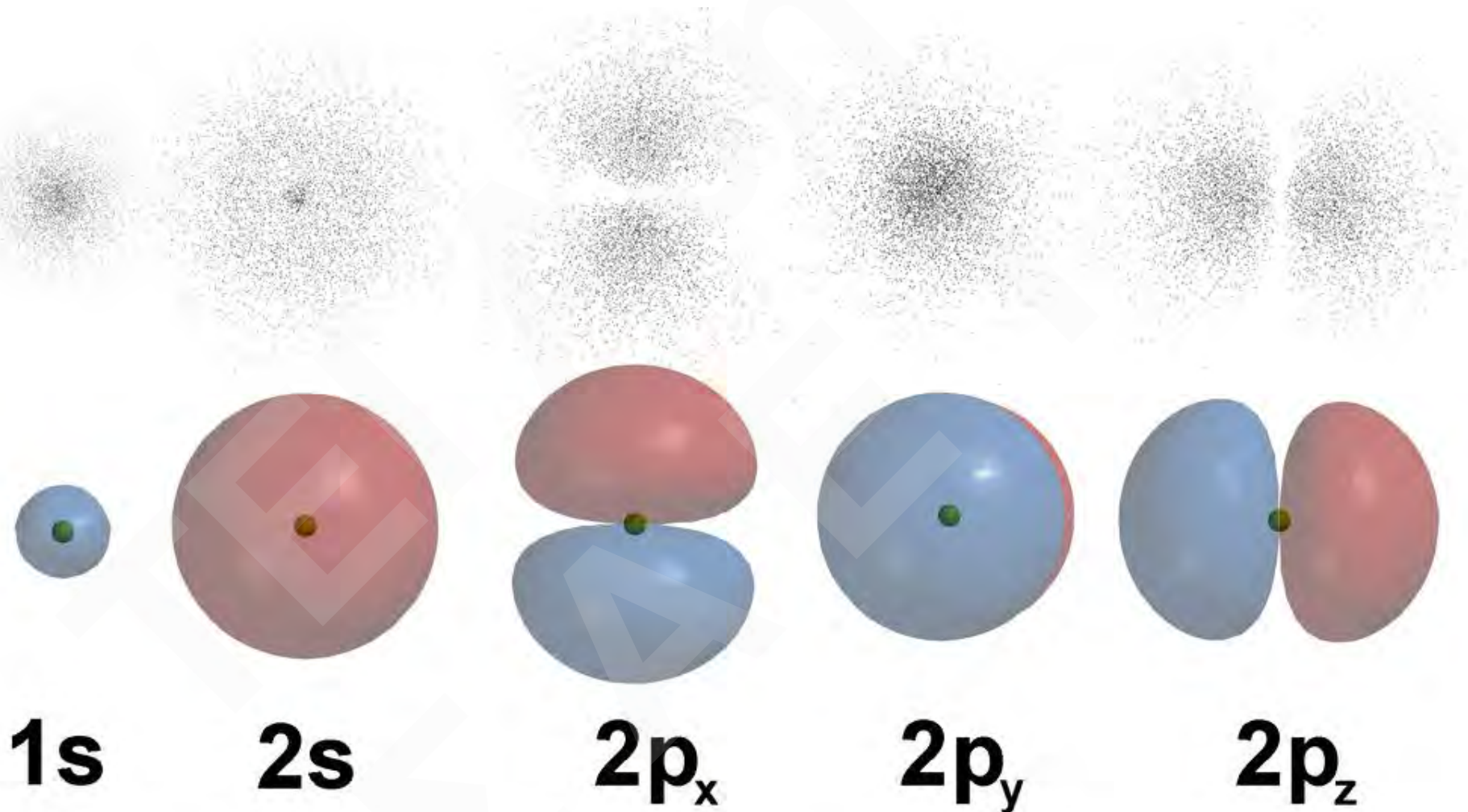
Τυπικό φορτίο στο C: $4 - [0 + 3] = +1$

Ασύζευκτα ηλεκτρόνια

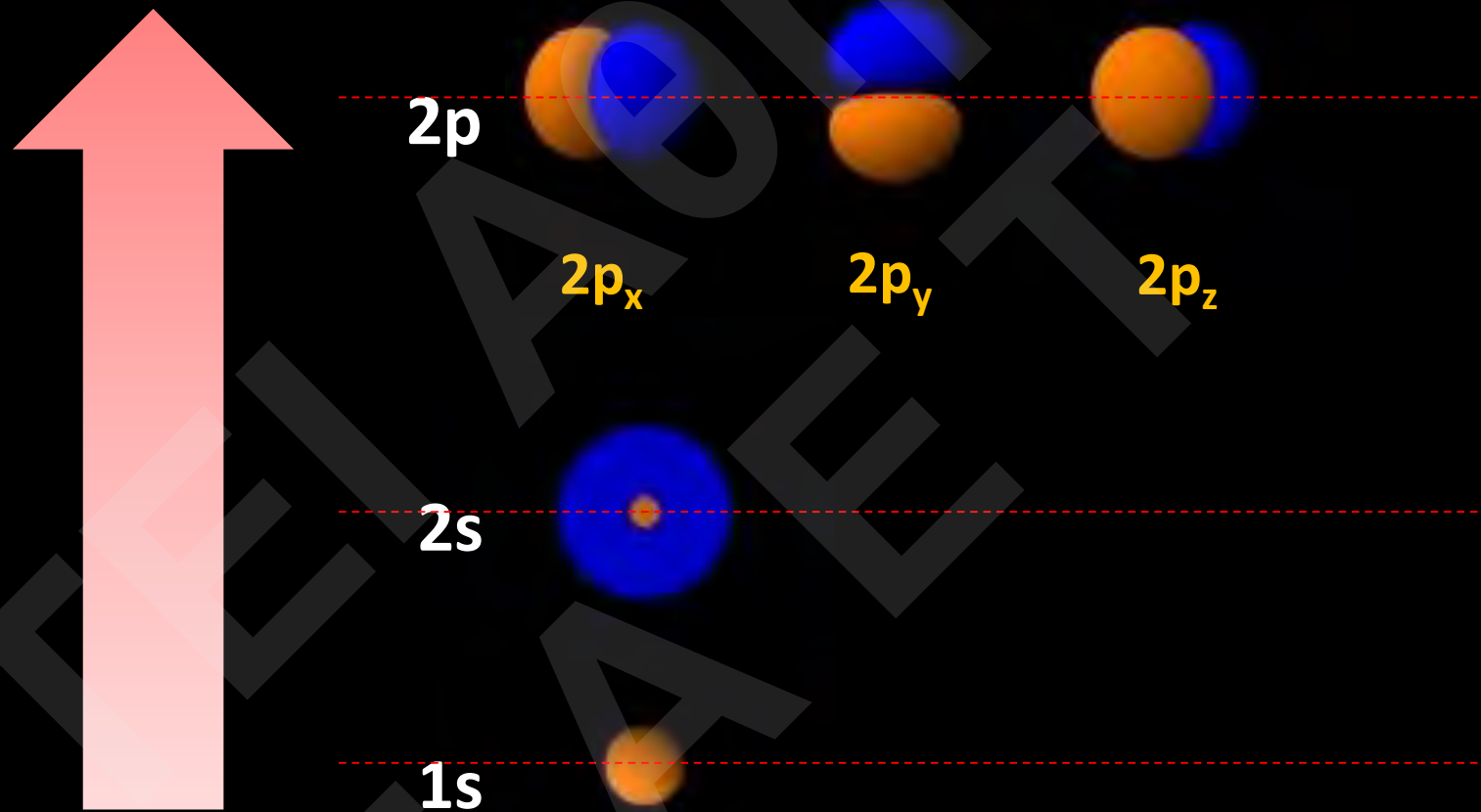


Τα άτομα του οξυγόνου πρέπει να υπακούουν στον κανόνα της οκτάδας

Ατομικά Τροχιακά

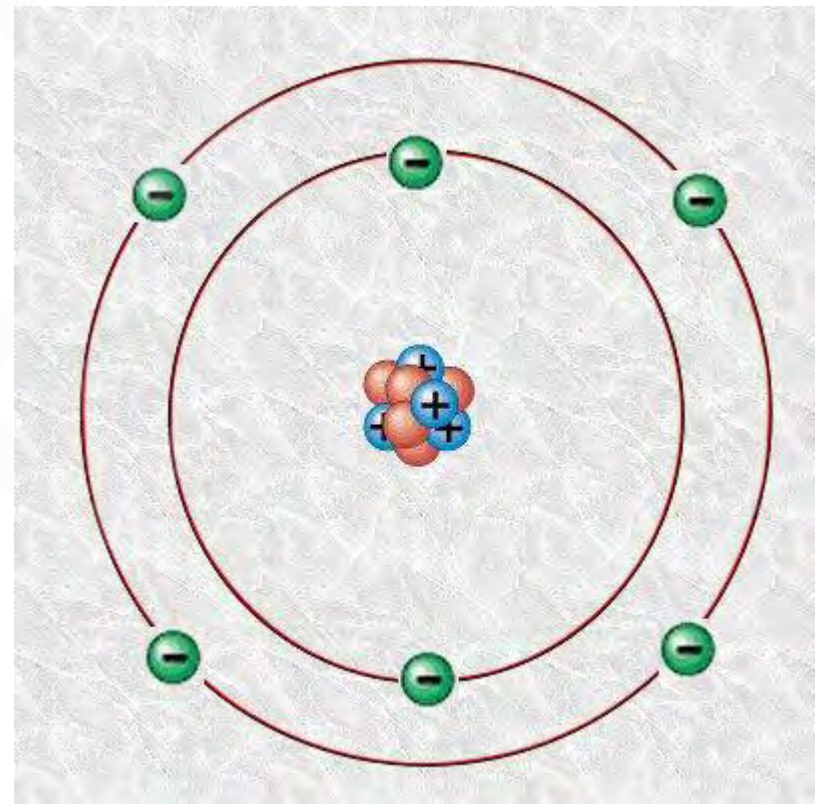


Σχετική ενέργεια των ατομικών τροχιακών



Ο άνθρακας

13 IIIA	14 IVA	15 VA
5 B Βόριο 10.811	6 C Άνθρακας 12.0107	7 N Άζωτο 14.00674
13 Al Αργίλιο 26.981538	14 Si Πυρίτιο 28.0855	15 P Φωσφόρος 30.97376
31 Ga	32 Ge	33 As



Άνθρακας



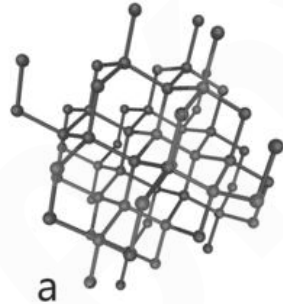
διαμάντι



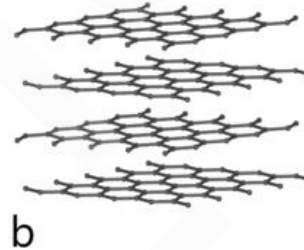
γραφίτης

Άνθρακας: αλλοτροπικές μορφές

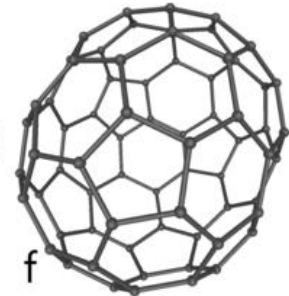
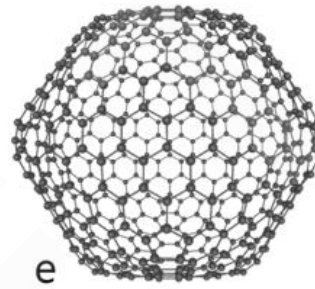
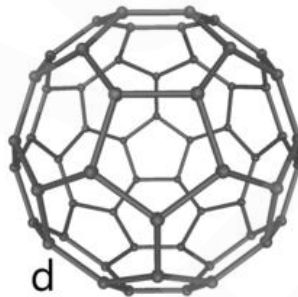
Διαμάντι



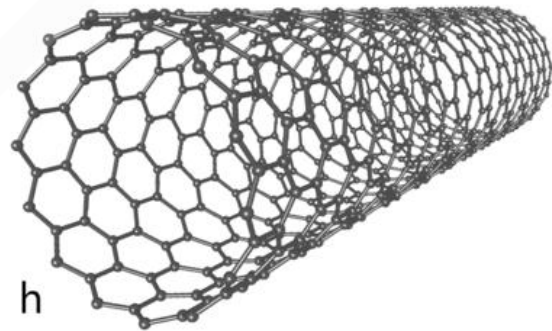
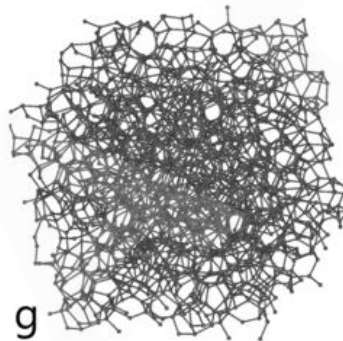
γραφίτης



φουλλερένια (C₆₀, C₅₄₀, C₇₀)



Άμορφος άνθρακας

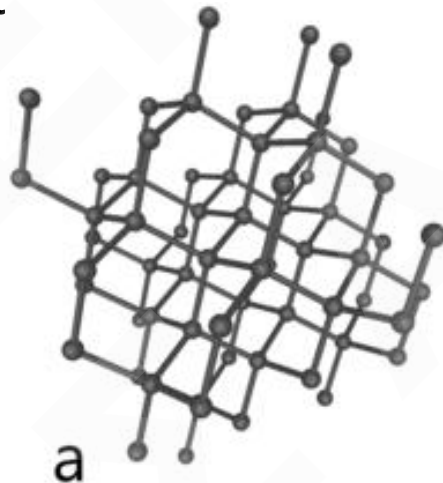


Νανοσωλήνες άνθρακα

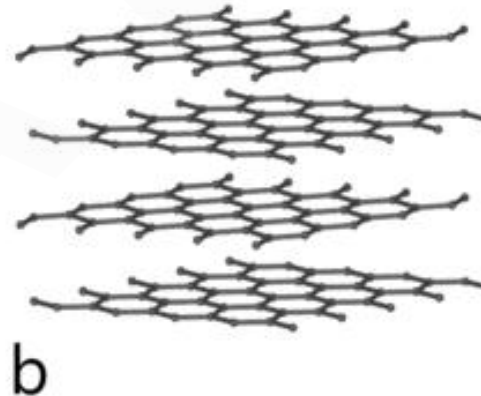
Δεσμοί μεταξύ ατόμων άνθρακα

- Στις μορφές του στοιχειακού άνθρακα που είδαμε υπάρχουν μοριακοί δεσμοί μεταξύ ατόμων άνθρακα (C-C)
- Οι δεσμοί αυτοί, ανάλογα με το είδος τους καθορίζουν τις μορφές του άνθρακα
- Στο **διαμάντι** κάθε άτομο C έχει τετραεδρική γεωμετρία
- Στον **γραφίτη** κάθε άτομο C αποκτά επίπεδη τριγωνική γεωμετρία

Διαμάντι

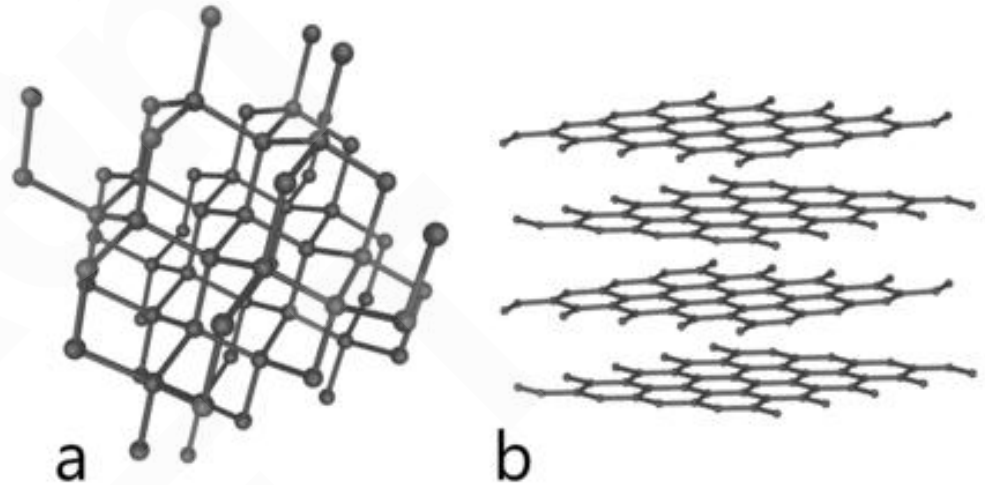


Γραφίτης

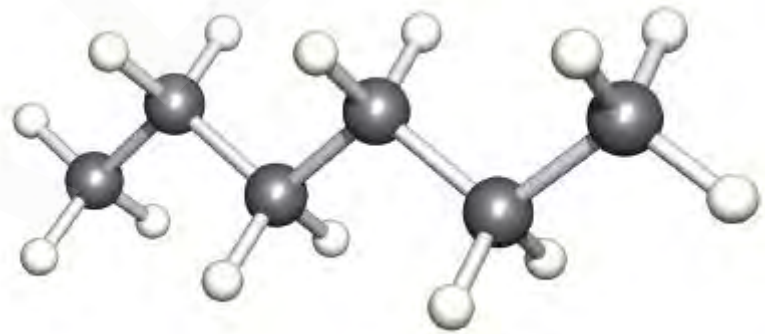


Πώς ερμηνεύονται οι δομές και η δραστηκότητα των μορίων;

- Πώς ερμηνεύεται η δομή του γραφίτη και του διαμαντιού;



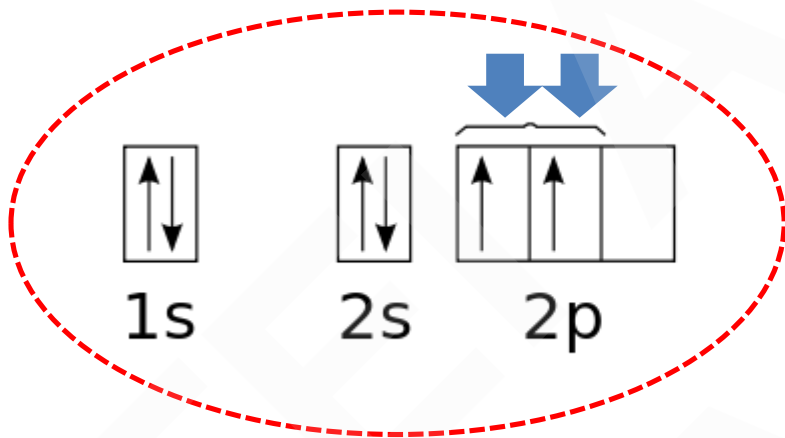
- Πώς ερμηνεύεται η δομή των μορίων κάθε οργανικής χημικής ένωσης;



Ατομικά τροχιακά του άνθρακα

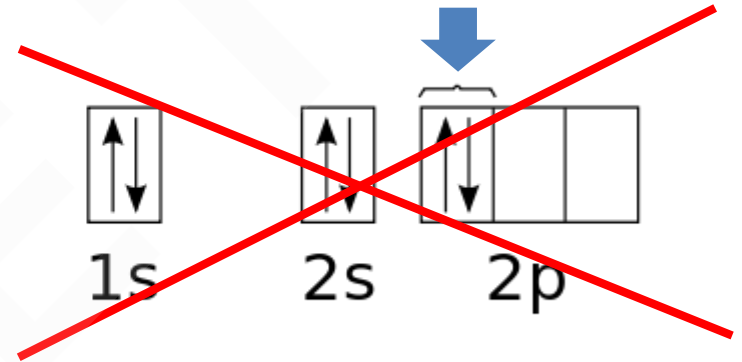
ποια είναι η σωστή περιγραφή;

Δύο ηλεκτρόνια σε δύο τροχιακά:
έχουν περισσότερο χώρο – η
άπωση είναι μικρότερη



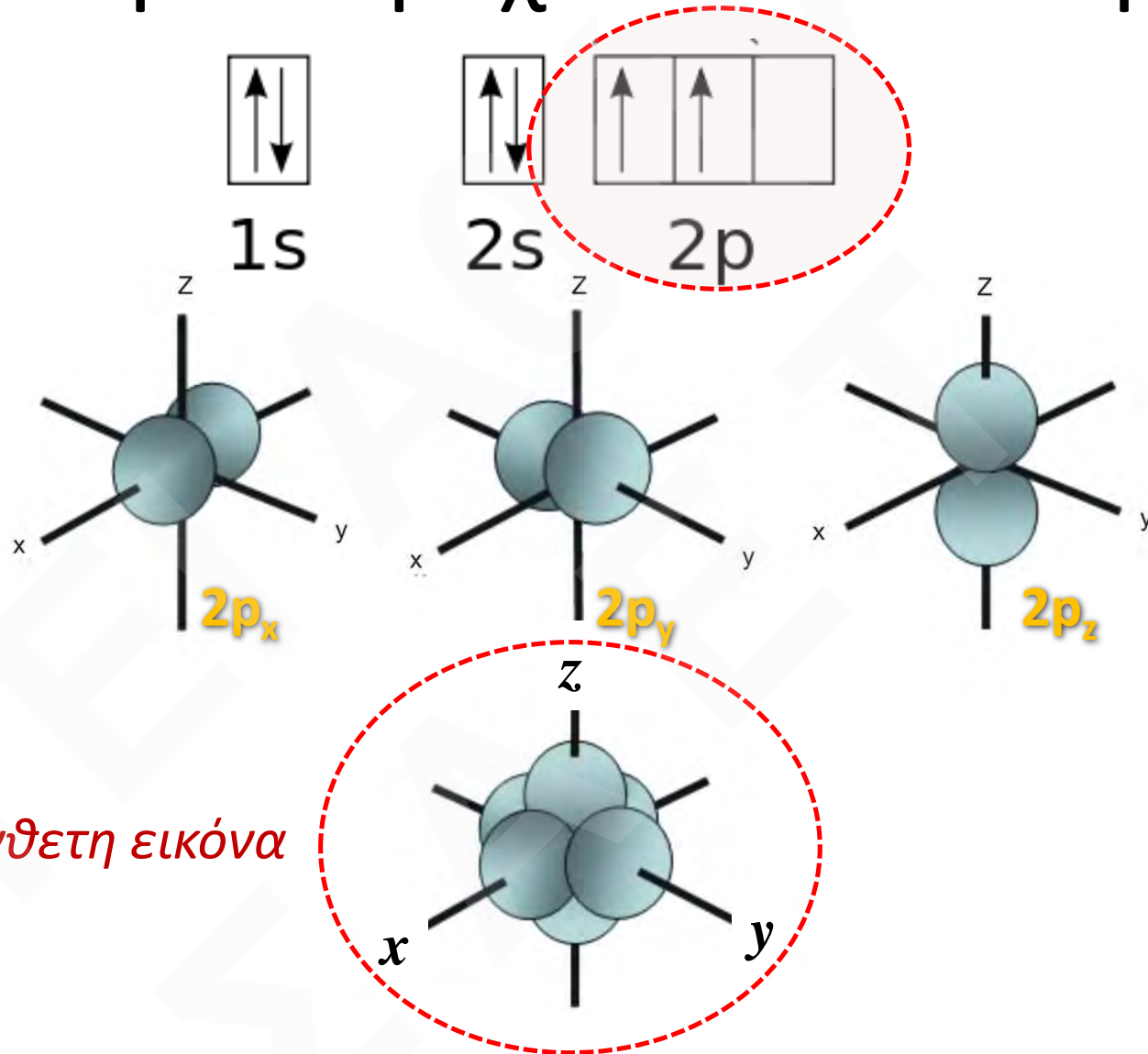
Σωστή περιγραφή

Δύο ηλεκτρόνια σε ένα
τροχιακό είναι
στριμωγμένα και
απωθούνται

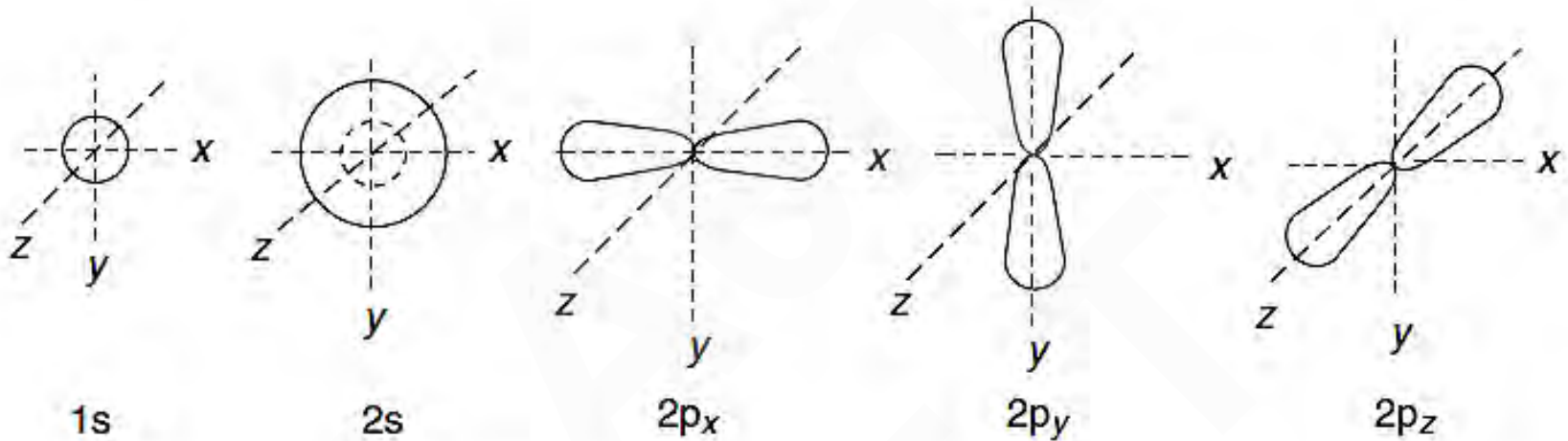


Λανθασμένη περιγραφή

2p ατομικά τροχιακά του άνθρακα

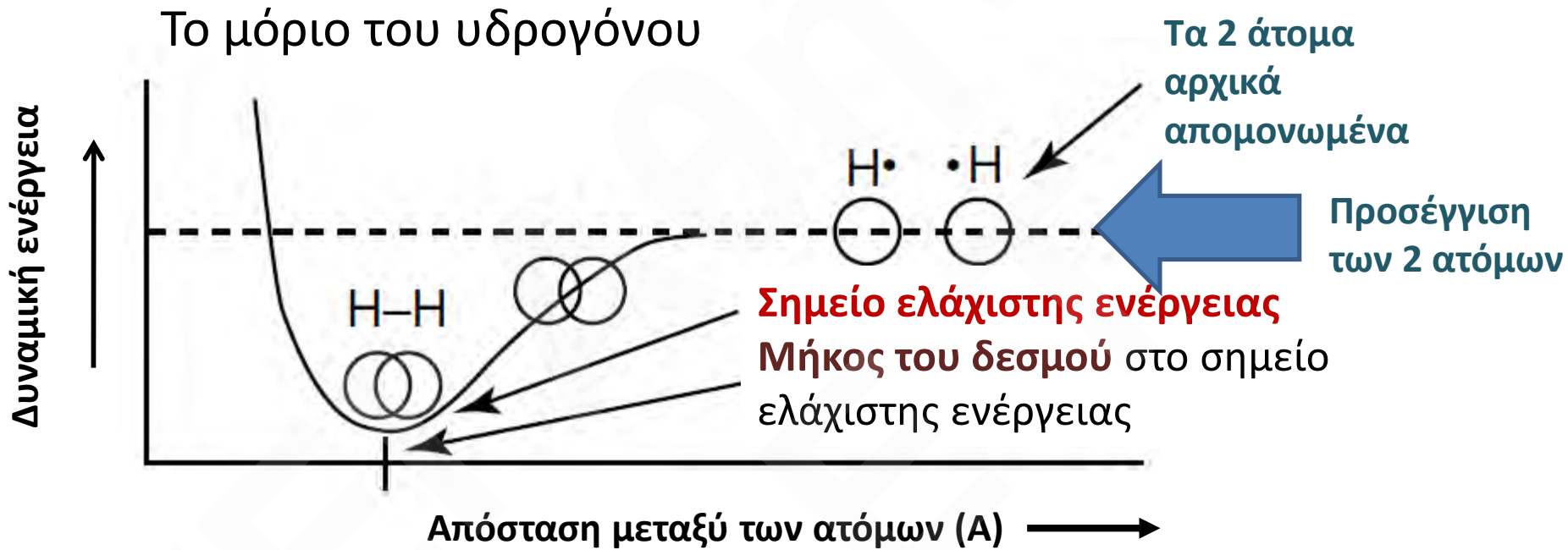


Σε ένα μόριο, όλα τα τροχιακά
είναι μοριακά;

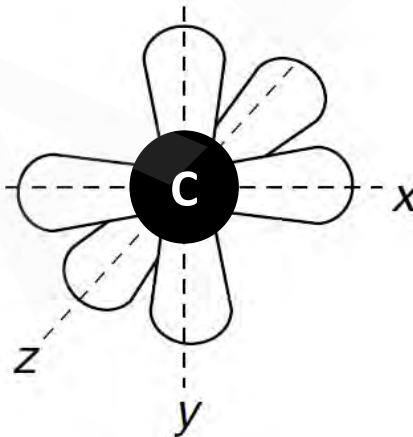
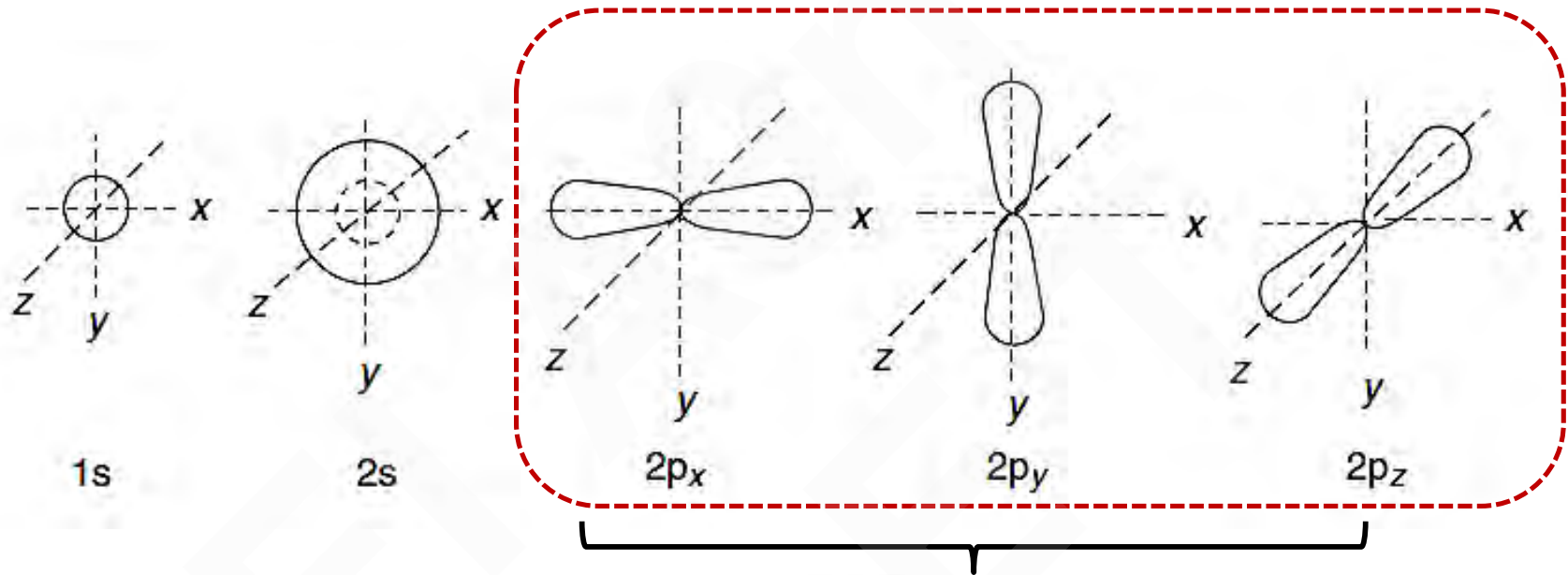


Τα ηλεκτρόνια που δεν συμμετέχουν σε δεσμούς
κατοικούν σε **ατομικά** τροχιακά

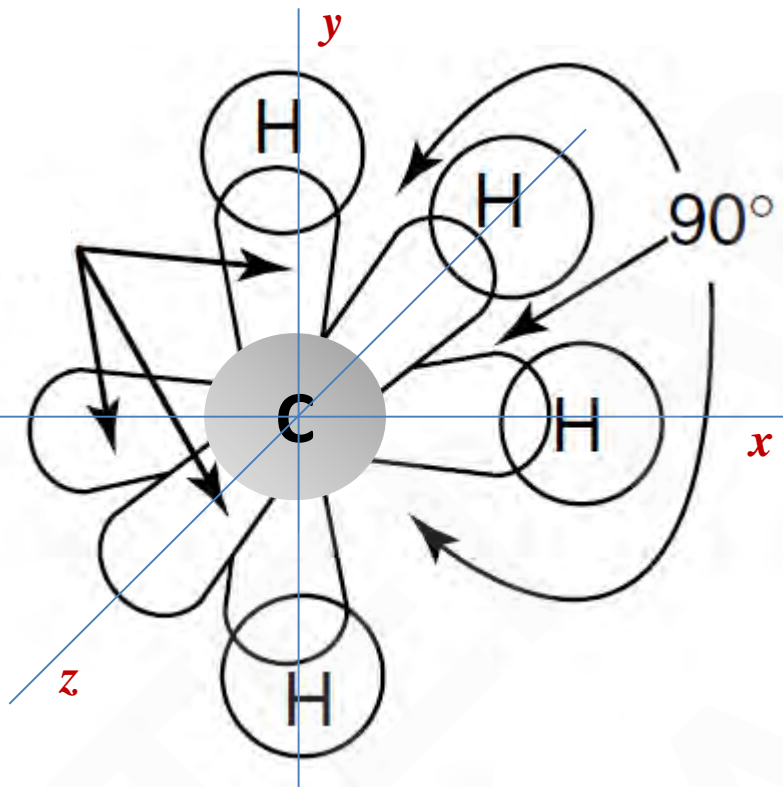
Πώς σχηματίζονται οι δεσμοί;



Τροχιακή εικόνα του ατόμου του άνθρακα



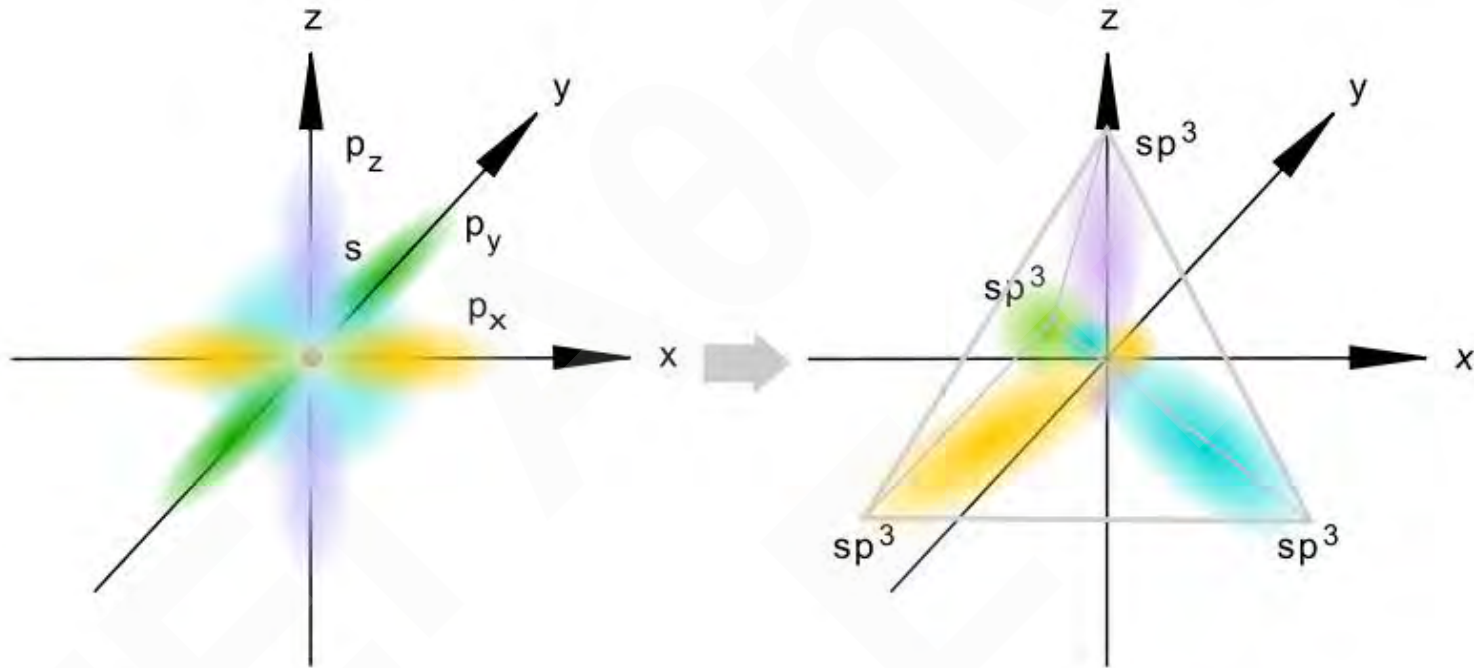
Πώς σχηματίζονται οι δεσμοί C-H;



- Πώς θα σχηματίζονταν δεσμοί μεταξύ H και ατομικών τροχιακών του C;
- Επικάλυψη μεταξύ των τριών **p** ατομικών τροχιακών του άνθρακα και των τεσσάρων **s** τροχιακών τεσσάρων ατόμων υδρογόνου

Είναι όμως αυτή η πραγματική διάταξη του μορίου του μεθανίου;

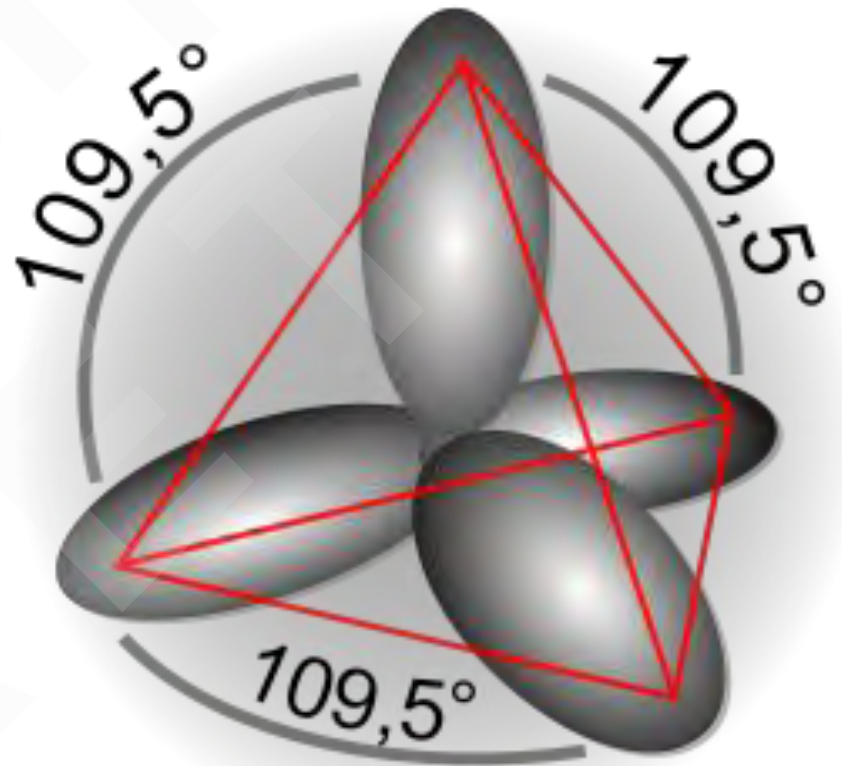
Ο άνθρακας sp^3



- Ο άνθρακας μπορεί να αποκτήσει υβριδισμό sp^3 .
- Τα 4 (πρώην) ατομικά τροχιακά του **υβριδίζονται** (=ομογενοποιούνται) με σκοπό να σχηματίσουν σταθερότερους δεσμούς.

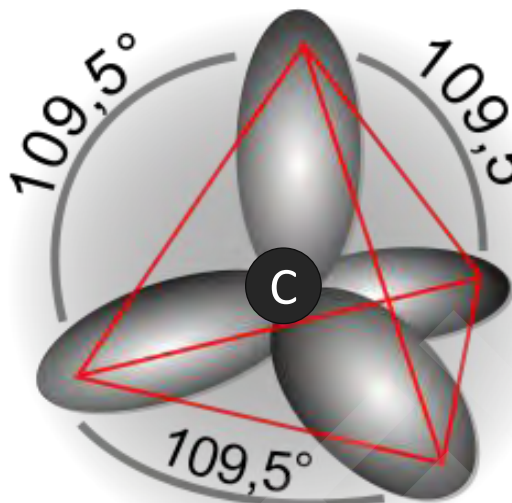
Ο άνθρακας sp^3

- Ο άνθρακας μπορεί να αποκτήσει υβριδισμό sp^3 .
- Σχηματίζονται 4 ισοδύναμα υβριδικά τροχιακά sp^3
- Η γεωμετρία των τροχιακών καθορίζει την κατεύθυνση των δεσμών που θα σχηματιστούν



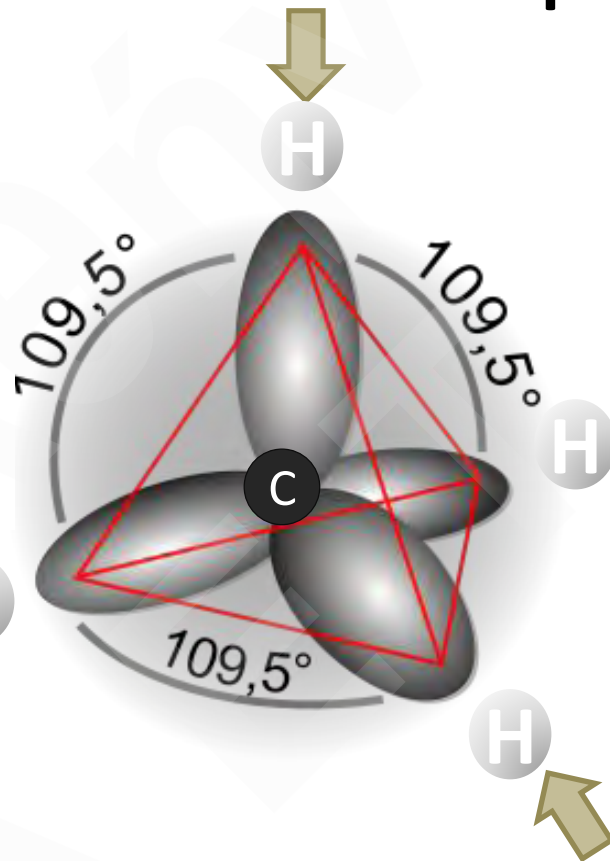
["Sp3-Orbital"](#), by [Sven](#)
available under [CC BY-SA 3.0](#)

Πώς σχηματίζονται οι δεσμοί C-H;



Τέσσερα sp^3
ατομικά τροχιακά
σε τετραεδρική
διάταξη

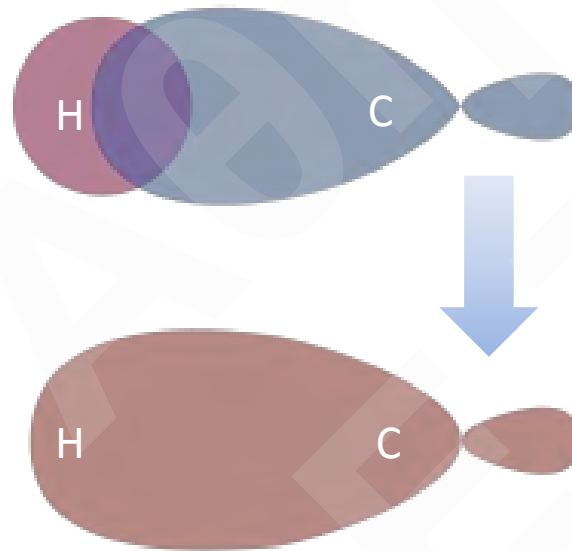
Προσέγγιση
τεσσάρων
ατόμων H



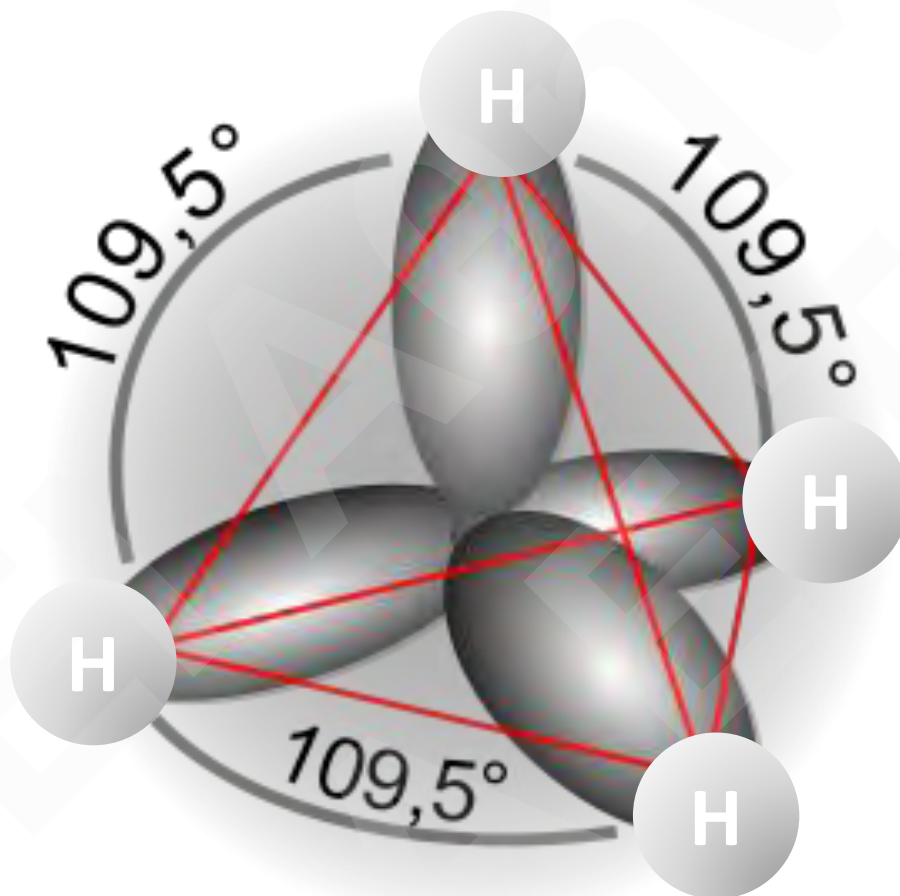
Συνδυασμός
των τεσσάρων
 sp^3 και των
τεσσάρων s
τροχιακών

σχηματίζονται **τέσσερα**
όμοια **μοριακά**
τροχιακά με
συμμετρία σ

Σχηματισμός μοριακού τροχιακού σ μεταξύ άνθρακα και υδρογόνου



Το τετραεδρικό μόριο του μεθανίου

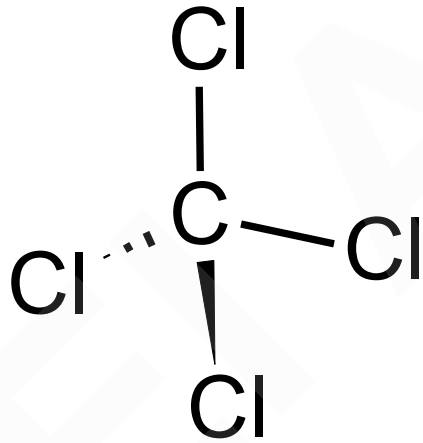


Η πραγματική διάταξη του μορίου του μεθανίου στο χώρο: ένα τετράεδρο

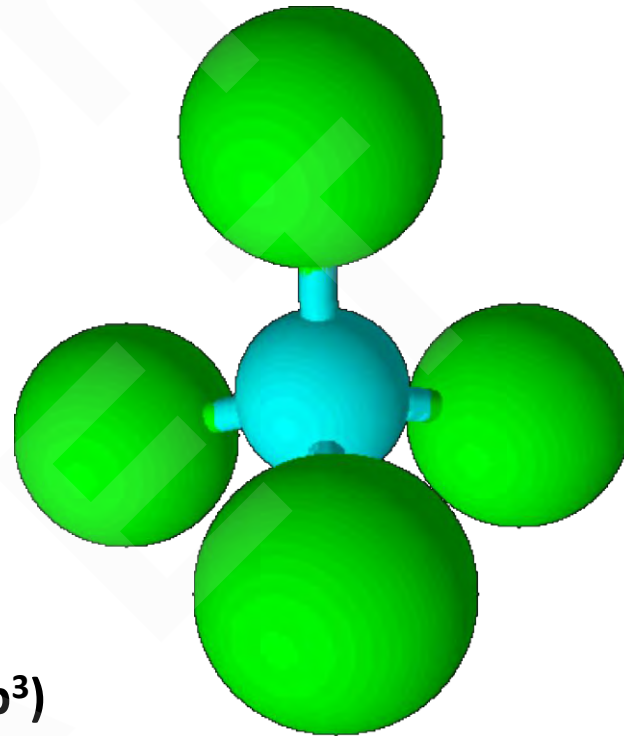


- Οι κορεσμένες οργανικές ενώσεις αποτελούνται μόνο από τετραεδρικούς άνθρακες (με υβρίδια sp^3).

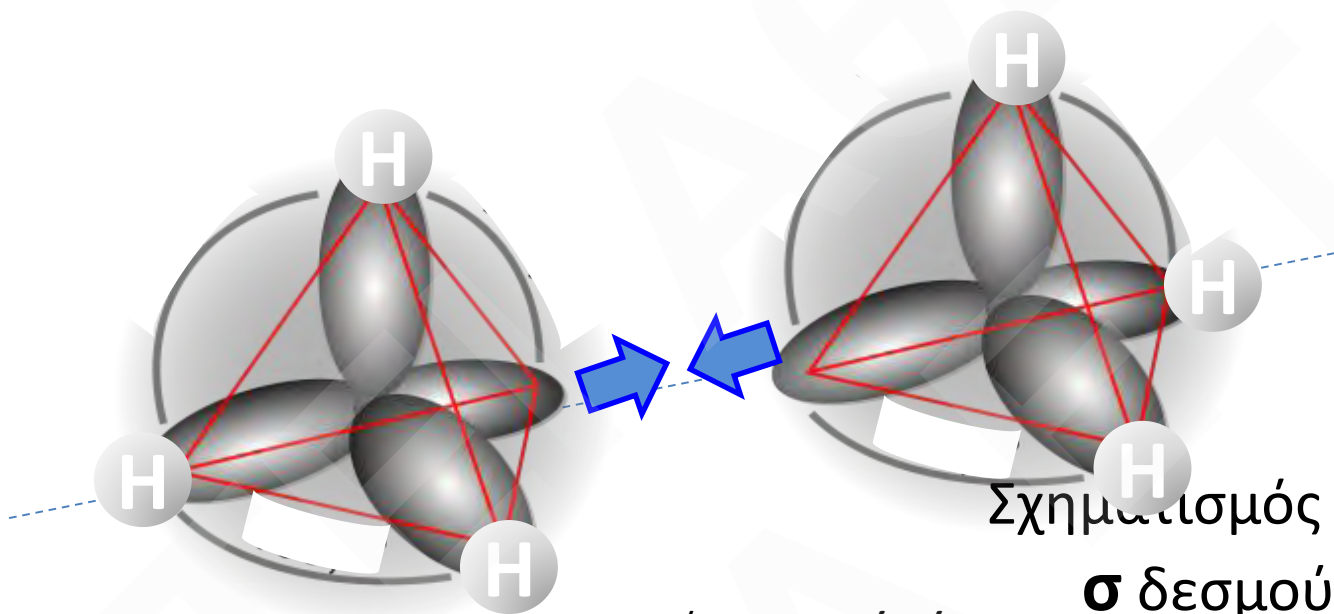
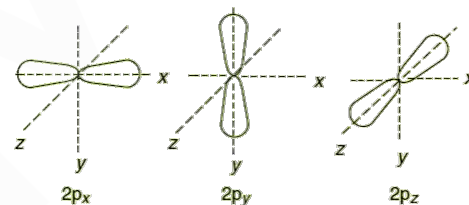
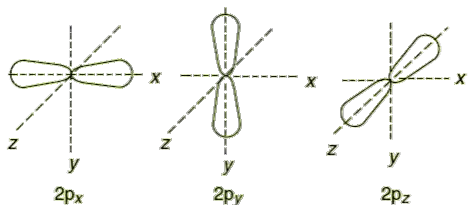
Τετραχλωρομεθάνιο: ένα τέλειο τετράεδρο



τετραεδρικός άνθρακας (sp^3)



Πώς σχηματίζονται οι δεσμοί C-C;



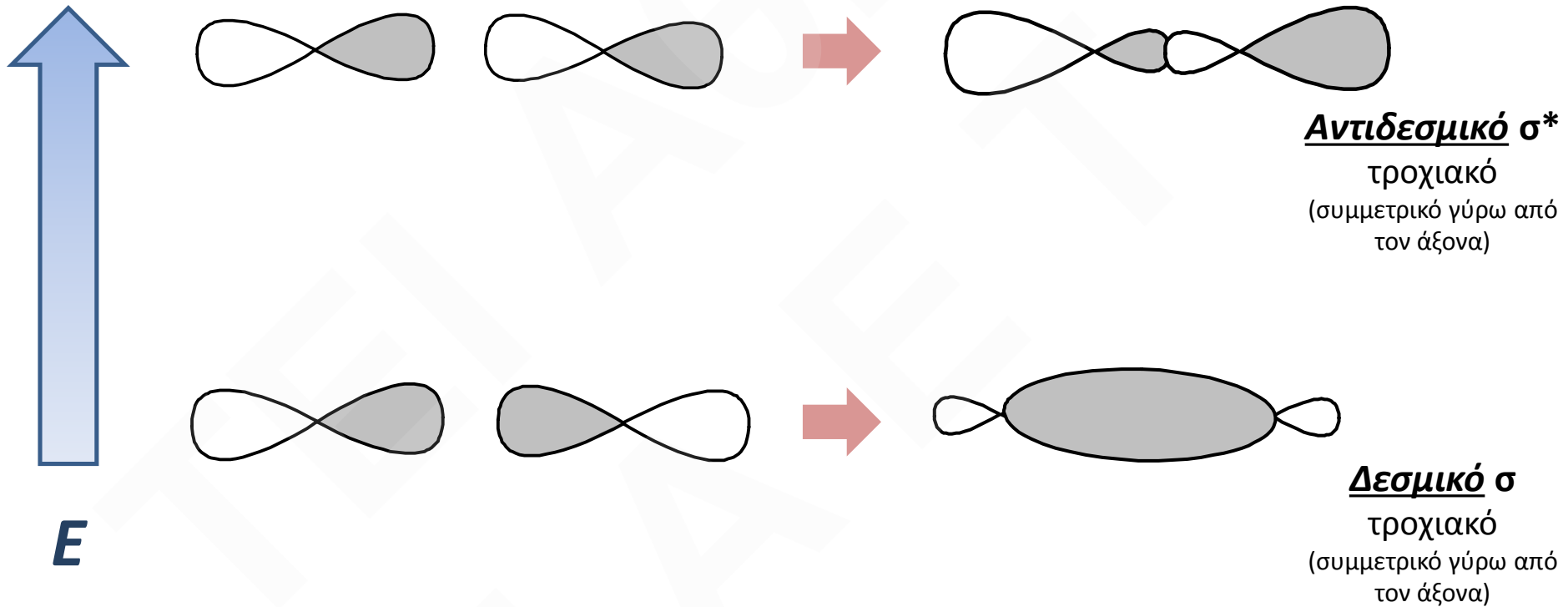
Προσέγγιση *κατά μήκος* του άξονα κίνησης.



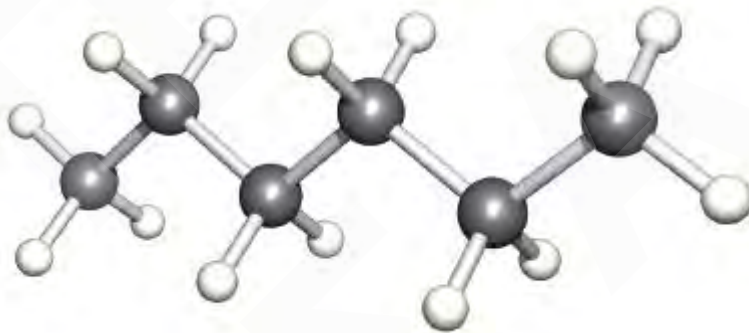
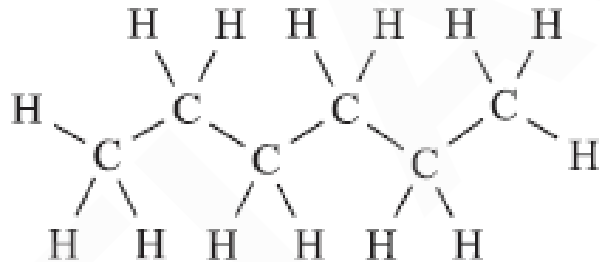
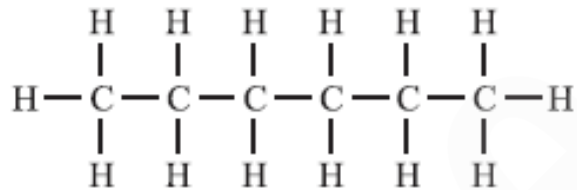
Επικάλυψη μεταξύ p ατομικών τροχιακών:
Υπάρχουν **δύο** **τρόποι** προσέγγισης:

- (α) *κατά μήκος* του άξονα κίνησης
- (β) *κάθετα* προς τον άξονα κίνησης

Σχηματισμός δεσμού C – C: Προσέγγιση *κατά μήκος* του άξονα κίνησης.

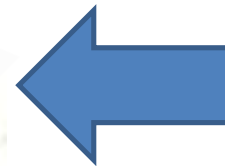


Ανθρακικές αλυσίδες

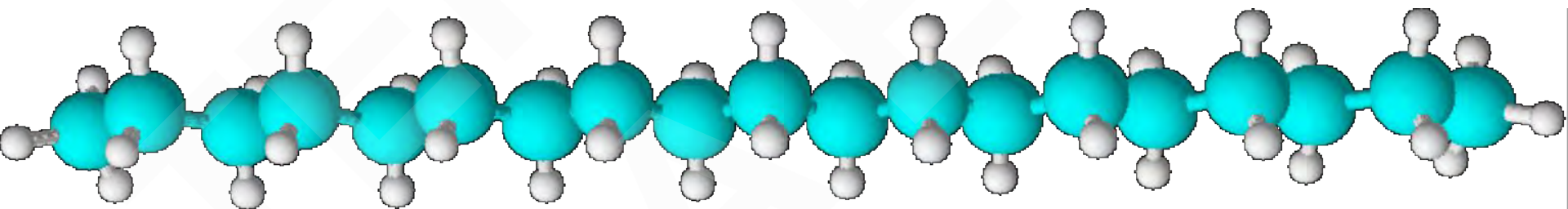
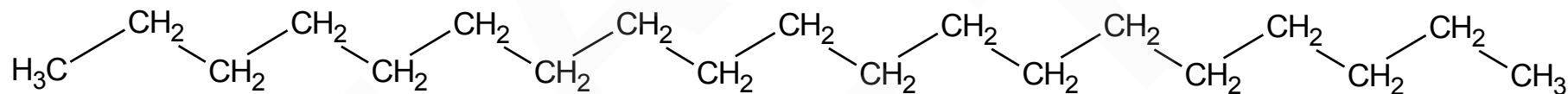


- Η 'ευθεία' αλυσίδα του *n*-εξανίου

Έξι τετραεδρικοί (sp^3) άνθρακες

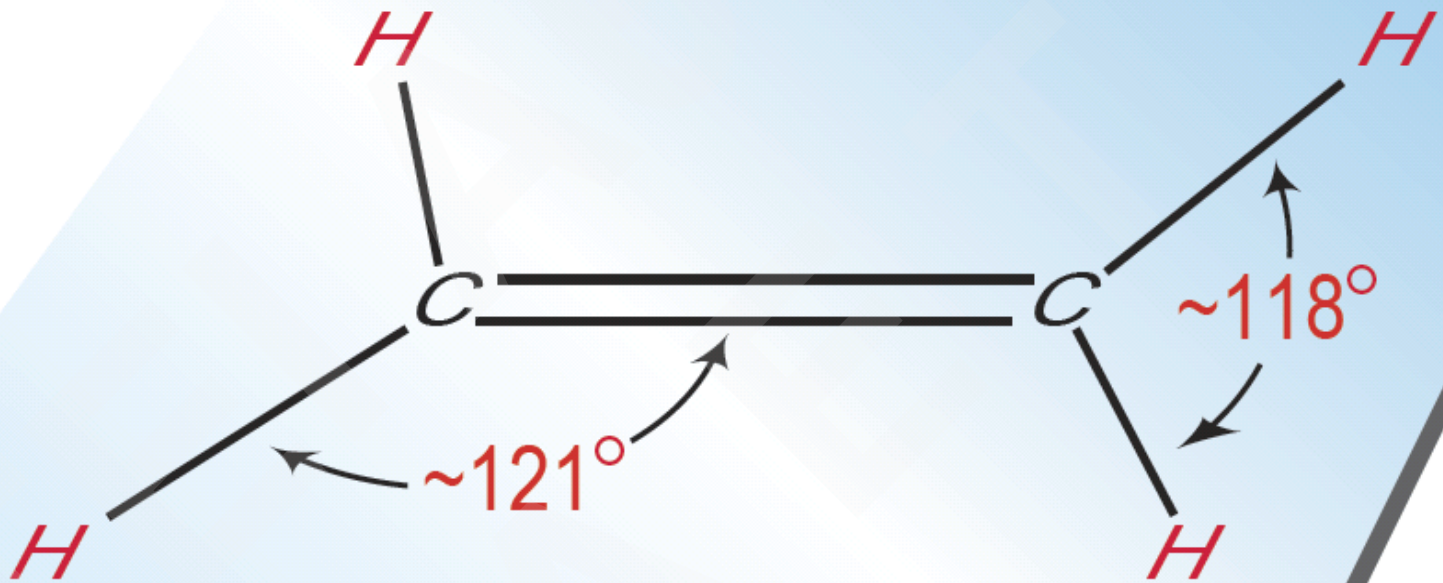


Μεγαλύτερες αλυσίδες: εικοσάνιο

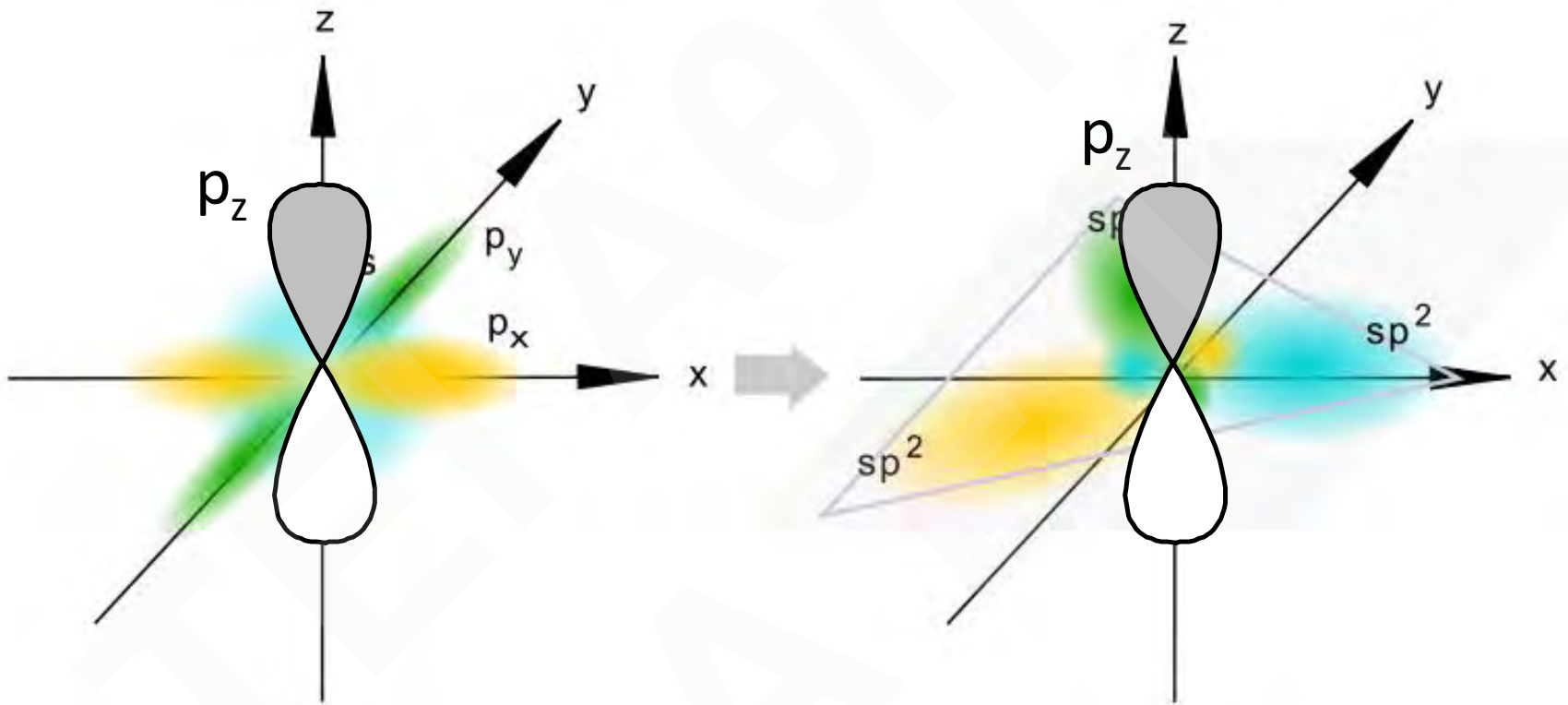


Είκοσι τετραεδρικοί (sp^3) άνθρακες

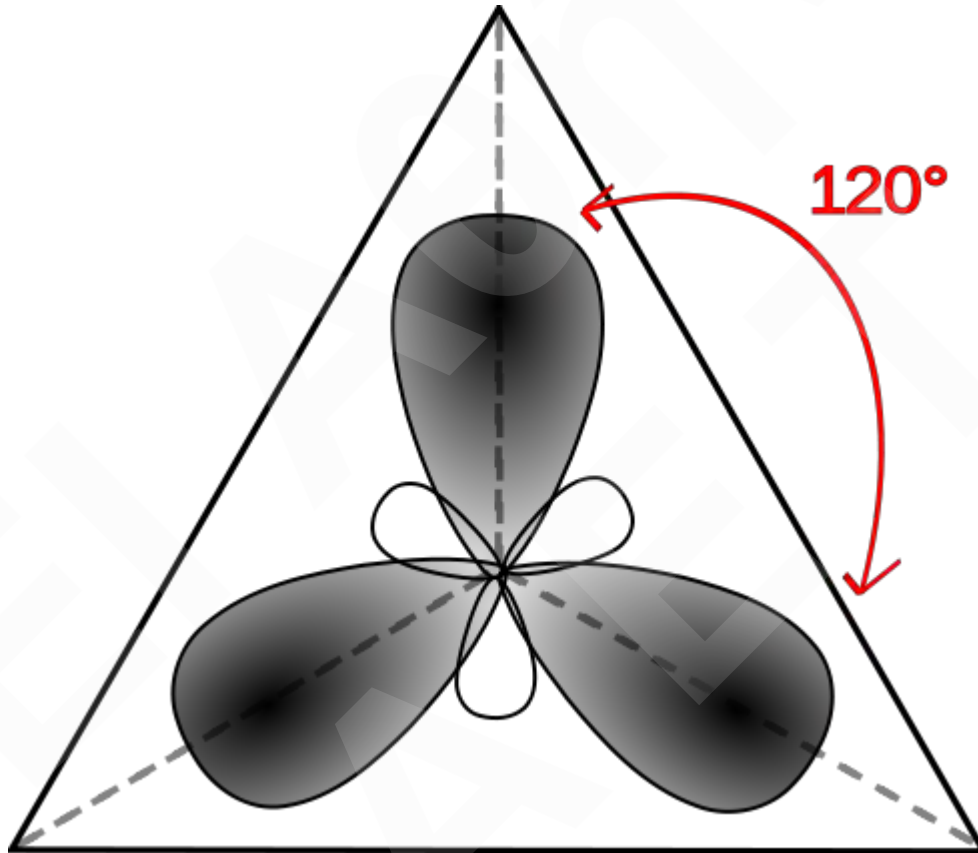
Το αιθυλένιο: ο πρώτος αντιπρόσωπος των ακόρεστων ενώσεων



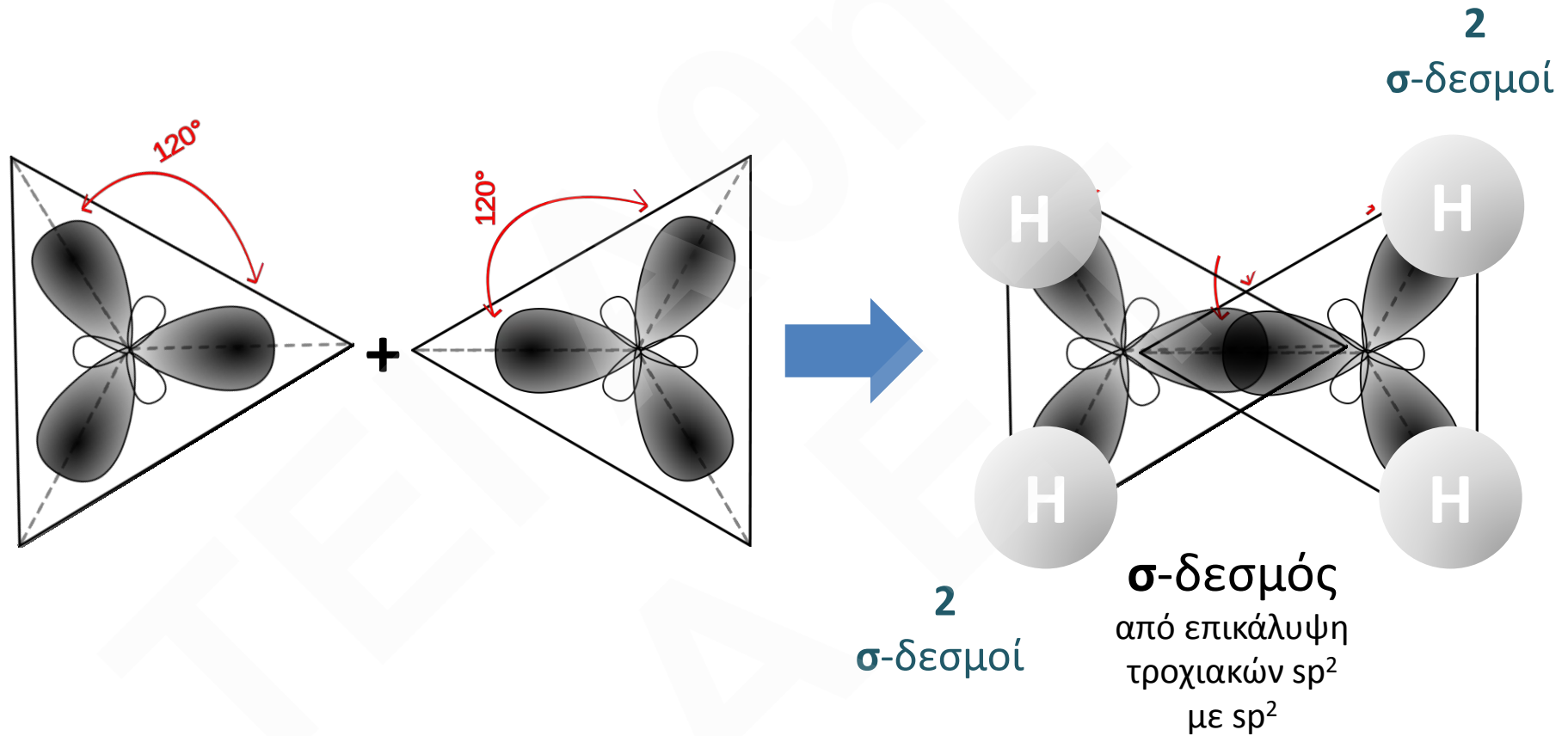
Ακόρεστες ενώσεις: Υβριδισμός τροχιακών: sp^2



Ακόρεστες ενώσεις: Υβριδισμός τροχιακών: sp^2

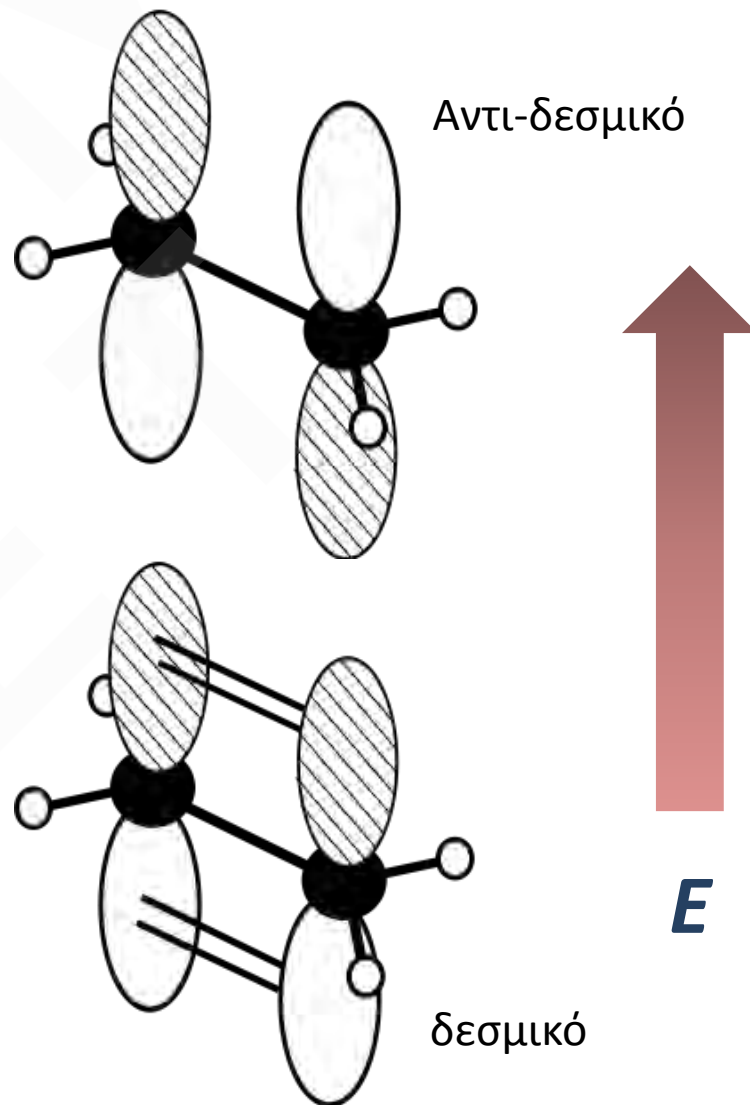
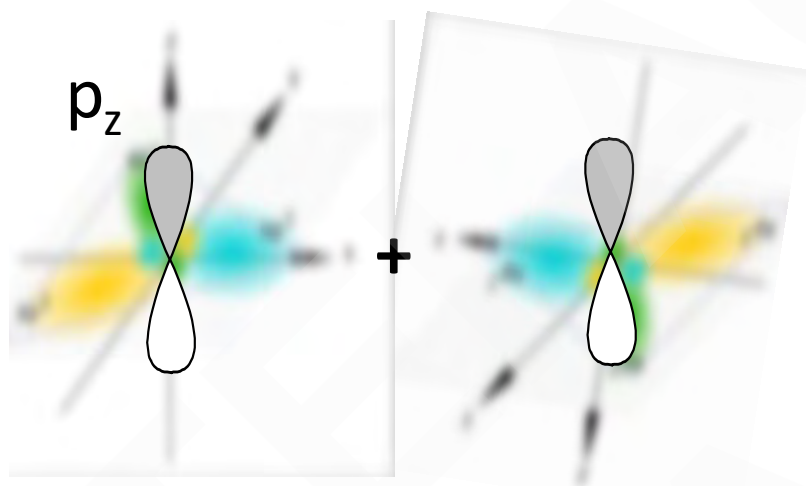


σ-δεσμοί από sp^2 τροχιακά

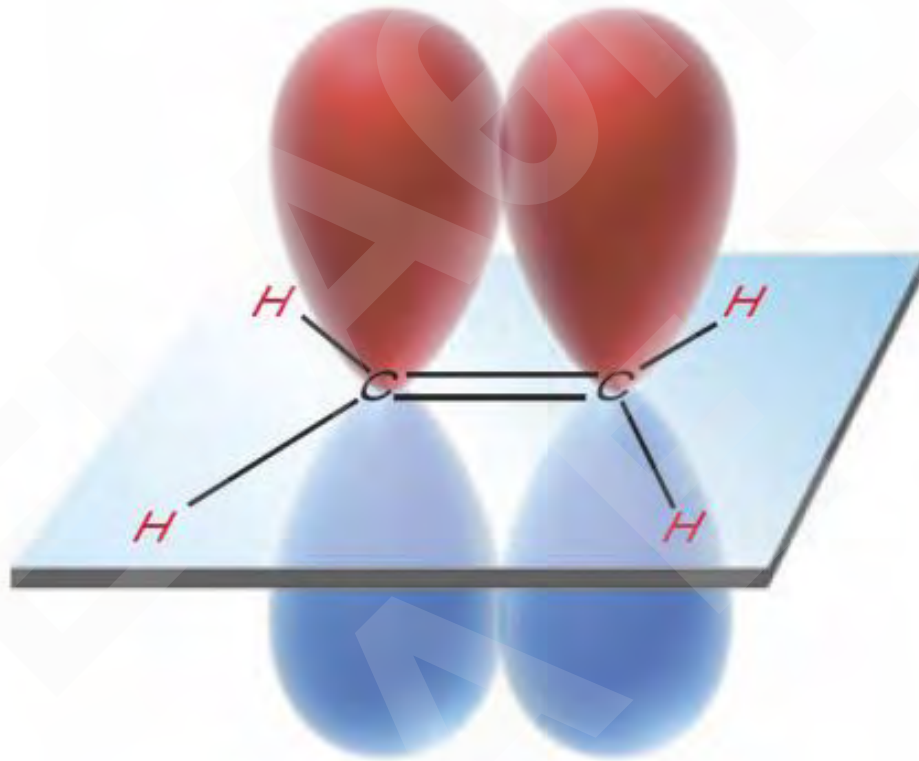


π-δεσμοί από p ατομικά τροχιακά

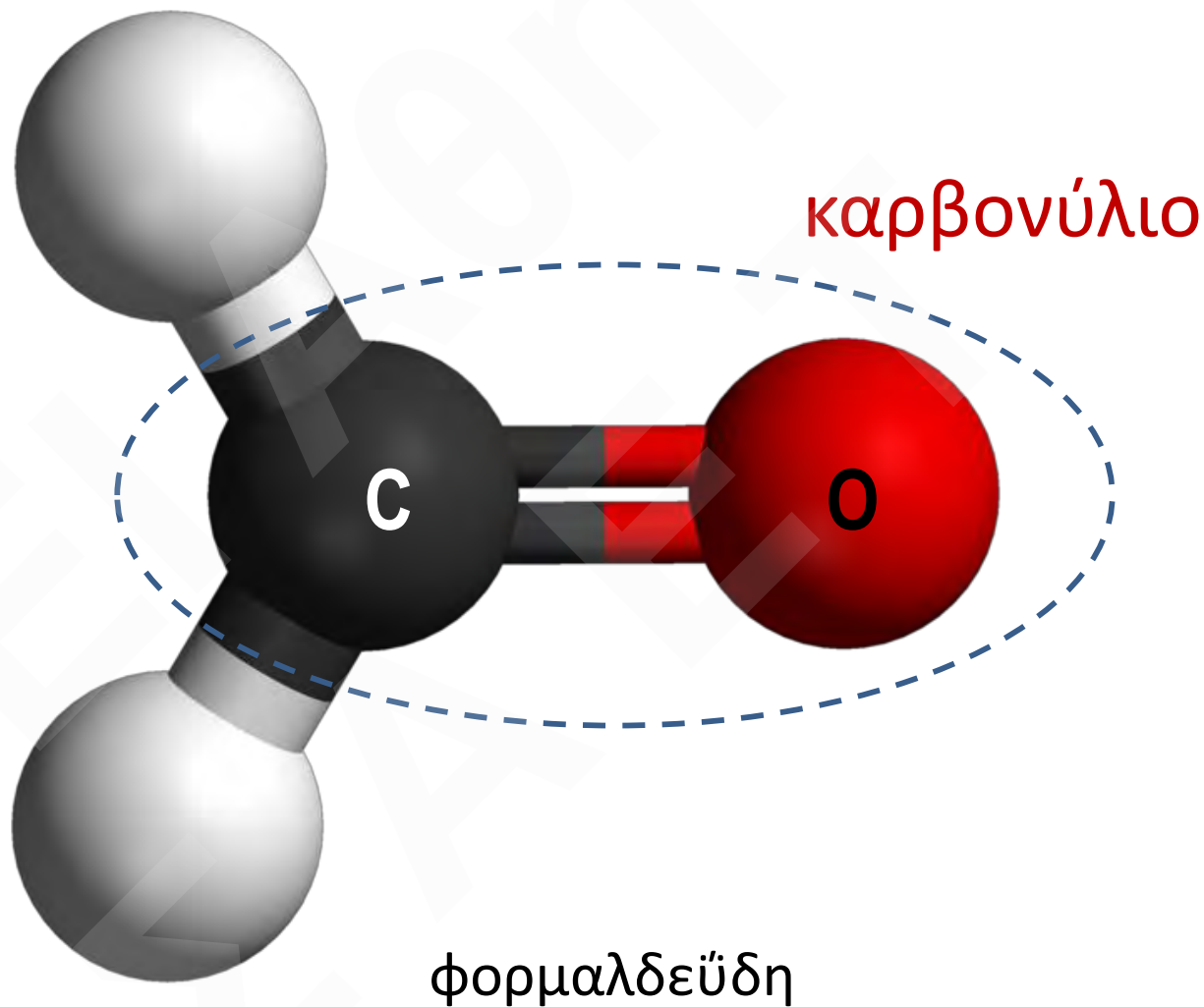
π- ατομικό τροχιακό (δεν έχει υποστεί υβριδισμό)



π-δεσμοί μεταξύ 2 ανθράκων



π-δεσμοί μεταξύ άνθρακα και οξυγόνου



Βιβλιογραφία

- **A. Βάρβογλη. ΕΠΙΤΟΜΗ ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ**

Εκδόσεις Ζήτη, 2005.

Εύδοξος: Βιβλίο [10998]

- **J. McMurry, Οργανική Χημεία**

Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, (σε ένα τόμο), 1998.

Εύδοξος: Βιβλίο [22689357]