

ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑ, ΔΕΣΜΟΙ & ΜΟΡΙΑΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

DAVID KLEIN

Οργανική Χημεία

ΓΙΑ ΤΙΣ ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ ΤΗΣ ΖΩΗΣ



Πρώτη Έκδοση - Πρώτη Έκδοση
Δόρυφοι Κλειστού
Καθηγητής Οργανικής Χημείας
Πανεπιστήμιο Κρήτης - Βιοχημικό Τμήμα

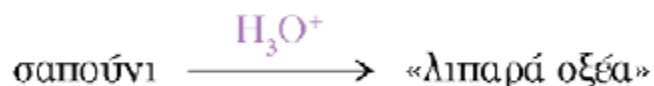
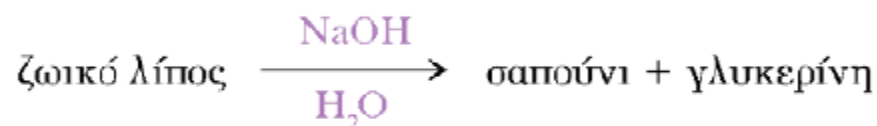
Utopia

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

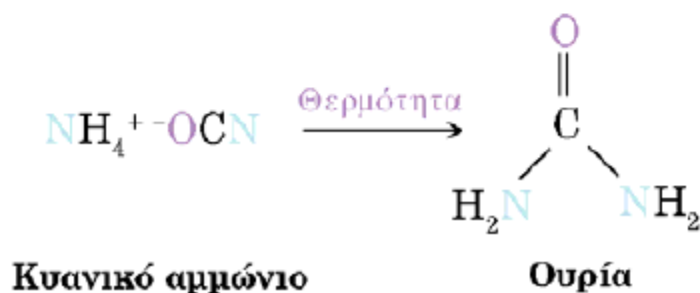
1780: ΑΝΟΡΓΑΝΕΣ ΕΝΩΣΕΙΣ - ΟΡΓΑΝΙΚΕΣ ΕΝΩΣΕΙΣ

Ζωική Δύναμη Vis Vitalis Vital Force

1816: M. Chevreul:



1828: F. Wohler:



Ατομική Δομή

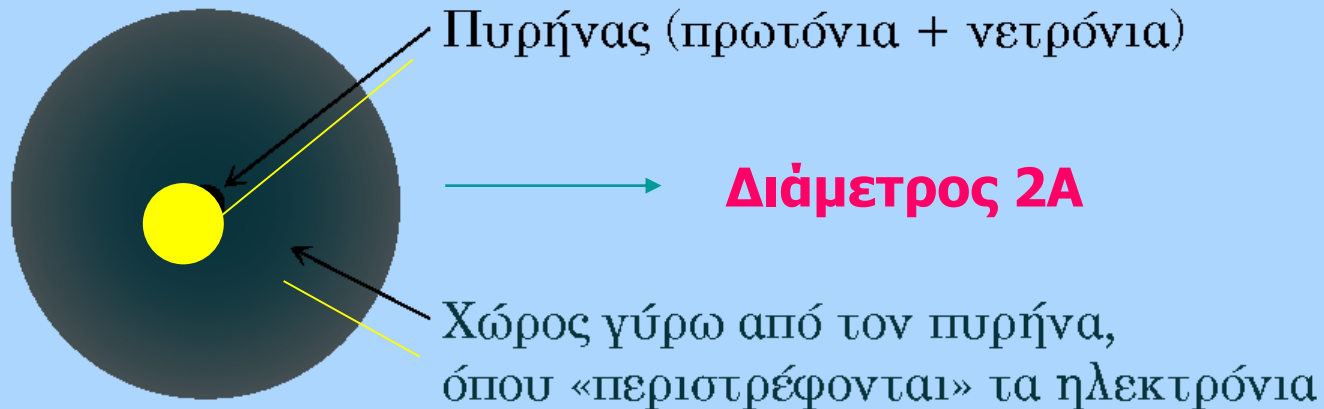
Ο πυρήνας του ατόμου αποτελείται από πρωτόνια και νετρόνια.

Ο αριθμός των πρωτονίων ενός συγκεκριμένου πυρήνα καλείται **ατομικός αριθμός Z** και είναι χαρακτηριστικός για κάθε στοιχείο.

Ο αριθμός των νετρονίων ποικίλει και πολλά στοιχεία απαντούν υπό την μορφή διαφόρων **ισοτόπων**.

ισότοπα άνθρακα: ${}^6\text{C}^{12}$ (~99%), ${}^6\text{C}^{13}$ (~1%),
 ${}^6\text{C}^{14*}$ (σε ίχνη, ραδιενεργό)

Το άθροισμα των πρωτονίων και νετρονίων καλείται **μαζικός αριθμός**. Ο μέσος όρος των μαζικών αριθμών των ισοτόπων ενός στοιχείου αποτελεί το **ατομικό βάρος**.



Σχήμα 1.2 Σχηματική απεικόνιση ενός ατόμου. Ο πυκνός, θετικά φορτισμένος πυρήνας περικλείει το μεγαλύτερο μέρος της ατομικής μάζας και περιβάλλεται από αρνητικά φορτισμένα ηλεκτρόνια.

Τα ηλεκτρόνια έχουν **σωματιδιακή** και **κυματική** φύση.

Υπολογισμός Ηλεκτρονίων Σθένους

- Μπορείτε πάντα να υπολογίσετε τον αριθμό των ηλεκτρονίων σθένους αναλύοντας την ηλεκτρονιακή διαμόρφωση.
- Ή, μόνο για τα στοιχεία της Ομάδας A, απλώς κοιτάξετε τον αριθμό της ομάδας (Λατινικό Αριθμητικό) στον περιοδικό πίνακα.

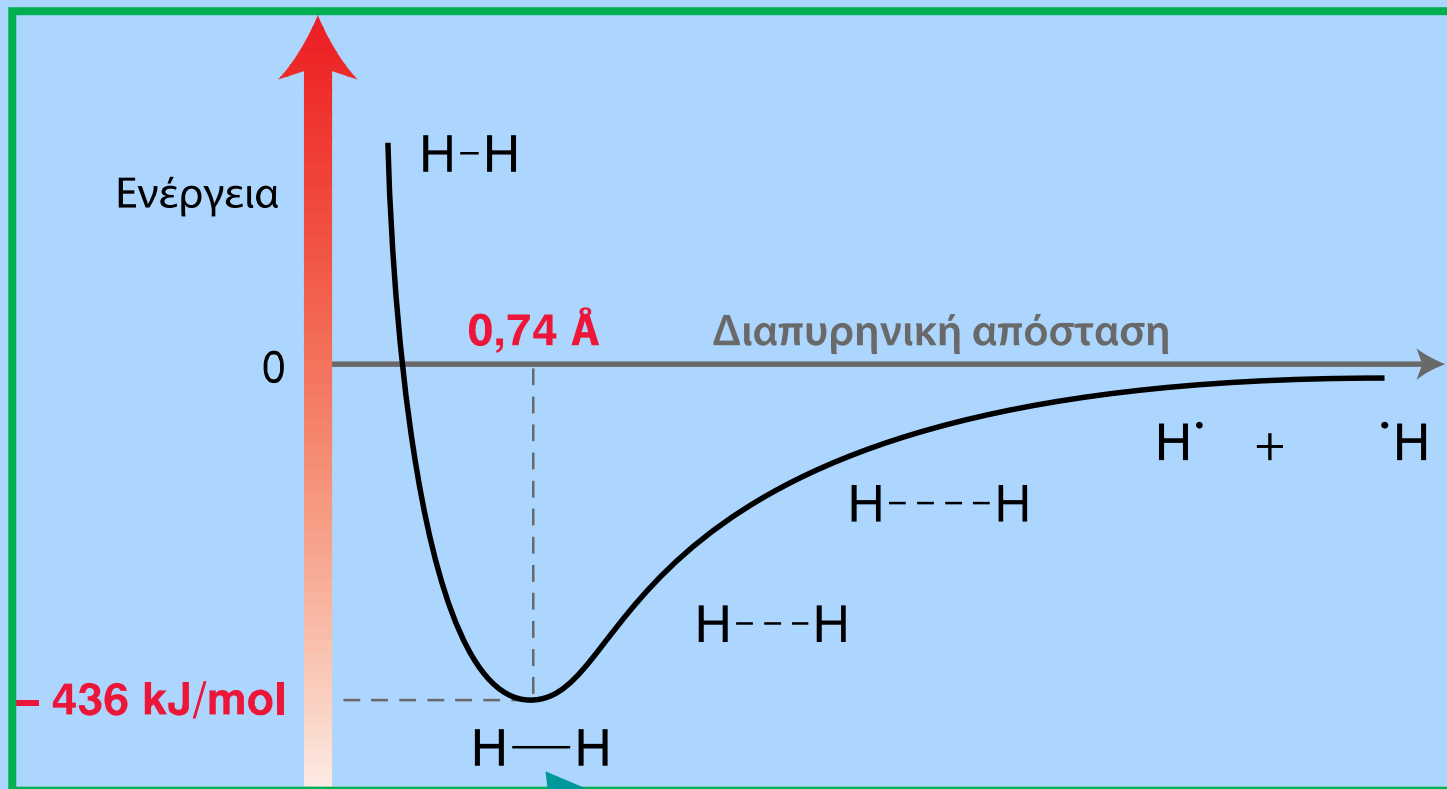
| | | | | | | | | | | |
|----|----|--|--|--|--|--|--|--|--|----|
| 1A | | | | | | | | | | 8A |
| H | 2A | | | | | | | | | He |
| Li | Be | | | | | | | | | Ne |
| Na | Mg | | | | | | | | | Ar |
| K | Ca | | | | | | | | | Kr |
| Rb | Sr | | | | | | | | | Xe |
| Cs | Ba | | | | | | | | | Rn |

Στοιχεία
Μετάλλων
Μεταπτώσεως

Ομοιοπολικός Δεσμός

Ο ομοιοπολικός δεσμός είναι ένα ΖΕΥΓΟΣ ηλεκτρονίων που μοιράζονται μεταξύ δύο ατόμων (G. Lewis 1916).

Για παράδειγμα...



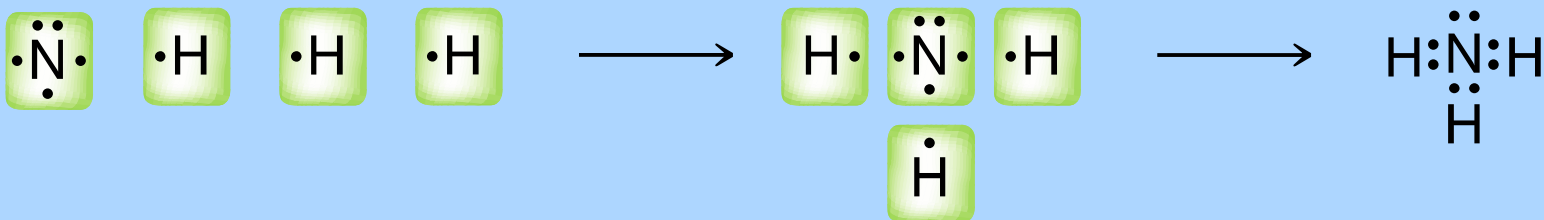
Ελκτικές Δυνάμεις και Απωστικές Δυνάμεις

Απλές Δομές Lewis

■ Για Απλές Δομές Lewis...

1. Σχεδιάστε τα μεμονωμένα άτομα χρησιμοποιώντας κουκίδες για να αναπαραστήσετε τα ηλεκτρόνια σθένους.
2. Ενώστε τα άτομα ώστε να μοιράζονται **ΖΕΥΓΗ** ηλεκτρονίων για να σχηματίσετε πλήρεις οκτάδες.

■ Ας δούμε την NH_3 , για παράδειγμα...



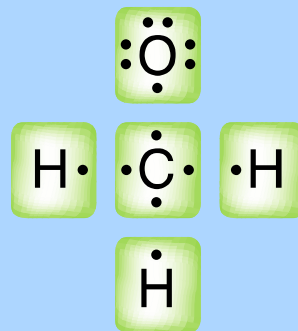
Κανόνας της Οκτάδας (Ηλεκτρονιακή Δομή Ευγενούς Αερίου)

Τυπικό Φορτίο

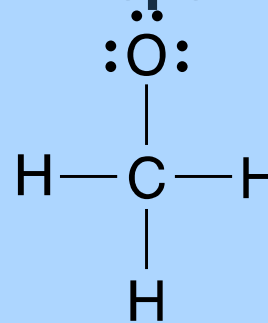
Για να υπολογίσουμε το ΤΥΠΙΚΟ φορτίο ενός ατόμου, συγκρίνουμε τον αριθμό των ηλεκτρονίων σθένους που θα έπρεπε να έχει το άτομο με τον αριθμό των ηλεκτρονίων σθένους που έχει στην πραγματικότητα το άτομο

Εξετάστε το παρακάτω παράδειγμα τυπικού φορτίου. Υπολογίστε το τυπικό φορτίο σε κάθε άτομο.

**Δομή
Lewis**



ή



**Δομή
Kekule**

Το άτομο άνθρακα θα έπρεπε να έχει 4 ηλεκτρόνια σθένους, διότι ανήκει στην ομάδα IVA του περιοδικού πίνακα.

Τα 4 που στην πραγματικότητα έχει ισορροπούν τα 4 που θα έπρεπε να έχει, οπότε δεν έχει τυπικό φορτίο. Είναι ουδέτερο.

- **Αναλύστε το τυπικό φορτίο του ατόμου του οξυγόνου.**



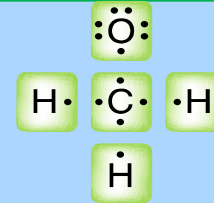
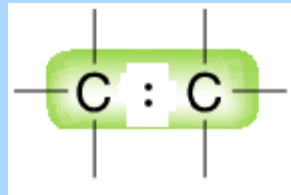
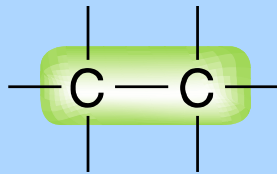
- **Το άτομο του οξυγόνου θα έπρεπε να έχει 6 ηλεκτρόνια σθένους, διότι ανήκει στην ομάδα VIA του περιοδικού πίνακα.**
- **Στην πραγματικότητα υπολογίζονται 7 στο φορτίο του. Έχει τυπικό φορτίο -1.**

Πίνακας 2.2 Μια σύνοψη τυπικών φορτίων στα άτομα.

| Άτομο | C | | | N | | | O | | |
|----------------|---|--|--|--|--|--|--|--|--|
| Δομή | $\begin{array}{c} \text{---} \\ \\ \text{C}^+ \\ \\ \text{---} \end{array}$ | $\begin{array}{c} \\ \text{---} \\ \\ \text{C} \\ \\ \text{---} \end{array}$ | $\begin{array}{c} \text{---} \\ \\ \ddot{\text{C}}^- \\ \\ \text{---} \end{array}$ | $\begin{array}{c} \\ \text{---} \\ \\ \text{N}^+ \\ \\ \text{---} \end{array}$ | $\begin{array}{c} \text{---} \\ \\ \ddot{\text{N}} \\ \\ \text{---} \end{array}$ | $\begin{array}{c} \text{---} \\ \\ \ddot{\text{N}}^- \\ \\ \text{---} \end{array}$ | $\begin{array}{c} \text{---} \\ \\ \ddot{\text{O}}^+ \\ \\ \text{---} \end{array}$ | $\begin{array}{c} \text{---} \\ \\ \ddot{\text{O}} \\ \\ \text{---} \end{array}$ | $\begin{array}{c} \text{---} \\ \\ \ddot{\text{O}}^- \\ \\ \text{---} \end{array}$ |
| Αριθμός δεσμών | 3 | 4 | 3 | 4 | 3 | 2 | 3 | 2 | 1 |
| Μονήρη ζεύγη | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 2 | 1 | 2 | 3 |
| Τυπικό φορτίο | +1 | 0 | -1 | +1 | 0 | -1 | +1 | 0 | -1 |

Επαγωγή - Πολικοί Ομοιοπολικοί Δεσμοί - Ηλεκτραρνητικότητα

Οι ομοιοπολικοί δεσμοί είναι ζεύγη ηλεκτρονίων που απαντούν σε ένα τροχιακό που διαμοιράζεται μεταξύ δύο ατόμων.



Ποιοι παράγοντες καθορίζουν ποιο άτομο στο δεσμό θα έλκει περισσότερο τα διαμοιραζόμενα ηλεκτρόνια;

Η Ηλεκτραρνητικότητα είναι μέτρο της ικανότητας ενός ατόμου να έλκει ηλεκτρόνια.

ΠΙΝΑΚΑΣ 1.1 ΤΙΜΕΣ ΗΛΕΚΤΡΑΡΝΗΤΙΚΟΤΗΤΑΣ ΟΡΙΣΜΕΝΩΝ ΚΟΙΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

Αύξηση ηλεκτραρνητικότητας →

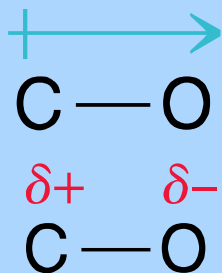
| | | | | | | | |
|------------------|------------------|------------------|------------------|-----------------|-----------------|------------------|--|
| | | | H 2,1 | | | | |
| Li 1,0 | Be 1,5 | B 2,0 | C 2,5 | N 3,0 | O 3,5 | F 4,0 | |
| Na 0,9 | Mg 1,2 | Al 1,5 | Si 1,8 | P 2,1 | S 2,5 | Cl 3,0 | |
| K 0,8 | | | | | | Br 2,8 | |

↑
Αύξηση
ηλεκτραρνητικότητας

Linus Pauling
(Nobel 1954,
1963)

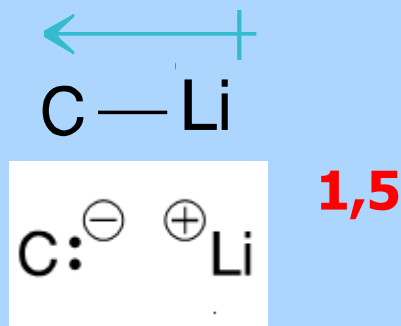
Οι ομοιοπολικοί δεσμοί είναι είτε πολικοί είτε μη πολικοί

- Μη Πολικοί Ομοιοπολικοί—τα άτομα που σχηματίζουν δεσμό μοιράζονται τα ηλεκτρόνια ισότιμα
- Πολικοί Ομοιοπολικοί— Ένα από τα άτομα έλκει τα ηλεκτρόνια του δεσμού περισσότερο από το άλλο



ΕΠΑΓΩΓΗ:

Η τάση μετακίνησης των ηλεκτρονίων προς το πιο ηλεκτραρνητικό άτομο



Όσο μεγαλύτερη είναι η διαφορά στην ηλεκτραρνητικότητα, τόσο πιο πολικός είναι ο δεσμός.

| Ομοιοπολικός | | Πολικός ομοιοπολικός | | | Ετεροπολικός ή Ιοντικός | |
|---------------------------------------|-----|----------------------|-----|------|--|------|
| C—C | C—H | N—H | C—O | Li—C | Li—N | NaCl |
| Μικρή διαφορά στην ηλεκτραρνητικότητα | | | | | Μεγάλη διαφορά στην ηλεκτραρνητικότητα | |
| < 0,5 | | 0,5 – 1,7 | | | > 1,7 | |

Ιοντικός χαρακτήρας



Συμμετρικός ομοιοπολικός δεσμός



Πολικός ομοιοπολικός δεσμός

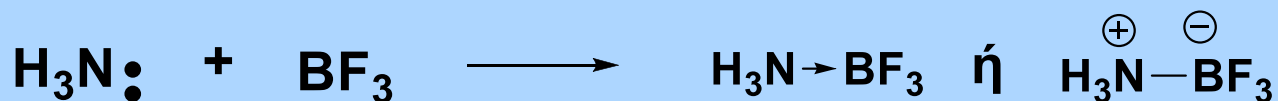


Ιοντικός δεσμός

Ιοντικοί Δεσμοί (Na⁺ Cl⁻ / K⁺ F⁻ / Li⁺ Br⁻)

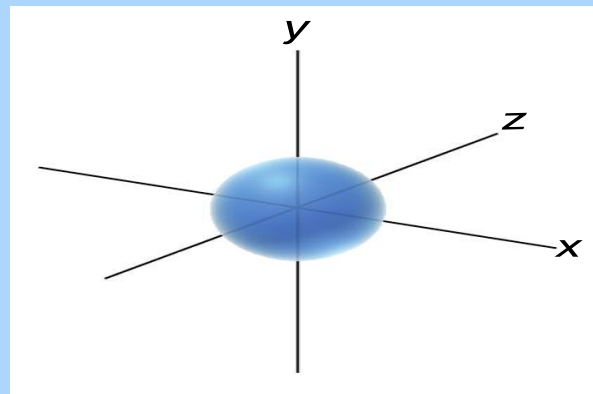
Ημιπολικός δεσμός:

Συνεισφορά ηλεκτρονίων από το ένα μόνο άτομο



Ατομικά Τροχιακά

- Τη δεκαετία του 1920, η Κβαντομηχανική θεμελιώθηκε ως η θεωρία εξήγησης των κυματικών ιδιοτήτων των ηλεκτρονίων.
- 1924, Louis de Broglie: Τα ηλεκτρόνια παρουσιάζουν ιδιότητες κύματος.
- 1926, E. Schrodinger, W. Heisenberg, P. Dirac: Πρότειναν μαθηματική περιγραφή του ηλεκτρονίου με βάση τις ιδιότητες κύματος (**ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ**).
- Η λύση των κυματικών εξισώσεων των ηλεκτρονίων μας παρέχει οπτικές απεικονίσεις που καλούνται τροχιακά

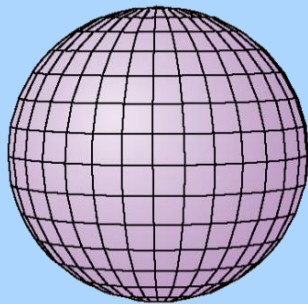


Τροχιακά

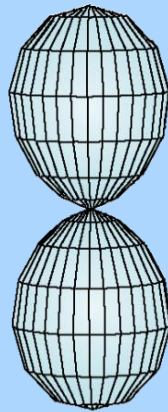
Η κίνηση των ηλεκτρονίων περιγράφεται μαθηματικά από την κυματική εξίσωση Schrödinger. Οι λύσεις της καλούνται **τροχιακά**.

Τα τροχιακά απεικονίζονται ως επιφάνειες ορισμένου σχήματος, στις οποίες υπάρχει μεγάλη πιθανότητα (90%) να βρίσκονται τα ηλεκτρόνια. Ανάλογα με το είδος του ηλεκτρονίου, τα τροχιακά έχουν διαφορετικά σχήματα.

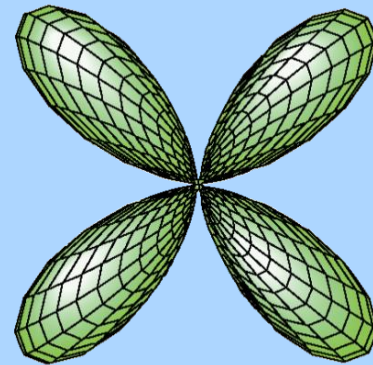
Κάθε τροχιακό μπορεί να δεχθεί μέχρι **δύο** ηλεκτρόνια με αντίθετο σπιν.



τροχιακό s

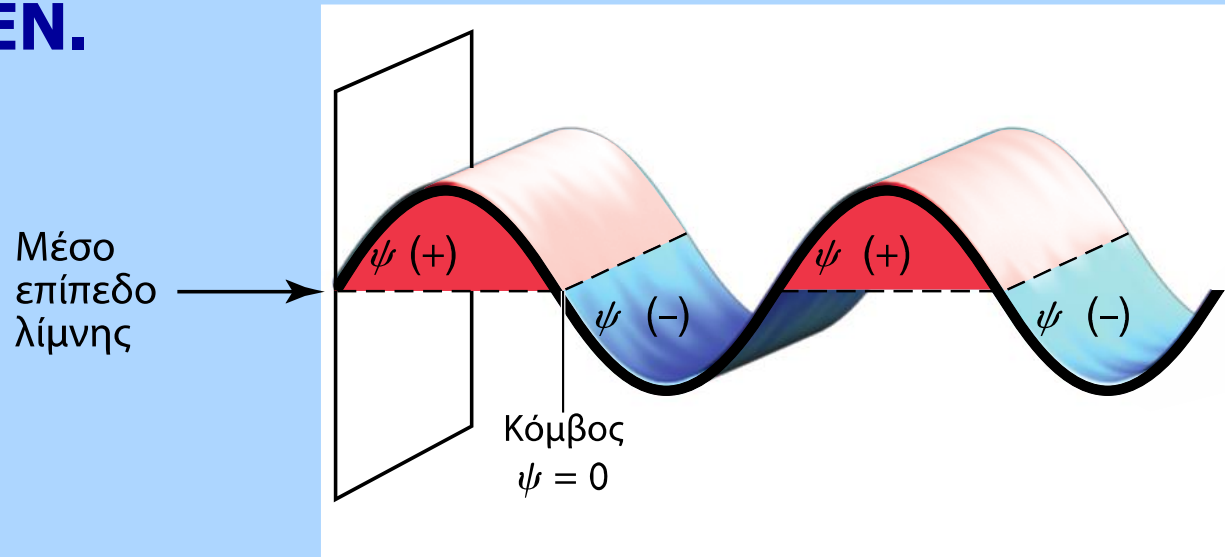


τροχιακό p

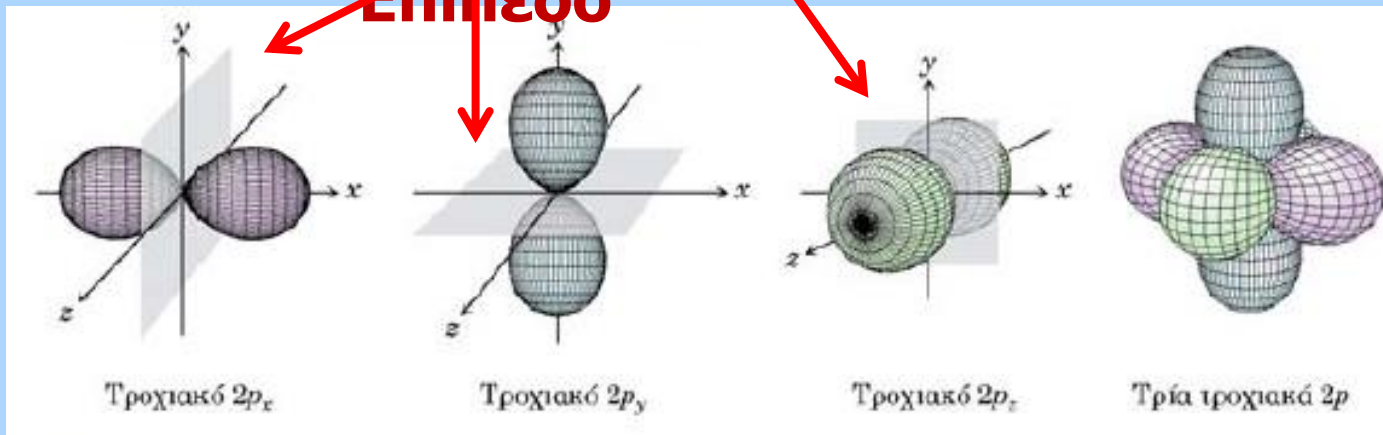


τροχιακό d

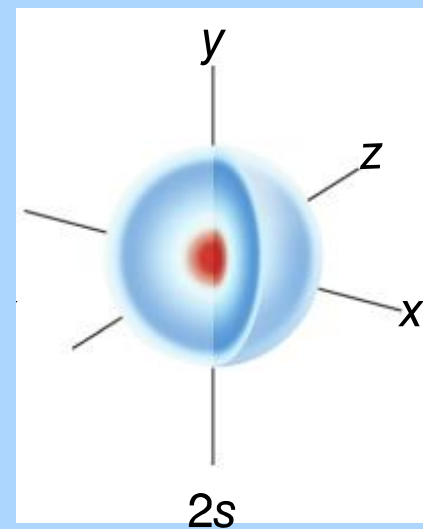
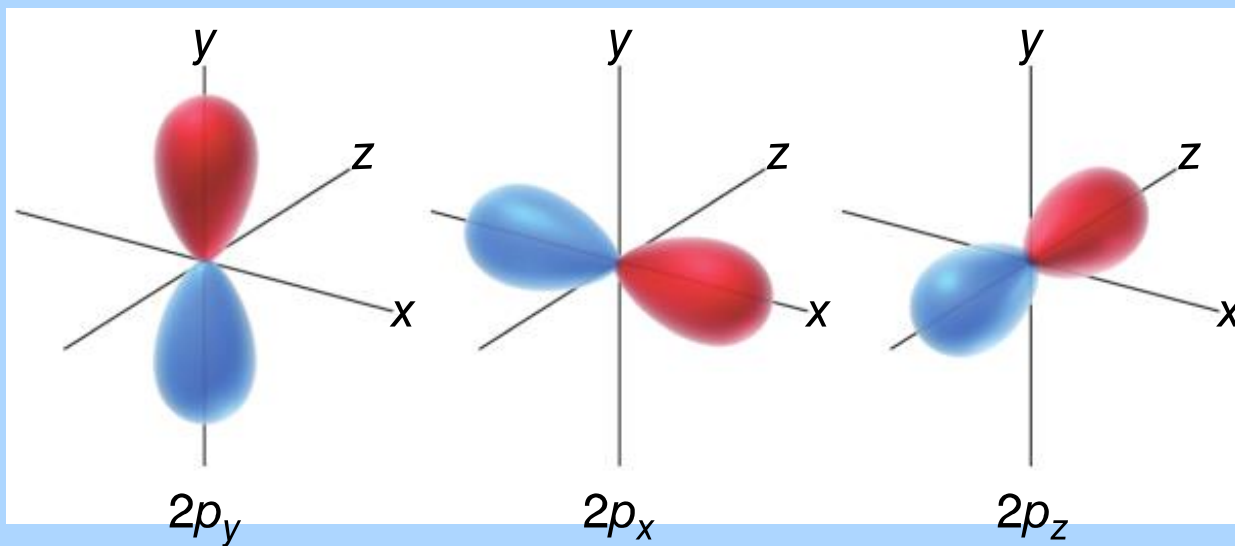
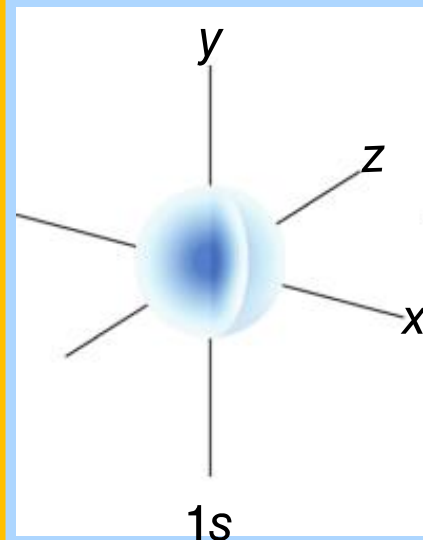
Όπως το κύμα σε μία λίμνη, η κυματοσυνάρτηση ενός ηλεκτρονίου μπορεί να είναι (+), (-), ή ΜΗΔΕΝ.



**Κομβικό
Επίπεδο**



- Τα ηλεκτρόνια είναι περισσότερο σταθερά (έχουν χαμηλότερη ενέργεια) εάν καταλαμβάνουν το $1s$ τροχιακό;
- Το $1s$ τροχιακό είναι πλήρες μόλις καταληφθεί από δύο ηλεκτρόνια.
- Το $2s$ τροχιακό συμπληρώνεται στη συνέχεια. Το $2s$ τροχιακό εμφανίζει έναν κόμβο.
- Μόλις συμπληρωθεί το $2s$, τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τα τρία **εκφυλισμένα (ίδιας ενέργειας) $2p$** τροχιακά.



${}^1_1\text{H}^1$ ο πυρήνας έχει ένα πρωτόνιο και γύρω του κινείται ένα ηλεκτρόνιο

${}^{12}_6\text{C}^{12}$ ο πυρήνας έχει 6 πρωτόνια και 6 νετρόνια και γύρω τους κινούνται 6 ηλεκτρόνια

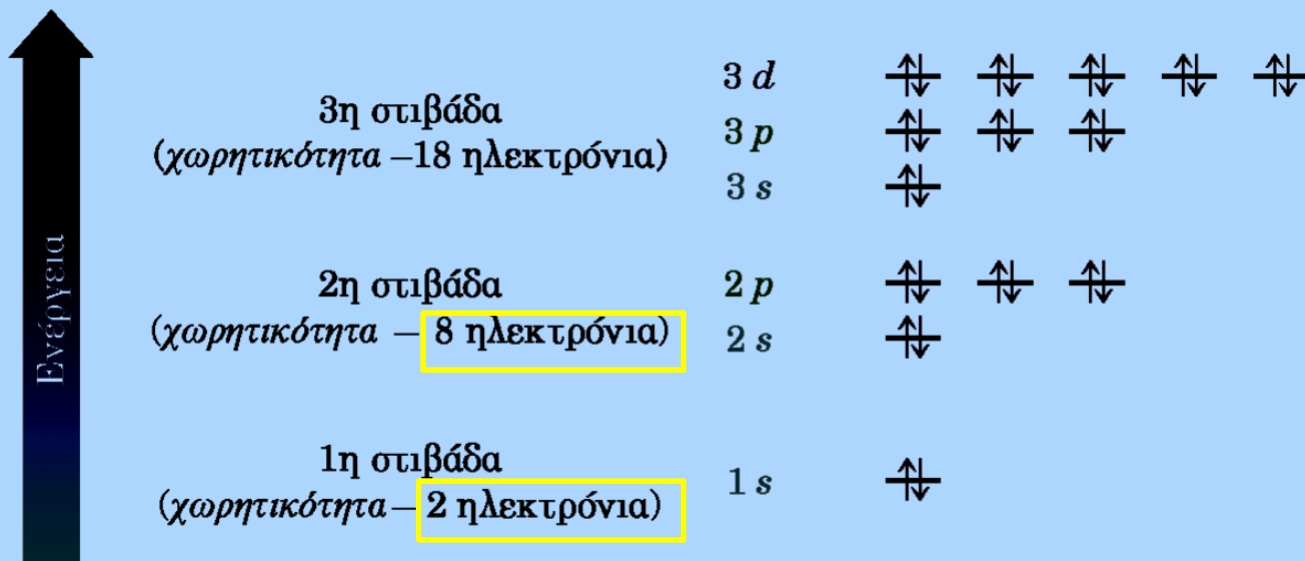
${}^{14}_7\text{N}^{14}$ ο πυρήνας έχει 7 πρωτόνια και 7 νετρόνια και γύρω τους κινούνται 7 ηλεκτρόνια

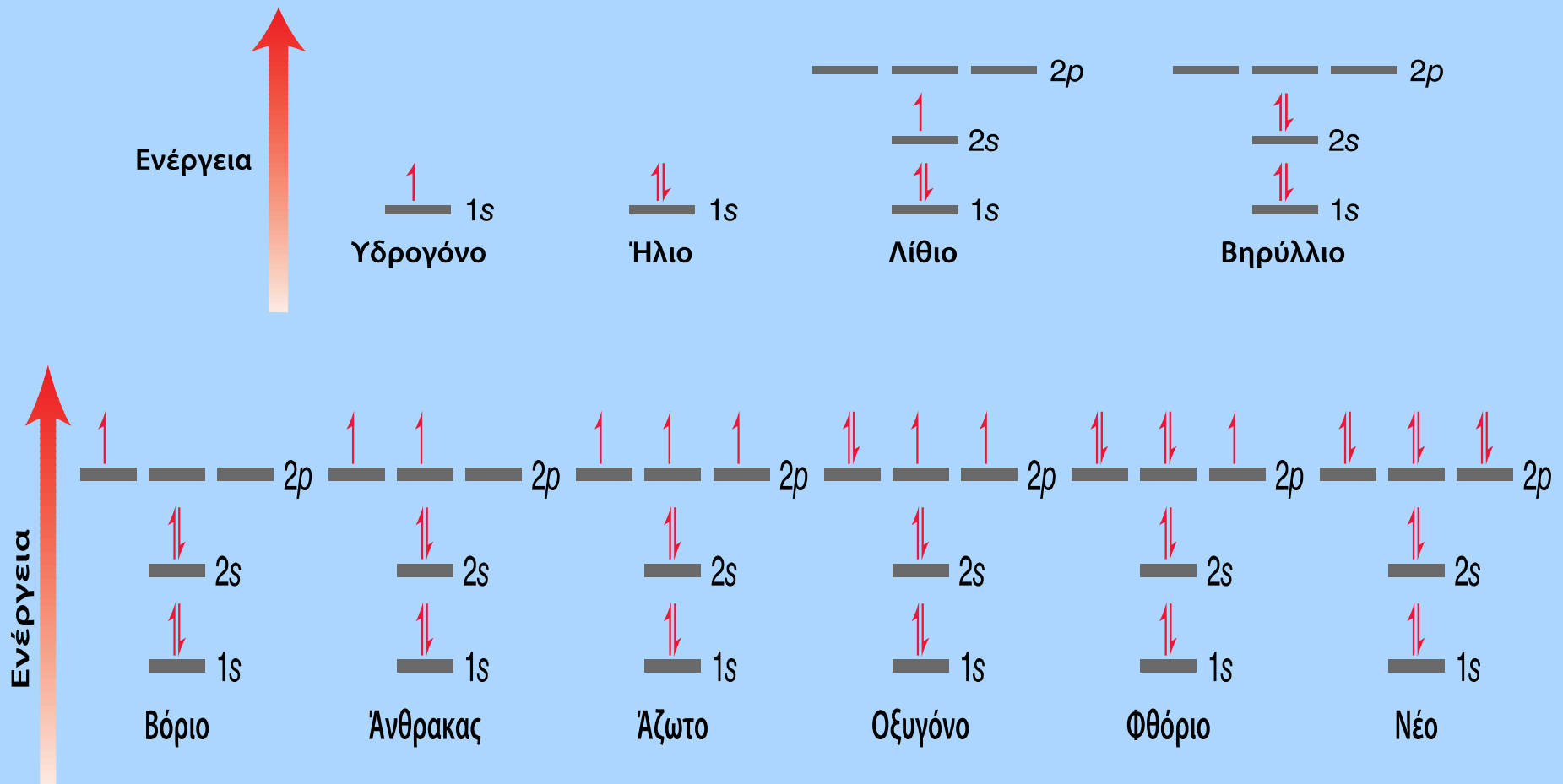
${}^{16}_8\text{O}^{16}$ ο πυρήνας έχει 8 πρωτόνια και 8 νετρόνια και γύρω τους κινούνται 8 ηλεκτρόνια

Κατανομή ηλεκτρονίων σε στοιβάδες

Τα ηλεκτρόνια κατανέμονται σε **στοιβάδες** γύρω από τον πυρήνα.

Ο αριθμός των ηλεκτρονίων κάθε στοιβάδας είναι καθορισμένος. Όσο περισσότερο απέχει η στοιβάδα από τον πυρήνα τόσο περισσότερα ηλεκτρόνια μπορεί να έχει, και τόσο υψηλότερη ενέργεια έχουν τα ηλεκτρόνια αυτά.





Μεγαλύτερες στοιβάδες (πιο μακριά από τον πυρήνα) έχουν υψηλότερη ενέργεια.

Κατανομή Ηλεκτρονίων στα Στοιχεία – Απαγορευτική Αρχή του Pauli - Κανόνας του Hund

Κανόνες που διέπουν την τοποθέτηση των ηλεκτρονίων

Αρχή του Pauli

(μόνο μέχρι δύο ηλεκτρόνια με αντίθετο spin σε κάθε τροχιακό)

Κανόνας του Hund

(σε εκφυλισμένα τροχιακά πρώτα τοποθετούνται τα ηλεκτρόνια με παράλληλο spin)

| Element | Orbitals | | | | | Ground state | Excited state |
|---------|----------|---------|-----------------|-----------------|-----------------|---|---|
| | K-Shell | L-Shell | | | | | |
| | 1s | 2s | 2p _x | 2p _y | 2p _z | | |
| H | ↑ | | | | | 1s ¹ | |
| He | ↑↓ | | | | | 1s ² | |
| Li | ↑↓ | ↑ | | | | 1s ² 2s ¹ | |
| Be | ↑↓ | ↑↓ | | | | 1s ² 2s ² | 1s ² 2s ¹ 2p |
| B | ↑↓ | ↑↓ | ↑ | | | 1s ² 2s ² 2p ¹ | 1s ² 2s ¹ 2p ² |
| C | ↑↓ | ↑↓ | ↑ | ↑ | | 1s ² 2s ² 2p ² | 1s ² 2s ¹ 2p ³ |
| N | ↑↓ | ↑↓ | ↑ | ↑ | ↑ | 1s ² 2s ² 2p ³ | |
| O | ↑↓ | ↑↓ | ↑↓ | ↑ | ↑ | 1s ² 2s ² 2p ⁴ | |
| F | ↑↓ | ↑↓ | ↑↓ | ↑↓ | ↑ | 1s ² 2s ² 2p ⁵ | |
| Ne | ↑↓ | ↑↓ | ↑↓ | ↑↓ | ↑↓ | 1s ² 2s ² 2p ⁶ | |

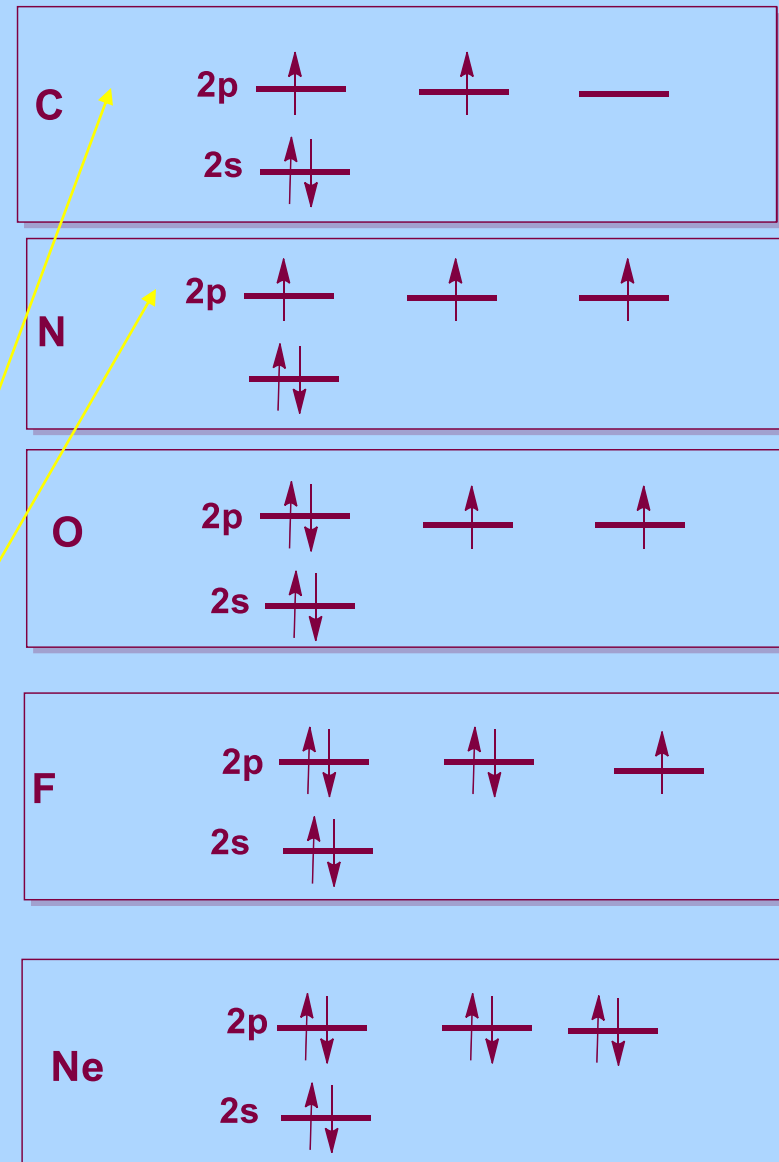
H. Beyer, W. Walter (ORGANIC CHEMISTRY)

Ηλεκτρόνια σθένους & αδесμικά ηλεκτρόνια

Ηλεκτρονική διαμόρφωση της εξωτερικής στοιβάδας – **στοιβάδας σθένους** – μερικών στοιχείων.

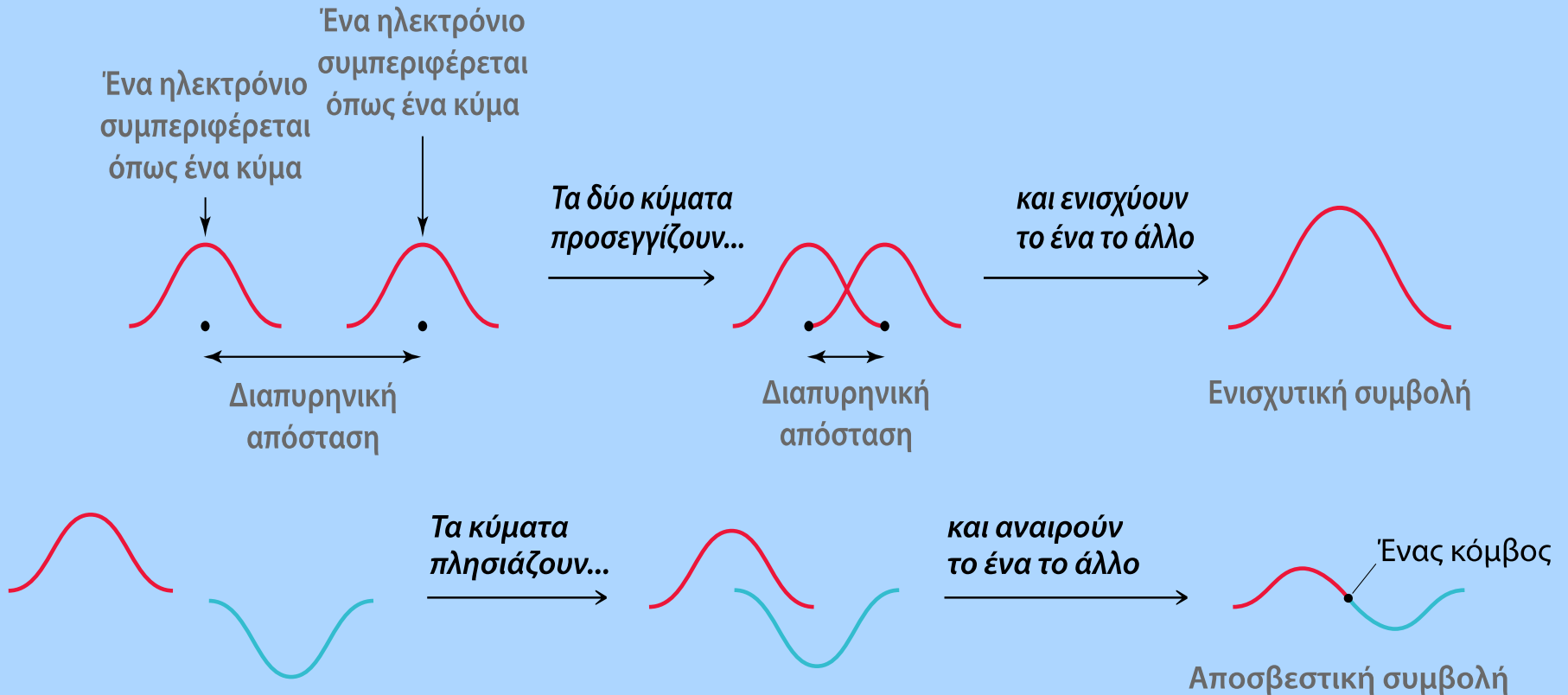
Τα ηλεκτρόνια της εξωτερικής στοιβάδας ονομάζονται **ηλεκτρόνια σθένους**.

Τα ηλεκτρόνια τοποθετούνται ανά ένα σε κάθε τροχιακό όταν τα τροχιακά έχουν ίση ενέργεια.



Θεωρία Δεσμού Σθένους

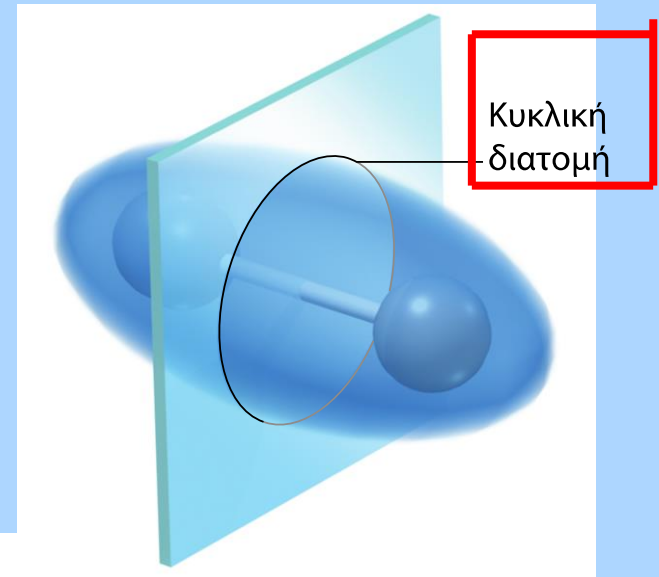
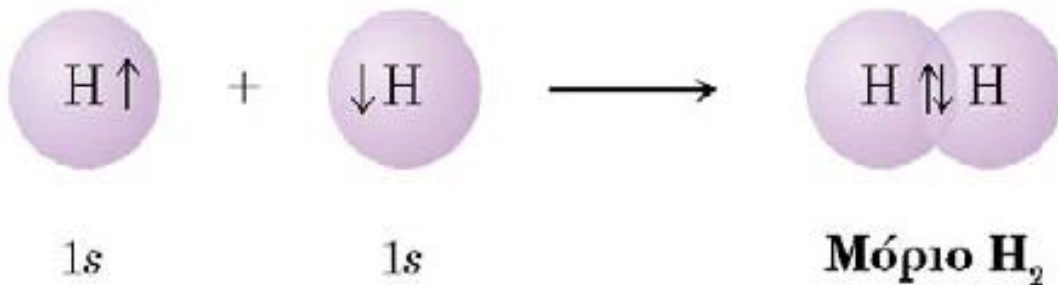
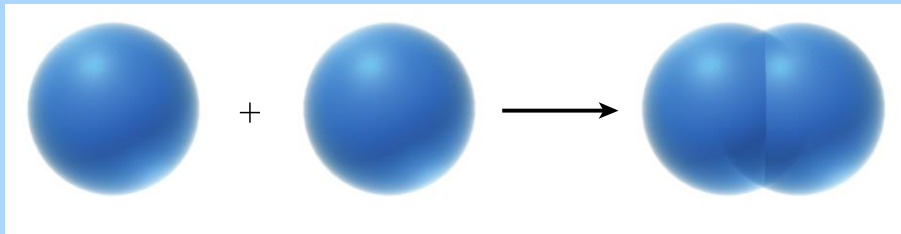
- Ένας δεσμός σχηματίζεται από επικάλυψη ατομικών τροχιακών. Τα επικαλυπτόμενα τροχιακά είναι σαν επικαλυπτόμενα κύματα.



- Μόνο η ενισχυτική συμβολή καταλήγει στο σχηματισμό δεσμού.

Ο δεσμός που σχηματίζεται μεταξύ δύο ατόμων υδρογόνου για να παραχθεί ένα μόριο υδρογόνου (H_2) είναι αποτέλεσμα ενισχυτικής συμβολής.

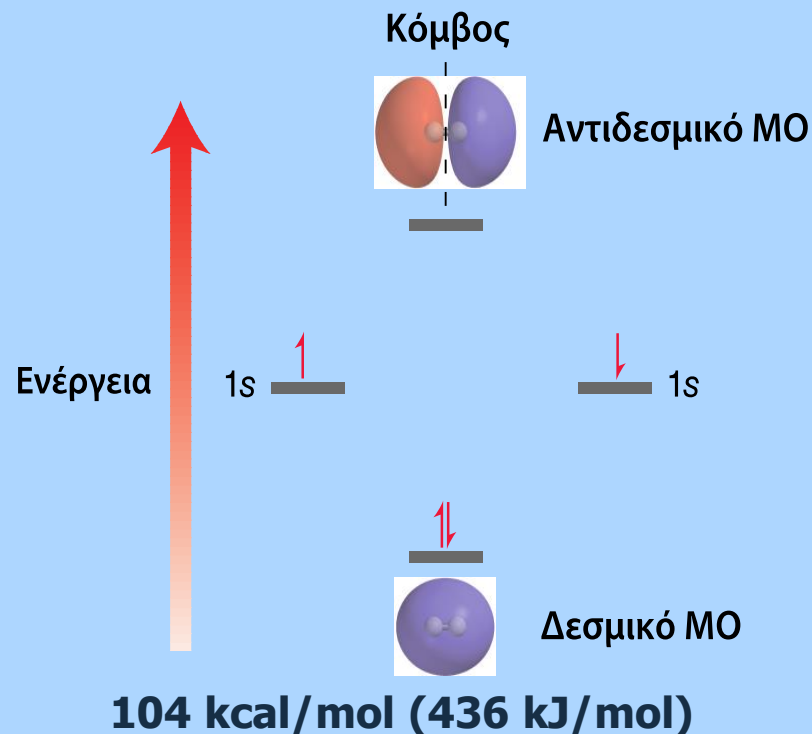
Επικάλυψη Ατομικών Τροχιακών



σ Δεσμός
(κυλινδρική
συμμετρία)

Θεωρία Μοριακών Τροχιακών (ΜΟ)

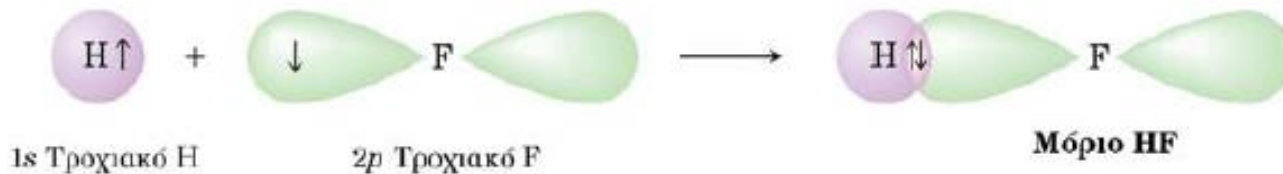
- Οι κυματοσυναρτήσεις των ατομικών τροχιακών επικαλύπτονται για να σχηματίσουν **Μοριακά Τροχιακά, Molecular Orbitals (MOs)** που εκτείνονται σε ολόκληρο το μόριο.
- Τα MOs αποτελούν μία πληρέστερη ανάλυση των δεσμών, επειδή περιλαμβάνουν και ενισχυτική και αποσβεστική συμβολή.
- Ο αριθμός των MOs που δημιουργούνται πρέπει να είναι ίσος με τον αριθμό των ατομικών τροχιακών που χρησιμοποιήθηκαν.



H_2 MOs

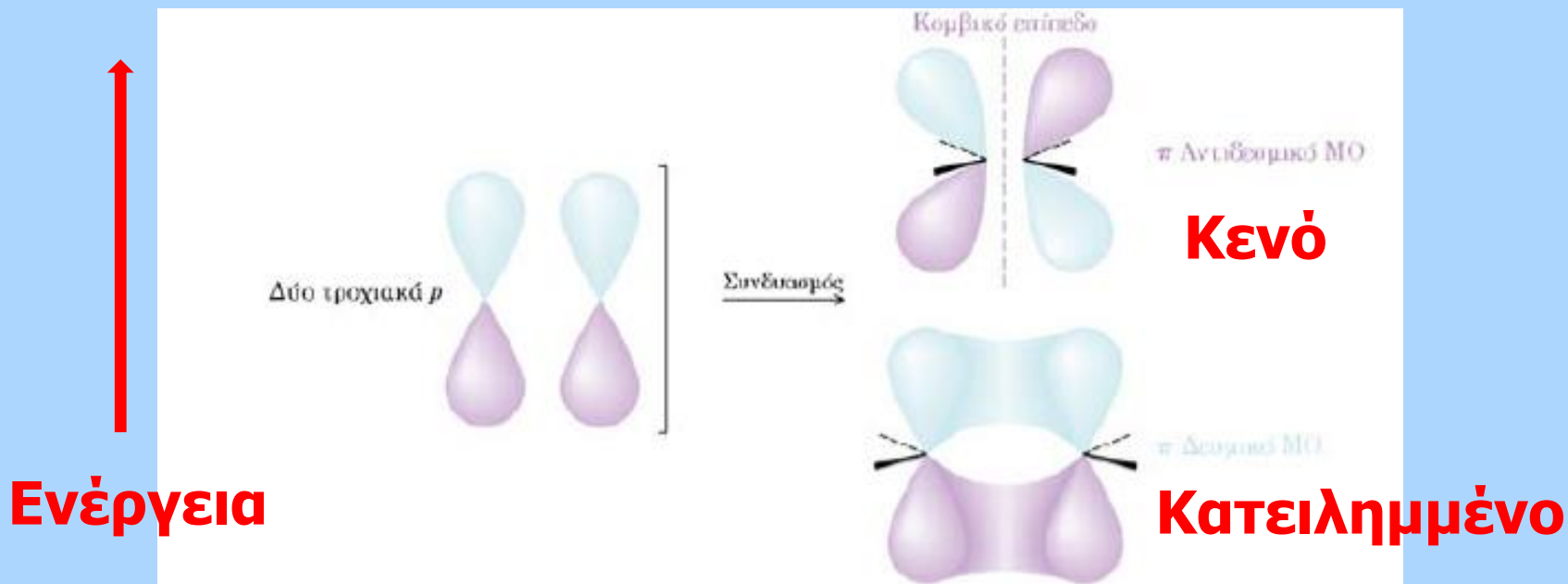
Τα Μοριακά Τροχιακά συσχετίζονται με όλο το μόριο.

Μόριο HF



Από s ατομικά τροχιακά σχηματίζονται **σ μοριακά τροχιακά / σ-δεσμοί**.

π Δεσμός (π δεσμικό MO) C-C

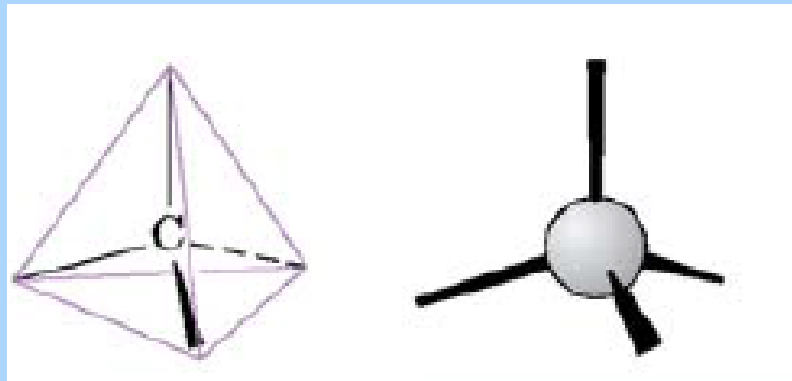


Μοριακά Τροχιακά HOMO και LUMO (για την εξήγηση αντιδράσεων)

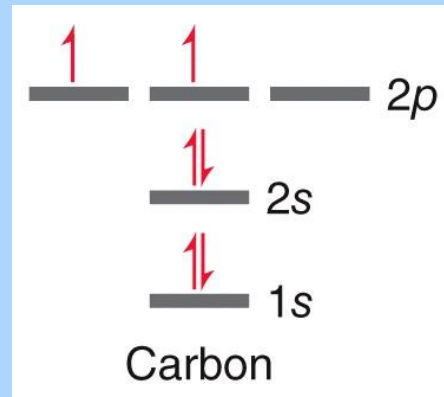
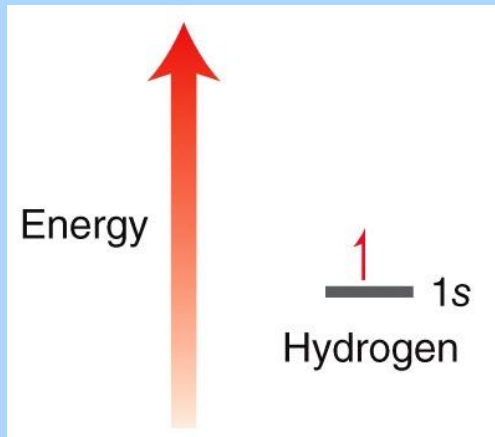
Υβριδικά Ατομικά Τροχιακά

1858: A. Kekule : Ο Άνθρακας είναι τετρασθενής

1874: J. van't Hoff : Ο Άνθρακας έχει τετραεδρική διάταξη

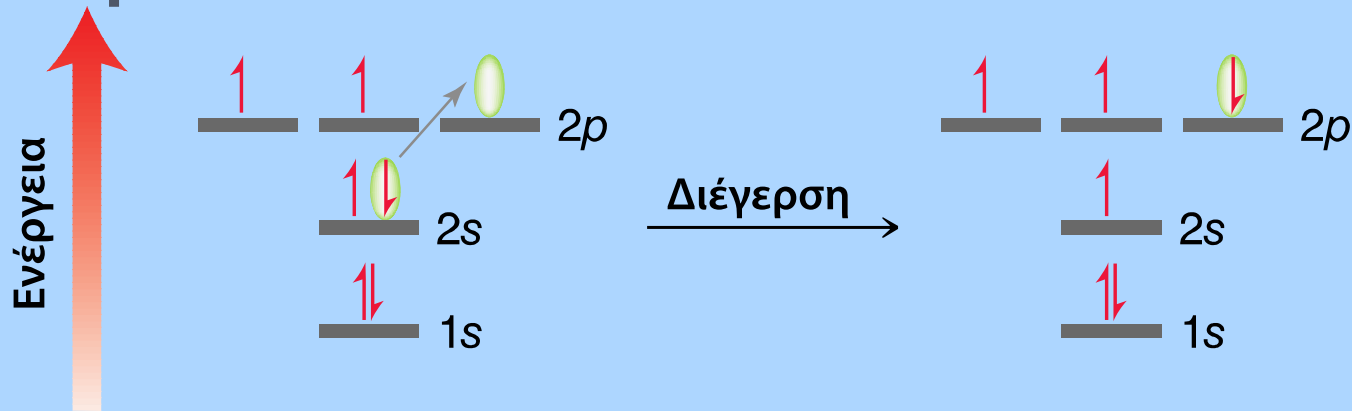


Θα μπορούσε μία επικάλυψη ατομικών τροχιακών να παραγάγει μεθάνιο;



Το άτομο C πρέπει να έχει τα 4 ατομικά τροχιακά διαθέσιμα για επικάλυψη.

Με διέγερση θα ήταν 4 ατομικά τροχιακά, αλλά όχι ισοδύναμα:

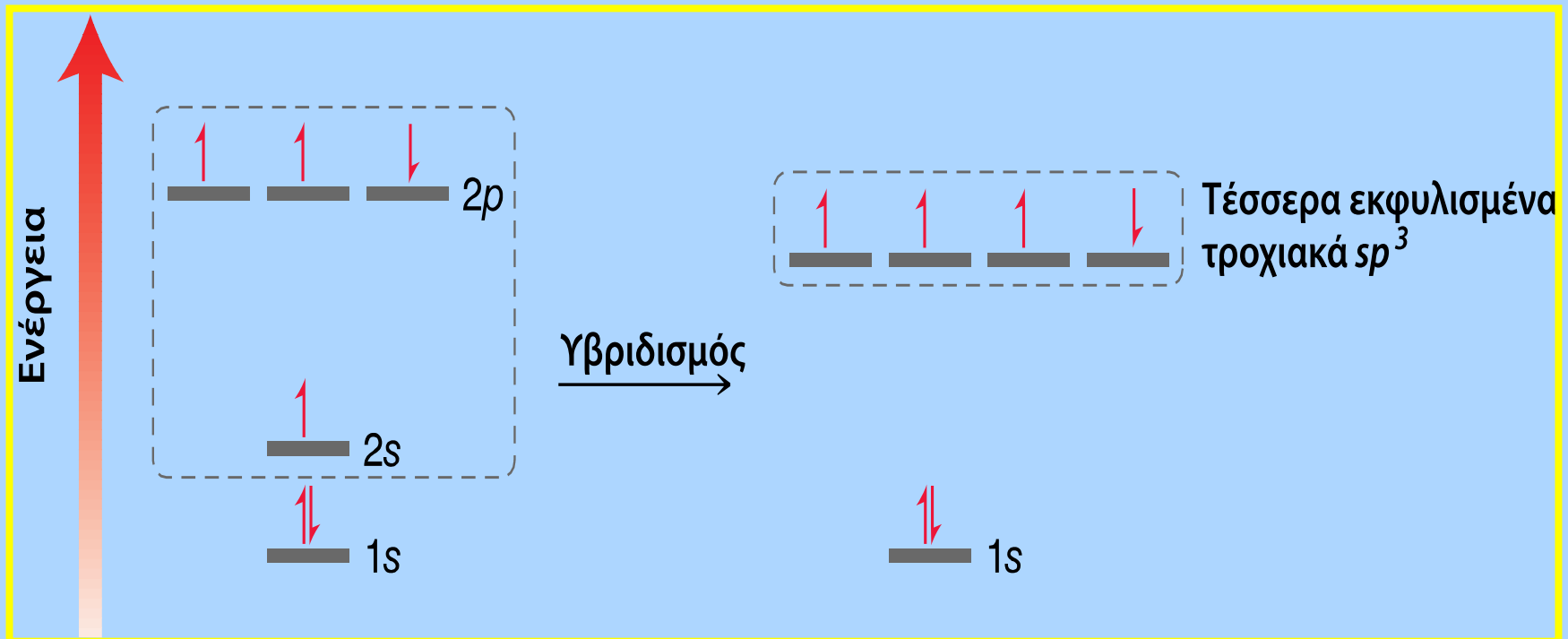


| Element | Orbitals | | | | | Ground state | Excited state |
|---------|----------|----|-----------------|-----------------|-----------------|---|---|
| | K-Shell | | L-Shell | | | | |
| | 1s | 2s | 2p _x | 2p _y | 2p _z | | |
| H | ↑ | | | | | 1s ¹ | |
| He | ↑↓ | | | | | 1s ² | |
| Li | ↑↓ | ↑ | | | | 1s ² 2s ¹ | |
| Be | ↑↓ | ↑↓ | | | | 1s ² 2s ² | 1s ² 2s ¹ 2p |
| B | ↑↓ | ↑↓ | ↑ | | | 1s ² 2s ² 2p ¹ | 1s ² 2s ¹ 2p ² |
| C | ↑↓ | ↑↓ | ↑ | ↑ | | 1s ² 2s ² 2p ² | 1s ² 2s ¹ 2p ³ |
| N | ↑↓ | ↑↓ | ↑ | ↑ | ↑ | 1s ² 2s ² 2p ³ | |

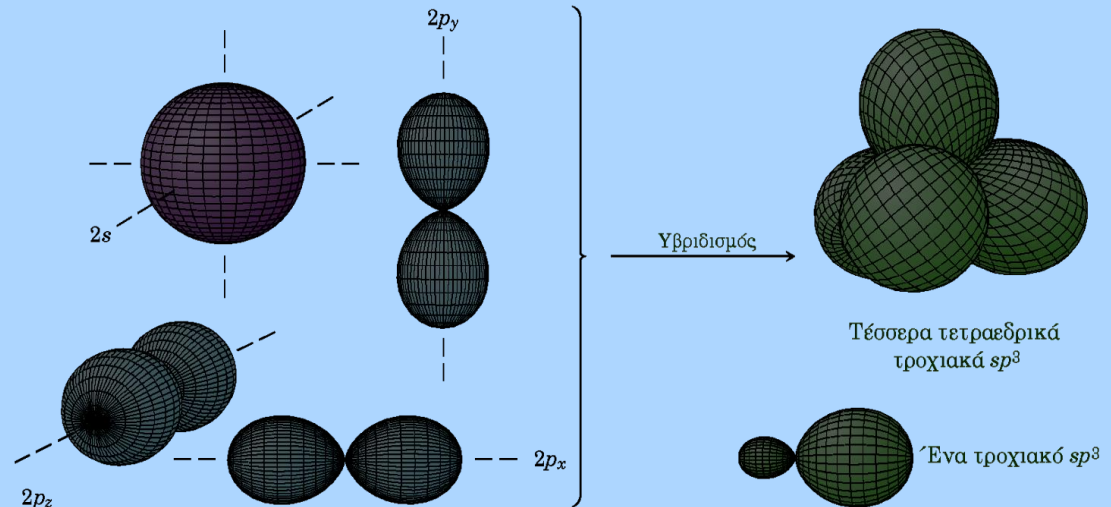
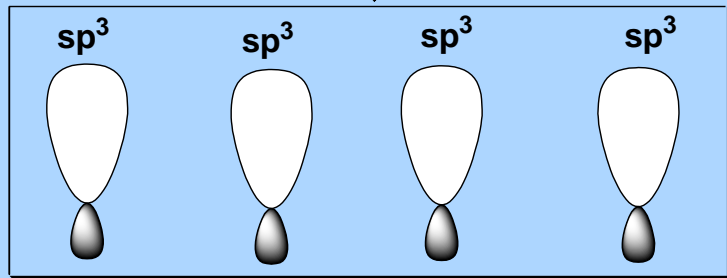
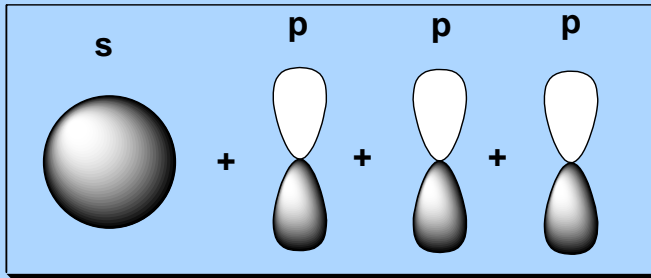
C : 96
kcal
mole

- 1931, L. Pauling: Το άτομο του άνθρακα πρέπει να υποστεί υβριδισμό για να σχηματίσει 4 ίσα υβριδικά ατομικά τροχιακά.
- Τα υβριδικά ατομικά τροχιακά πρέπει να είναι ίσης ενέργειας για να σχηματίσουν τέσσερις ίσης ενέργειας συμμετρικούς δεσμούς C-H.

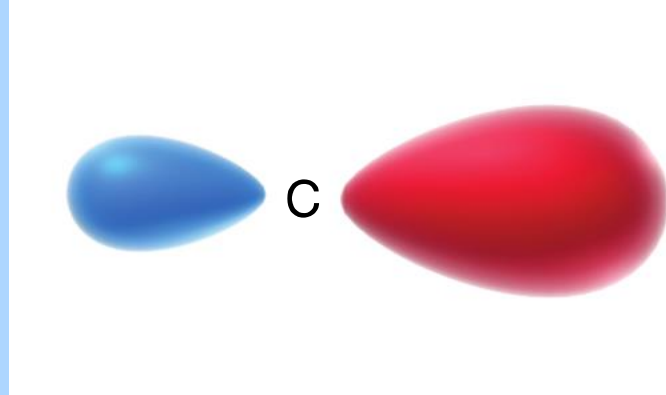
Η μαθηματική διεργασία δίνει 4 υβριδικά τροχιακά sp^3 .



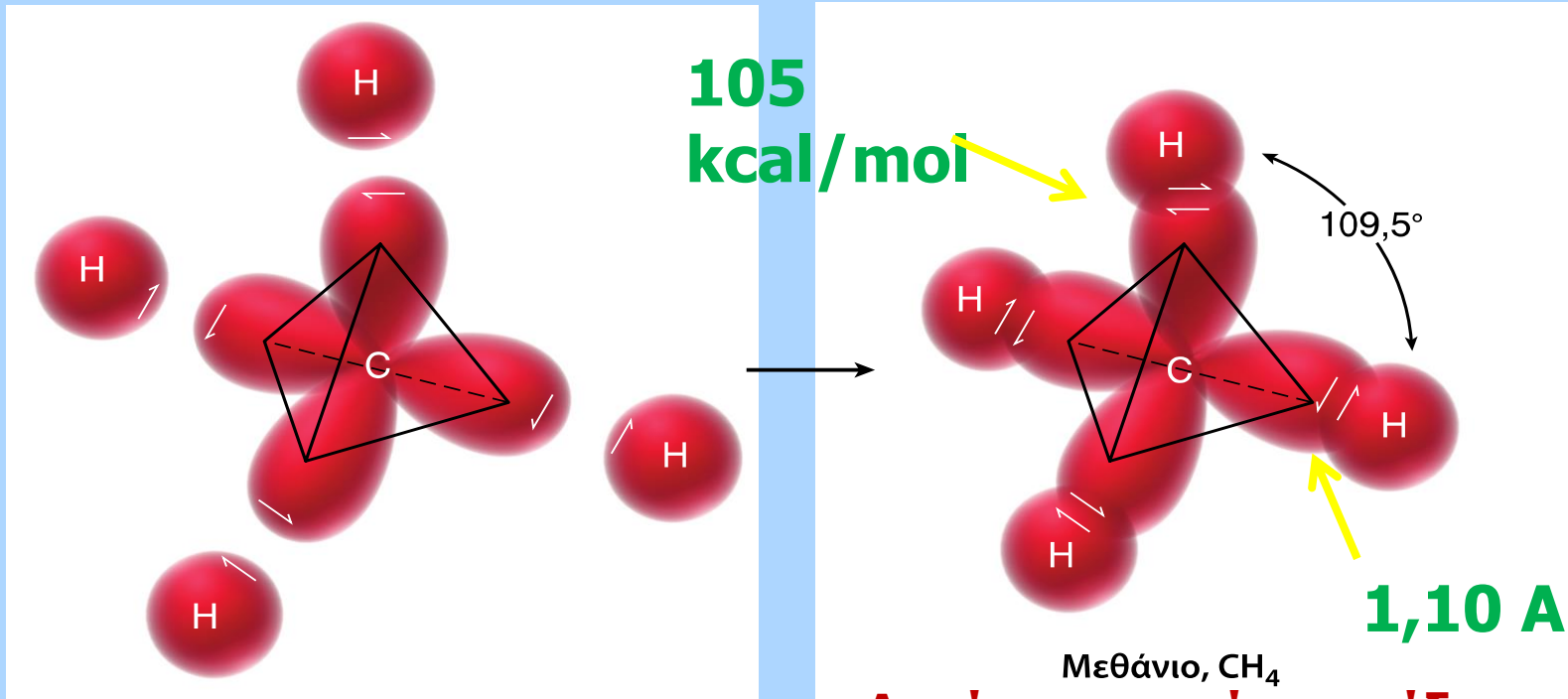
Υβριδισμός sp^3 & τετρασθένεια του άνθρακα



sp^3 Υβριδικά Τροχιακά



Για να παραχθεί CH_4 , τα $1s$ ατομικά τροχιακά τεσσάρων ατόμων H θα επικαλυφθούν με τα τέσσερα sp^3 υβριδικά ατομικά τροχιακά του C.

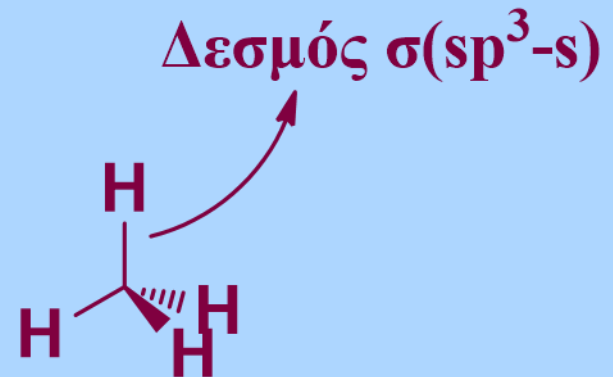
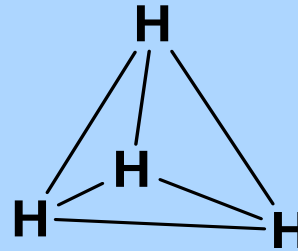
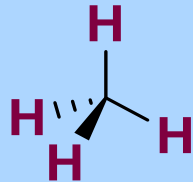
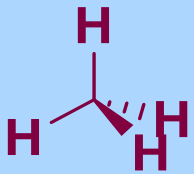
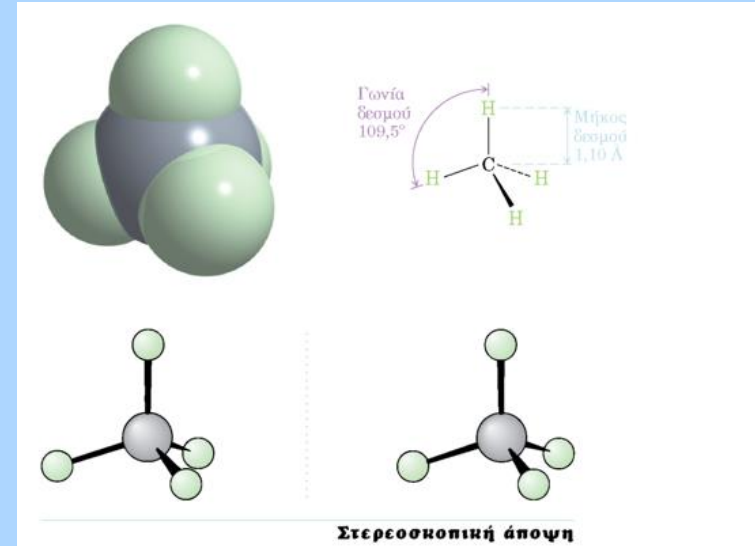


Δομή κανονικού τετραέδρου

Δομή Μεθανίου

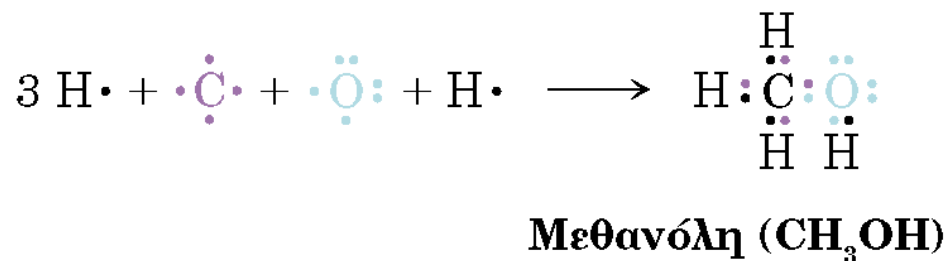
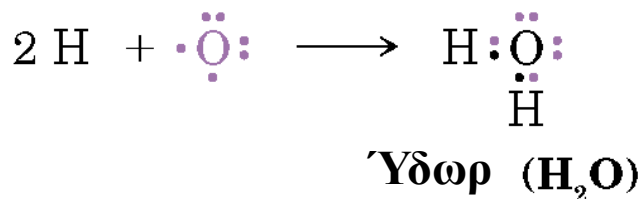
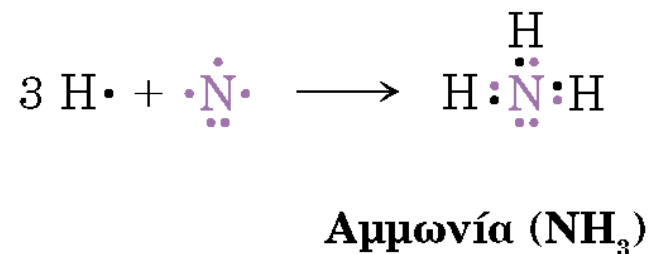
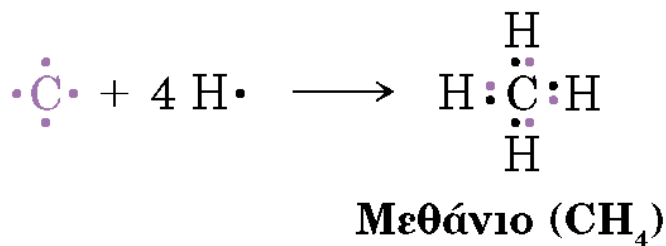
Τετραεδρική δομή του άνθρακα με
γωνίες δεσμών 109.5° .

Ισότιμοι σ -δεσμοί C-H από
αλληλοεπικάλυψη του $1s$ τροχιακού του
υδρογόνου με κάθε sp^3 τροχιακό του
άνθρακα.

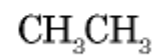
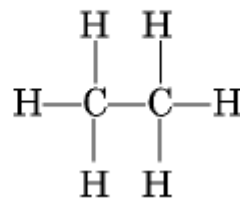
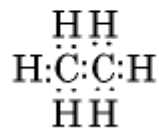


Ομοιοπολικός δεσμός - Δομές Lewis

Ο ομοιοπολικός δεσμός σχηματίζεται μεταξύ των ατόμων με **αμοιβαία συνεισφορά ηλεκτρονίων**.



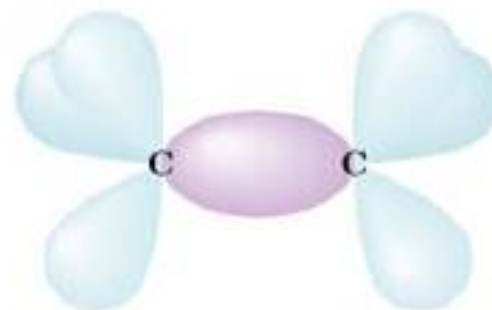
Δομή του Αιθανίου



Ανθρακας sp^3

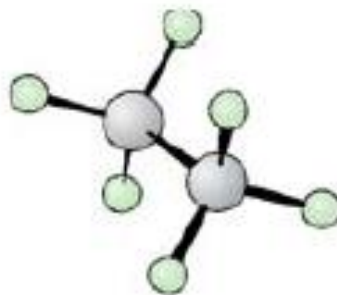
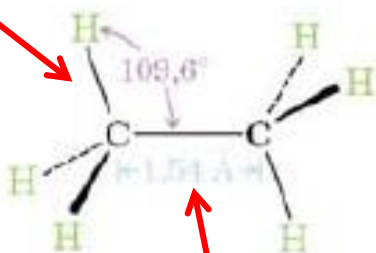


Ανθρακας sp^3



sp^3-sp^3 Δεσμός σίγμα

100 kcal/mol

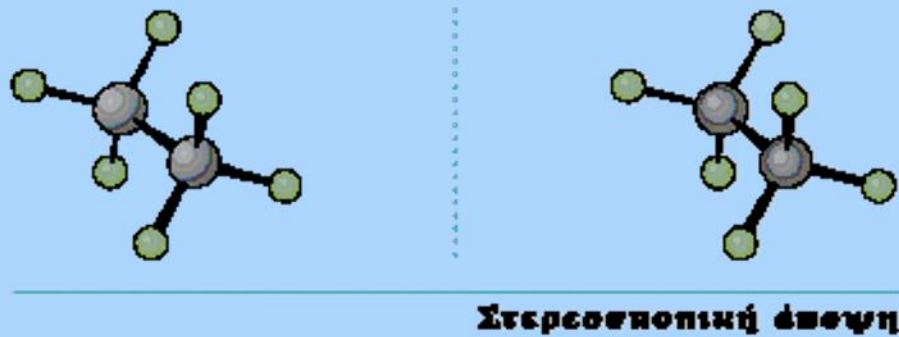
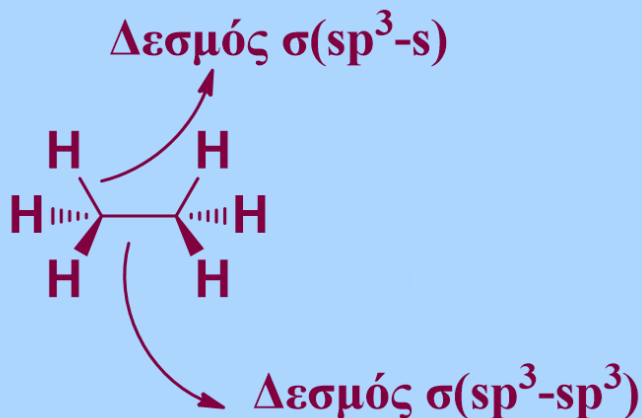
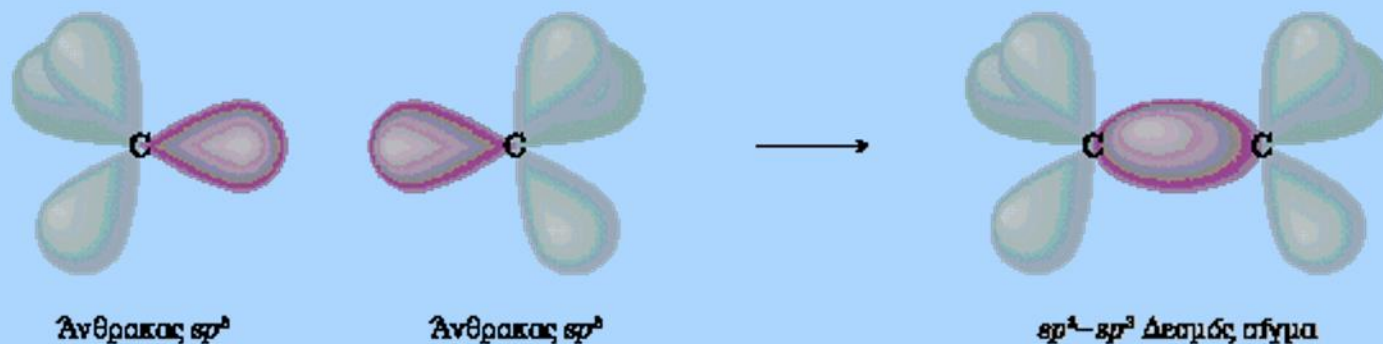


90 kcal/mol

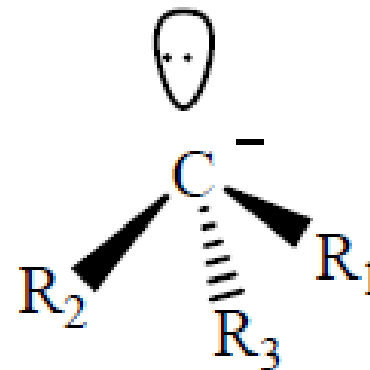
Δομή αιθανίου

Τετραεδρική δομή του άνθρακα με γωνίες δεσμών 109.5° .

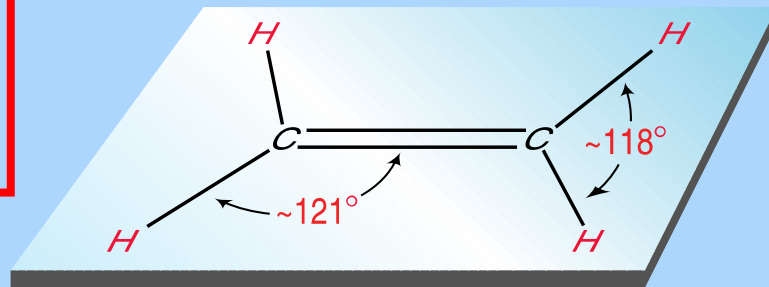
Ισότιμοι δεσμοί C-H από αλληλοεπικάλυψη του 1s τροχιακού των 6 υδρογόνων με αντίστοιχα $2sp^3$ τροχιακά των ατόμων άνθρακα. Σχηματισμός ενός σ-δεσμού μεταξύ δύο sp^3 τροχιακών.



Καρβανιόντα (sp^3 υβριδισμός)

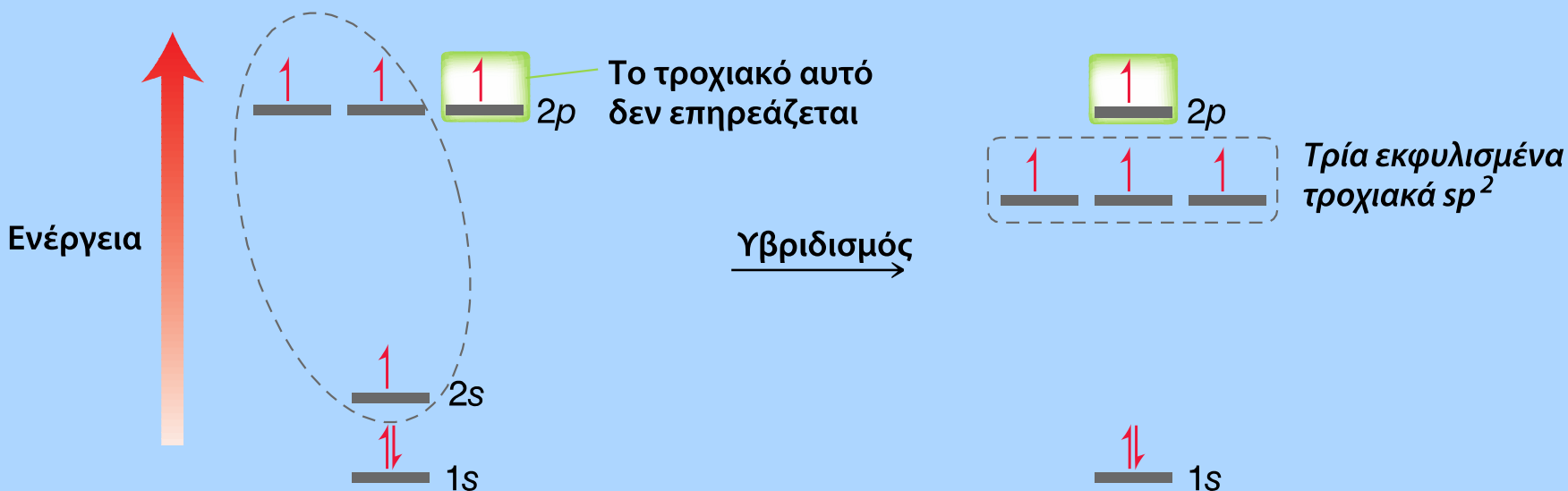


Αιθένιο (αιθυλένιο). Διπλός Δεσμός

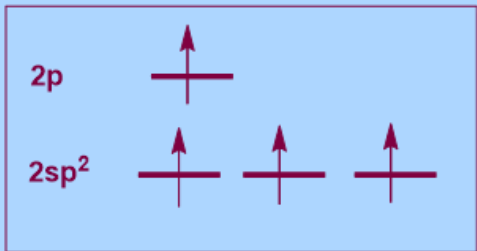
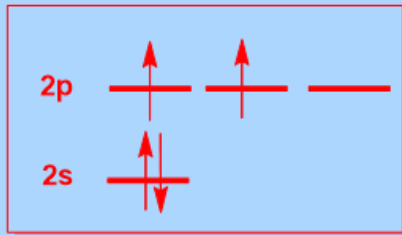


Κάθε άτομο άνθρακα στο αιθένιο πρέπει να συνδεθεί με τρία άλλα άτομα, κι έτσι απαιτούνται μόνο τρία υβριδικά ατομικά τροχιακά

Υβριδοποίηση ενός s με 2 p ατομικά τροχιακά.



Υβριδισμός sp^2

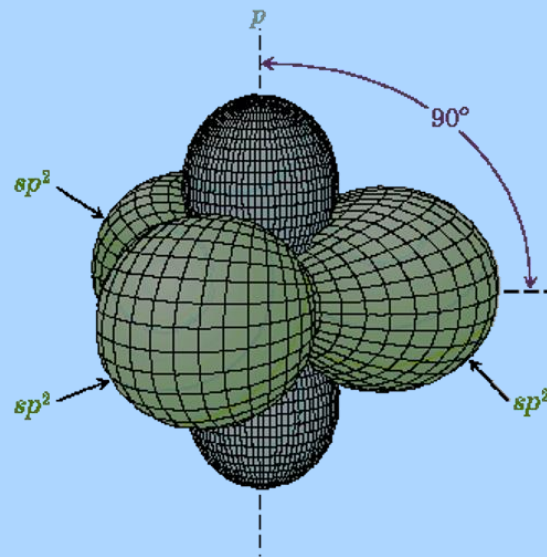
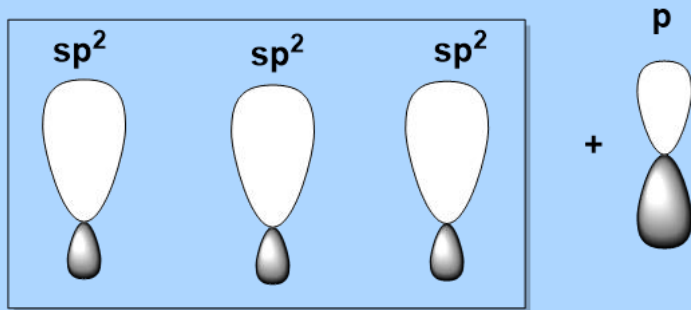
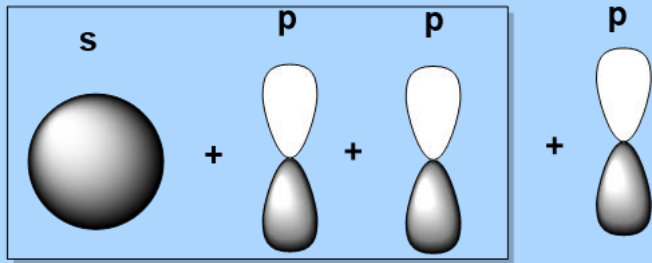


Το τροχιακό 2s αναμειγνύεται – **υβριδοποιείται** – με τα δύο από τα τρία 2p τροχιακά.

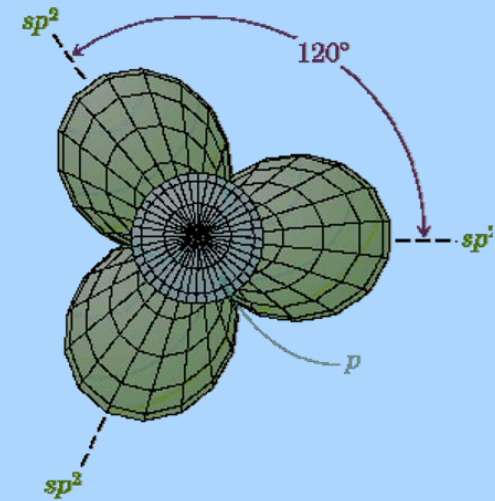
Προκύπτουν τρία **ισότιμα ενεργειακά** υβριδικά τροχιακά τύπου **sp^2** διατεταγμένα σε ένα επίπεδο με γωνίες 120° .

Απομένει ένα αμιγές p_z τροχιακό κάθετο στο επίπεδο των υπολοίπων.

Υβριδισμός sp^2

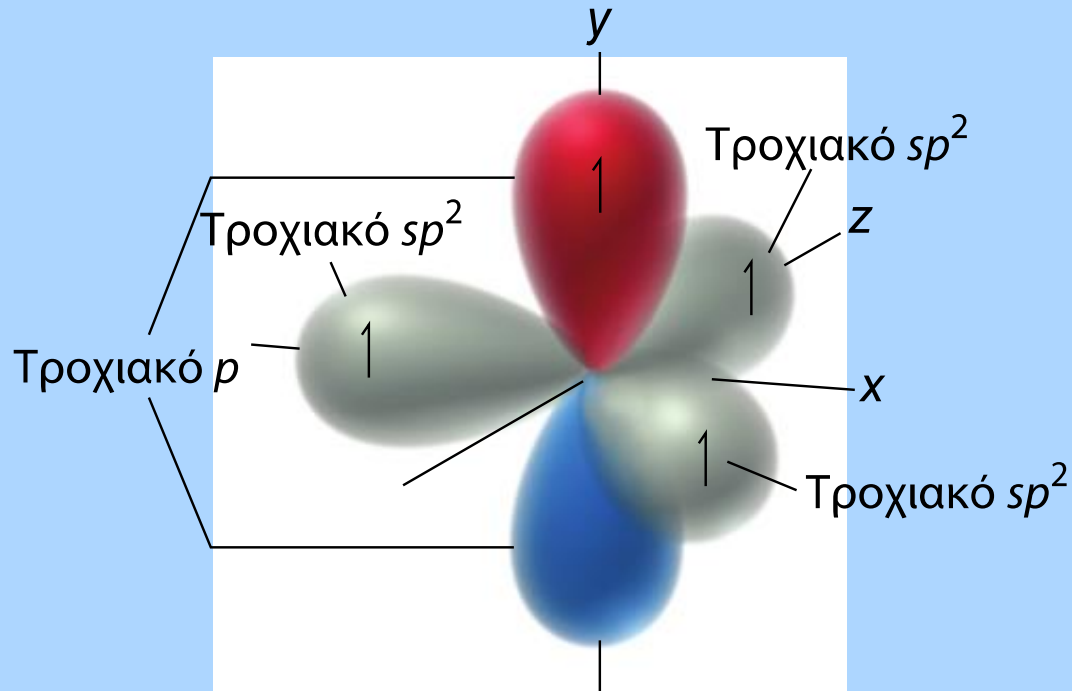


Πλάγια όψη

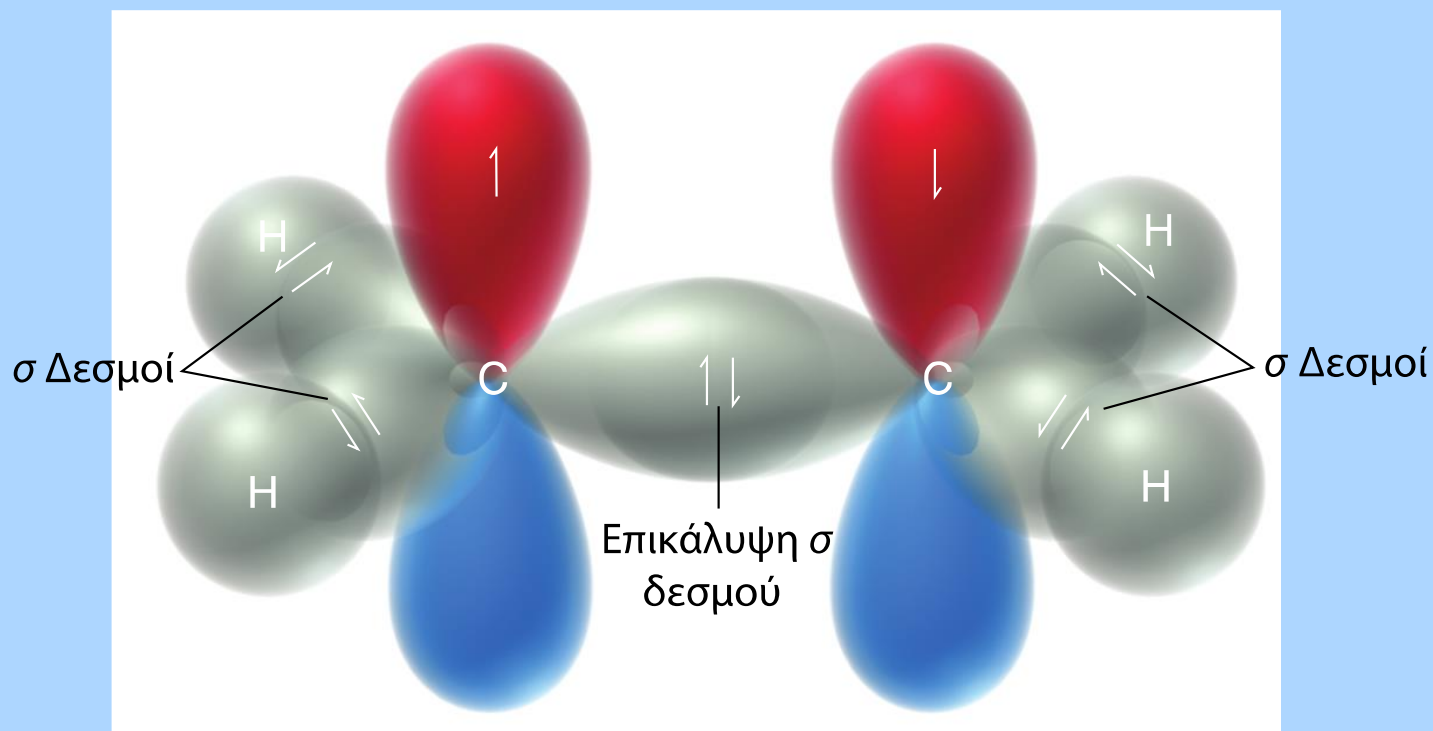


Κάτοψη

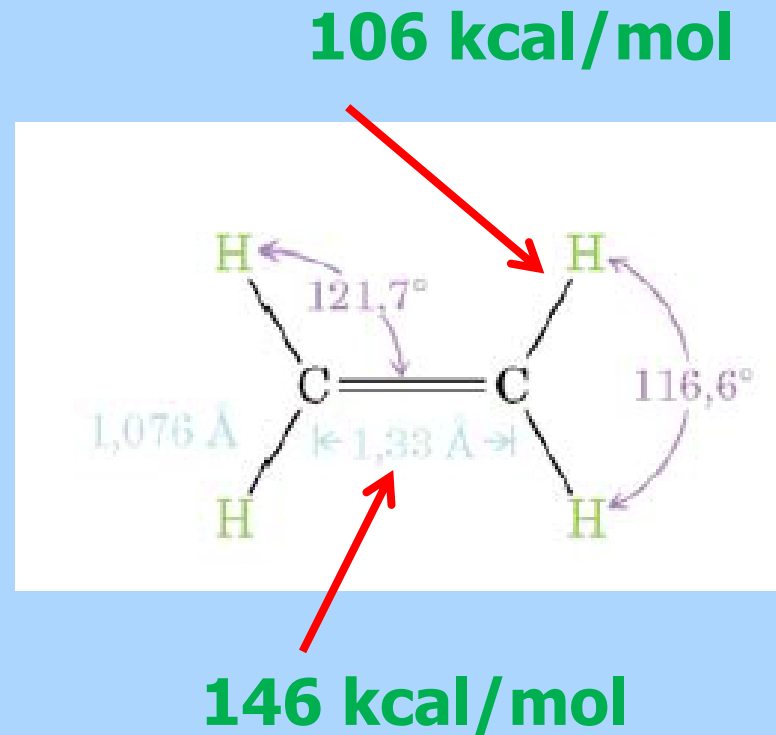
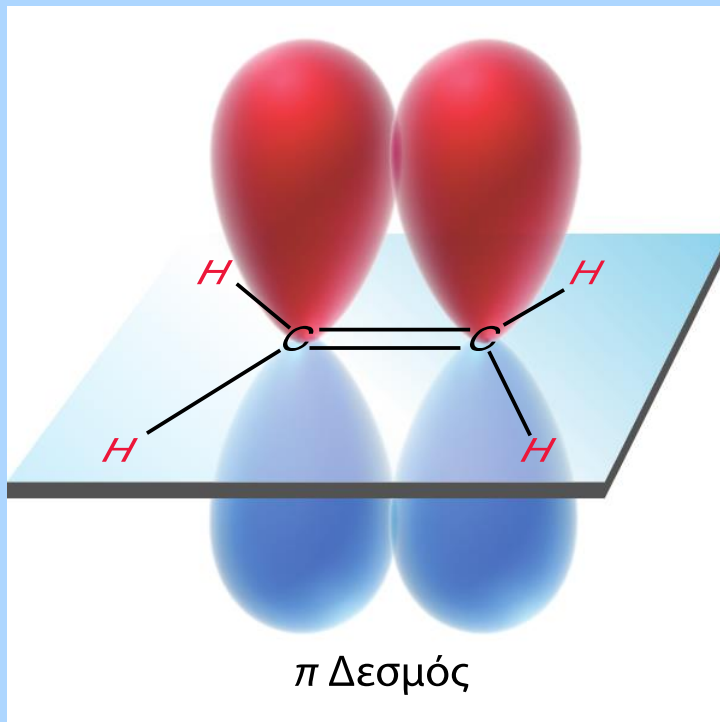
Ένα sp^2 υβριδισμένο άτομο άνθρακα θα έχει τρία ίσης ενέργειας sp^2 τροχιακά και ένα μη υβριδικό p τροχιακό



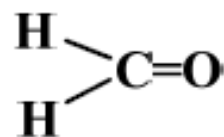
Τα sp^2 ατομικά τροχιακά επικαλύπτονται για να σχηματίσουν σ δεσμούς.
Οι δεσμοί σ παρέχουν μέγιστη ΚΑΤΑ ΜΕΤΩΠΟ επικάλυψη.



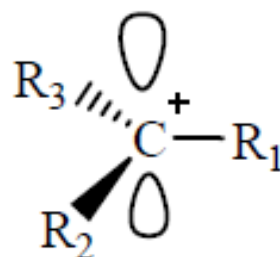
Τα υβριδικά p τροχιακά στο αιθυλένιο σχηματίζουν π δεσμούς, επικαλυπτόμενα πλάγια σε δύο θέσεις, μία πάνω και μία κάτω από το επίπεδο του δεσμού.



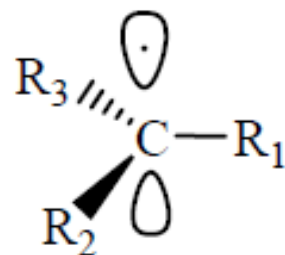
Φορμαλδεύδη (sp^2 υβριδισμός)



Καρβωνιόντα (sp^2 υβριδισμός)

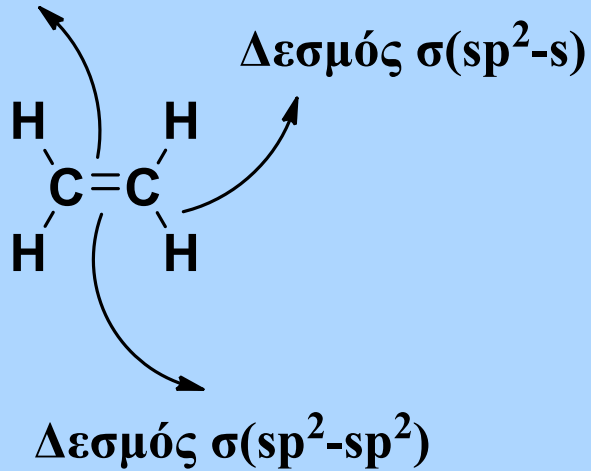


Ελεύθερες Ρίζες (sp^2 υβριδισμός)

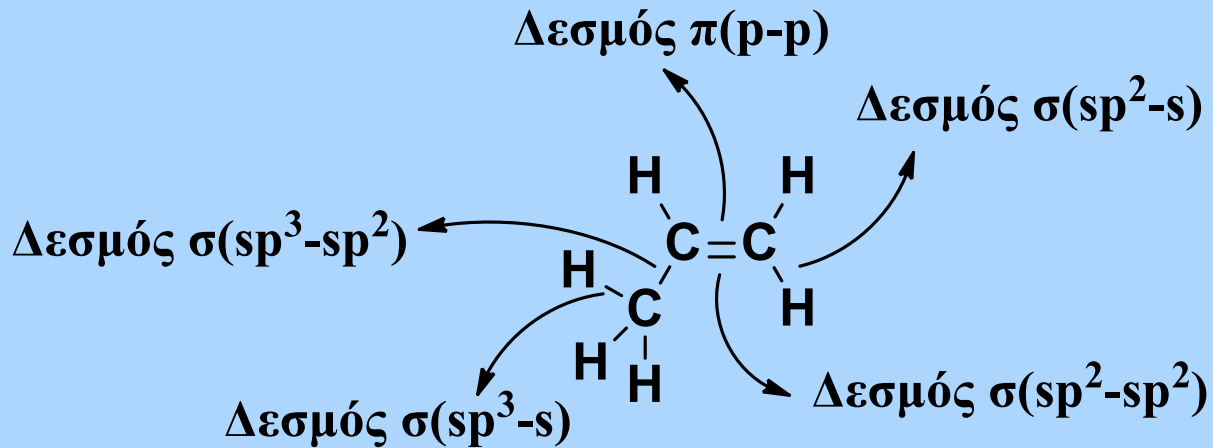


Δομή Αλκενίων

Δεσμός $\pi(p-p)$



Αιθυλένιο



Προπένιο

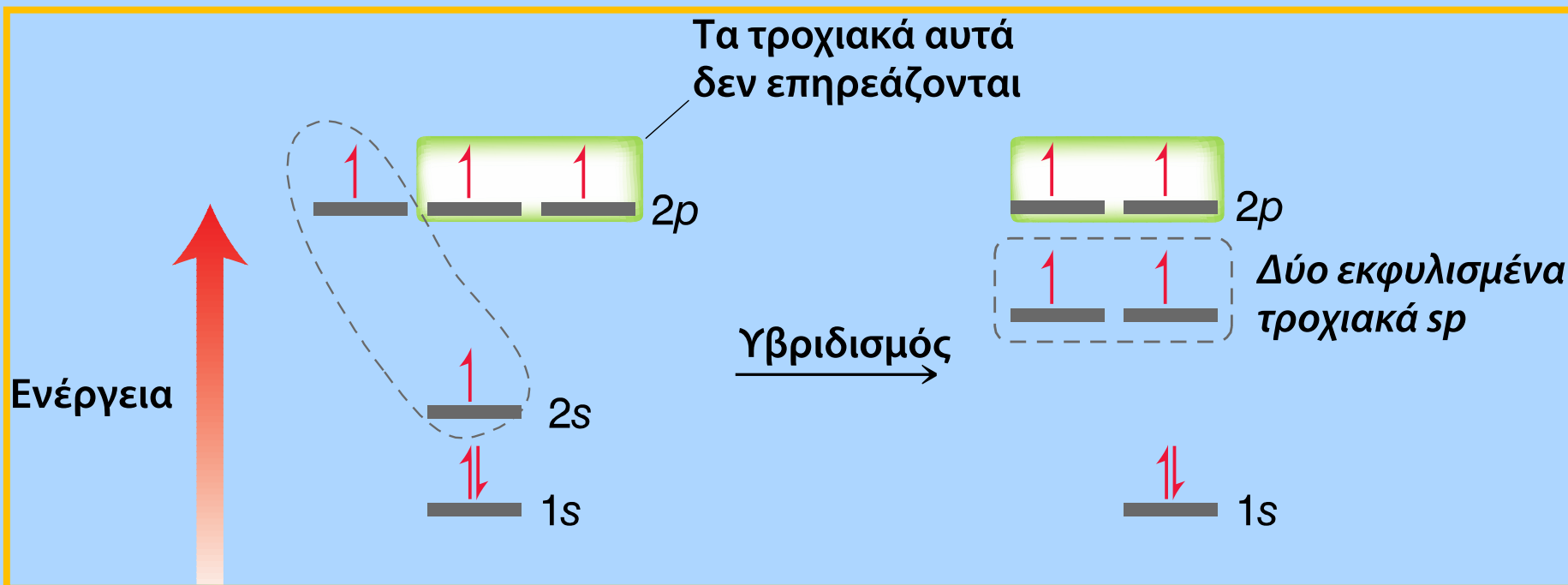
Αιθύνιο (ακετυλένιο). Τριπλός δεσμός



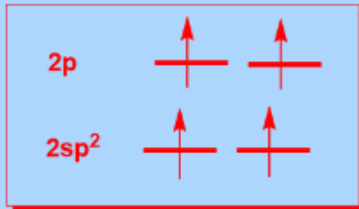
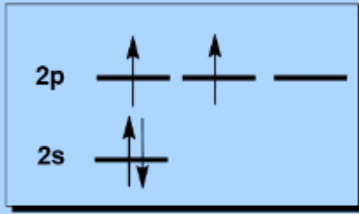
Ακετυλένιο

Κάθε άτομο άνθρακα στο αιθύνιο πρέπει να συνδεθεί με δύο άλλα άτομα, κι ως εκ τούτου χρειάζονται μόνο δύο υβριδικά ατομικά τροχιακά.

Υβριδοποίηση ενός s με ένα p ατομικό τροχιακό.



Υβριδισμός sp

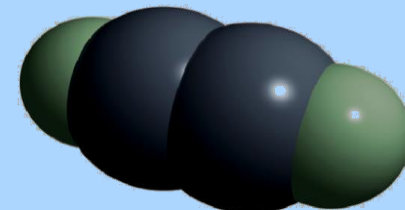
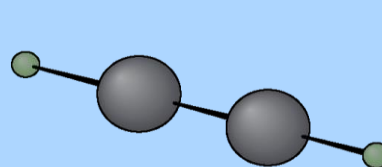
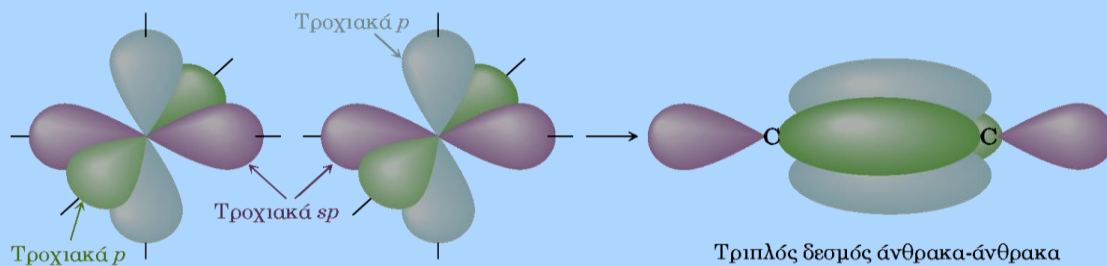
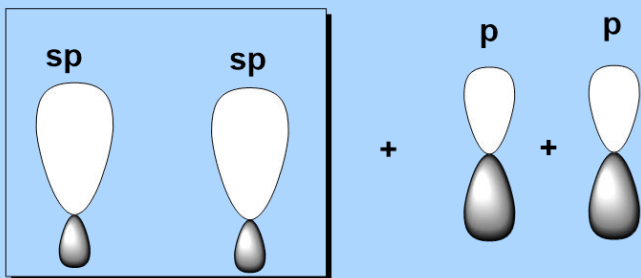
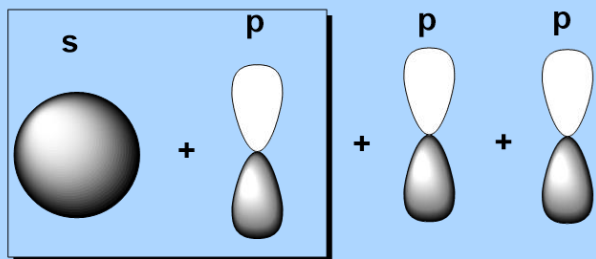


Το τροχιακό 2s αναμειγνύεται – **υβριδοποιείται** – με το ένα από τα τρία 2p τροχιακά.

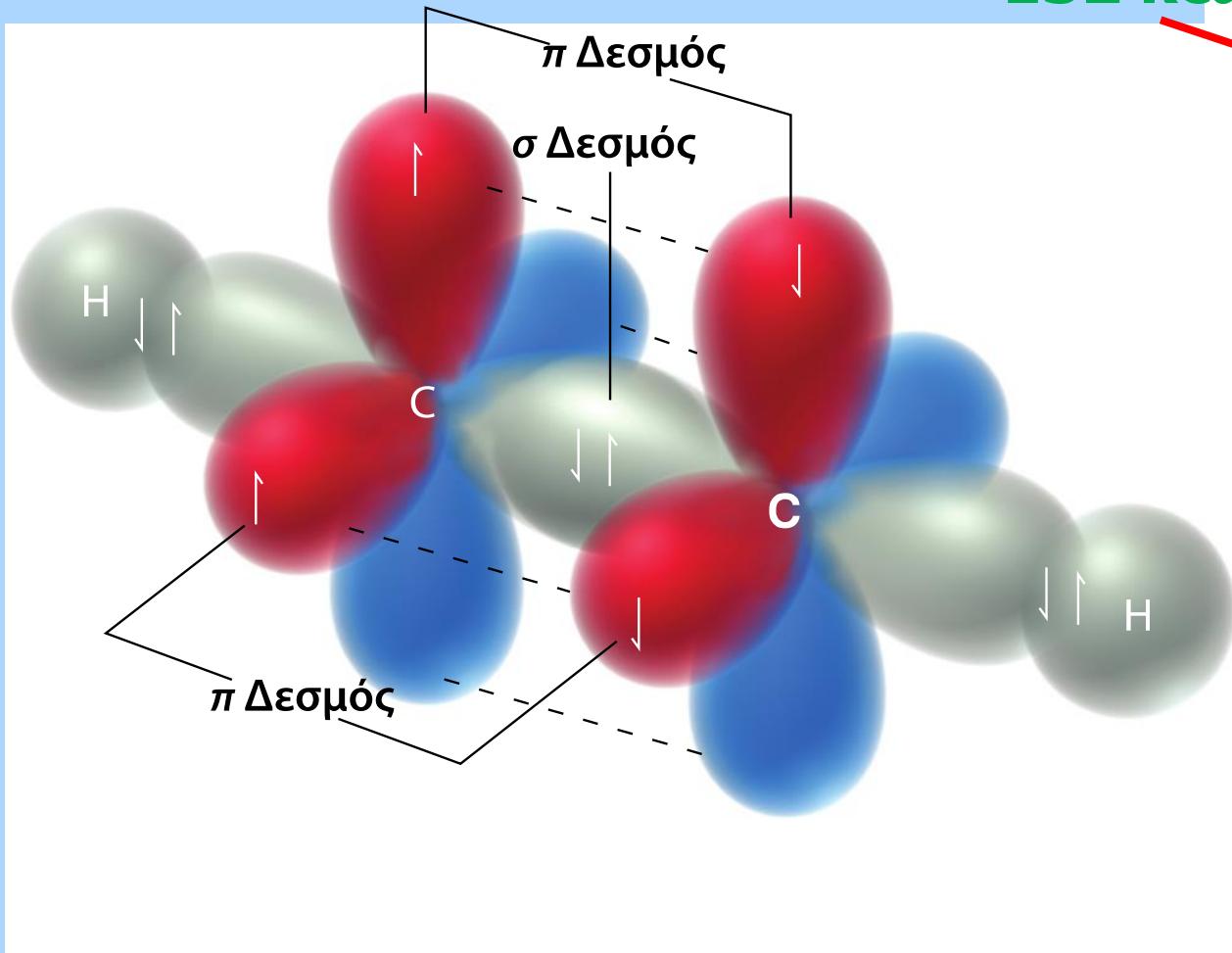
Προκύπτουν δυο **ισότιμα ενεργειακά** υβριδικά τροχιακά τύπου **sp** διατεταγμένα με γωνία 180° .

Απομένουν δύο αμιγή p τροχιακά κάθετα μεταξύ τους.

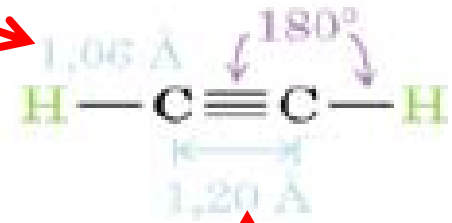
Δομή ακετυλενίου



Τα *sp* ατομικά τροχιακά επικαλύπτονται ΚΑΤΑ ΜΕΤΩΠΟ για να σχηματίσουν δεσμούς σ ενώ τα μη υβριδικά *p* τροχιακά επικαλύπτονται ΠΛΕΥΡΙΚΑ για να σχηματίσουν π δεσμούς



132 kcal/mol



200 kcal/mol

Ενέργεια δεσμού

Είναι η ενέργεια που εκλύεται όταν σχηματίζεται ένας δεσμός. Φανερώνει την ισχύ του δεσμού και εξαρτάται από το βαθμό αλληλεπικάλυψης των ατομικών τροχιακών.

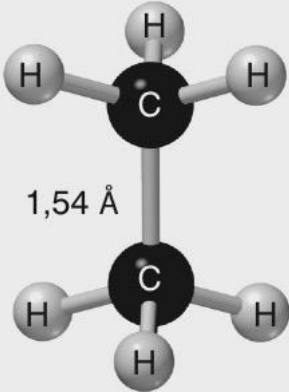
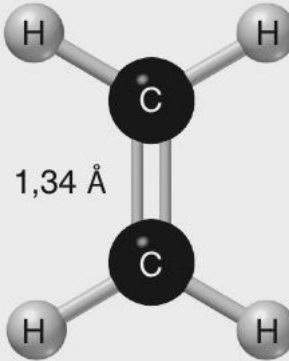
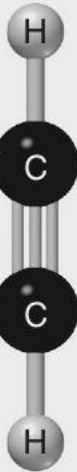
Μήκος δεσμού

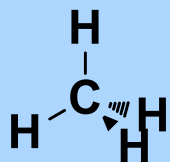
Είναι η απόσταση ανάμεσα στους δυο πυρήνες. Οι βραχύτεροι δεσμοί είναι ισχυρότεροι.

Γωνίες δεσμών

Εξαρτώνται από τη διάταξη των ατομικών τροχιακών.

ΠΙΝΑΚΑΣ 1.2 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΩΝ ΜΗΚΩΝ ΔΕΣΜΩΝ ΚΑΙ ΤΩΝ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΔΕΣΜΩΝ ΣΤΟ ΑΙΘΑΝΙΟ, ΣΤΟ ΑΙΘΥΛΕΝΙΟ ΚΑΙ ΣΤΟ ΑΚΕΤΥΛΕΝΙΟ

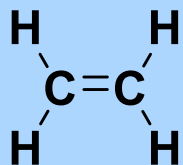
| | ΑΙΘΑΝΙΟ | ΑΙΘΥΛΕΝΙΟ | ΑΚΕΤΥΛΕΝΙΟ |
|------------------|---|--|---|
| ΔΟΜΗ |  |  |  |
| Μήκος Δεσμού C—C | 1,54Å | 1,34Å | 1,20Å |
| Ενέργεια Δεσμού | 368 kJ/mol | 632 kJ/mol | 820 kJ/mol |



Μήκος δεσμού C-H = 1,10 Å

Γωνία H-C-H = 109,5°

Ενέργεια δεσμού C-H = 438 KJ/mol



ένας σ-δεσμός C-C &
ένας π-δεσμός C-C

Μήκος δεσμού C-H = 1,10 Å

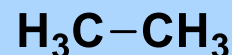
Μήκος δεσμού C=C = 1,33 Å

Γωνία H-C-H = 117,5°

Γωνία H-C-C = 121°

Ενέργεια δεσμού C-H = 444 KJ/mol

Ενέργεια δεσμού C=C = 611 KJ/mol

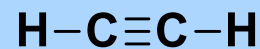


ένας σ-δεσμός C-C

Μήκος δεσμού C-C = 1,54 Å

Γωνία H-C-C = 109,5°

Ενέργεια δεσμού C-C = 376 KJ/mol



ένας σ-δεσμός C-C &
δύο π-δεσμοί C-C

Μήκος δεσμού C-H = 1,08 Å

Μήκος δεσμού C=C = 1,20 Å

Γωνία H-C-C = 180°

Ενέργεια δεσμού C-H = 552 KJ/mol

Ενέργεια δεσμού C-C = 835 KJ/mol

Ο π-δεσμός C-C είναι ασθενέστερος από τον σ-δεσμό C-C.

Όταν υπάρχει διπλός ή τριπλός δεσμός, **μόνο ο ένας είναι σ-δεσμός**, οι υπόλοιποι είναι π-δεσμοί.